

Zur Theorie der Supraleitung in planparallelen Schichten geringer Dicke *

HENNING RAUFUSS

Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen

(Z. Naturforsch. 22 a, 985—997 [1967]; eingegangen am 3. März 1967)

The GORKOV equations are solved for ideal planar films of superconductors. For the purpose of comparison, two different formulations of the self-consistency condition are used; the first is characterised by a cut-off factor in the energy integral, the second by the termination of the ω summation at the same cut-off value. Certain values of the film thickness (those corresponding to resonance intervals in the sense of THOMPSON and BLATT) are excluded, but they are not decisive to this treatment. By this means, a fairly accurate check of the error in the approximation is made possible. This allows a quantitative comparison of the critical temperatures and of the two forms of the gap function calculated from the two formulations of the basic equations.

At absolute zero, both formulations of the theory become equivalent and lead to essentially identical relations between the gap function and film thickness. However, the critical temperature which results from the termination of the ω summation is noticeably higher than that calculated with the help of the energy cut-off.

In dem gleichen Maße, wie die experimentelle Erforschung der Phänomene der Supraleitung auf immer dünneren Aufdampfschichten ausgedehnt wurde, stellte sich immer deutlicher die Frage nach den möglichen quantenmechanischen Auswirkungen dieser Annäherung der Schichtdicken an atomare Größenordnungen.

Als erste haben BLATT und THOMPSON^{1, 2} diese Frage aufgegriffen. Sie beschrieben das Ein-Teilchen-Verhalten der Elektronen mittels eines unendlich hohen Kastenpotentials², wie es durch das Ergebnis der vorausgegangenen maschinellen Rechnung¹ nahegelegt war. Als Modell für die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung diente – in der Ortsdarstellung – wie bei GORKOV³ das Kontaktpotential. In der Impulsdarstellung wurden dessen Matrixelemente in der seit BCS⁴ eingebürgerten Weise vereinfacht. Unter anderem wurde die vom Kontaktpotential in der Lücken-Gleichung (Gap-Gleichung) hervorgerufene Divergenz durch eine energieabhängige Beschränkung⁵ der an der supraleitenden Wechselwirkung beteiligten Ein-Teilchen-Zustände vermieden. Dabei blieb dahingestellt, ob die Benutzung dieser BSC-reduzierten Form der Wechselwirkung auch unter den nunmehr betrachteten, völlig andersartigen geometrischen Verhältnissen ihre Berechtigung behält.

Als Resultat fanden die Autoren eine resonanz-

artige Schichtdickenabhängigkeit des Lücken-Parameters beim absoluten Temperaturnullpunkt.

Kurz nach der Arbeit von THOMPSON und BLATT erschien eine Arbeit von FALK⁶, in der dasselbe Problem u. a. nochmals, nun allerdings mit den analytischen Mitteln der GREEN-Funktionen formuliert wurde. Im Rahmen dieser Rechenmethode bot sich sogleich auch der natürlichere Weg zur Vermeidung der durch die Kontakt-Wechselwirkung verursachten Divergenz an. Er besteht in der Einschränkung der in diesem Formalismus auftretenden ω -Summation⁷ statt einer Begrenzung des Energie-Intervalls.

FALK löste die GORKOV-Gleichungen für die GREEN-Funktionen des Supraleiters mit zunächst konstant ausgesetztem Paarpotential $\Delta(x) = \Delta$ und gewann durch Einsetzen des damit erhaltenen $F_\omega^+(x, x)$ in die Selbstkonsistenzbedingung eine erste, nun echt x -abhängige Iteration von $\Delta(x)$. Diese wurde über eine Mittelungsvorschrift mit der konstanten Ausgangsgröße Δ in Beziehung gesetzt und aus diesem Zusammenhang die Schichtdickenabhängigkeit des Lücken-Parameters Δ beim Temperaturnullpunkt entnommen. Bei geeigneter Wahl eines gewissen Parameters λ , der u. a. eine Folge der speziellen Definition der Mittelung ist, lässt sich – soweit mitgeteilt wurde – quantitative Übereinstimmung mit dem Resultat von THOMPSON und BLATT erzielen.

* D 7, Göttingen 1966.

¹ J. M. BLATT u. C. J. THOMPSON, Phys. Rev. Letters **10**, 332 [1963].

² C. J. THOMPSON u. J. M. BLATT, Physics Letters **5**, 6 [1963].

³ L. P. GORKOV, J. Exp. Theor. Phys. USSR **34**, 735 [1958]; engl. Übers. Soviet Phys.—JETP **7**, 505 [1958].

⁴ J. BARDEEN, L. N. COOPER u. J. R. SCHRIEFFER, Phys. Rev. **108**, 1175 [1957].

⁵ Diese Cut-off-Operation nennen wir kurz „Abschneiden in ϵ “.

⁶ D. S. FALK, Phys. Rev. **132**, 1576 [1963].

⁷ Im folgenden kurz als „Abschneiden in ω “ bezeichnet.



Die Erweiterung der Gültigkeit dieses Ergebnisses auf den ganzen supraleitenden Temperaturbereich bis hinauf zur Übergangstemperatur T_c wurde von FALK in einer Fußnote besprochen, wobei unklar bleibt, wie weit die dort gemachten Angaben auf Rechnungen beruhen bzw. eine Vermutung darstellen. Danach soll sich die Berücksichtigung endlicher Temperaturen lediglich in einem zusätzlichen Faktor $\text{th } \frac{1}{2} \beta E$ unter dem Energieintegral der Lücken-Gleichung auswirken, also gerade so, wie es sich schon bei der Behandlung des translations-invarianten Supraleiters unter Beschränkung der Energie-Integration ergab.

Die Resultate von THOMPSON und BLATT wie auch von FALK beruhen alle auf gewissen vereinfachenden

Annahmen; es soll der Zweck dieser Arbeit sein, einige der Fragen zu beantworten, die mit der Beurteilung der Güte dieser Näherungen zusammenhängen.

In Abschnitt 1 werden die im weiteren benötigten Ausgangsgleichungen bereitgestellt. Die Lösung der GORKOV-Gleichungen bei Abschneiden in ϵ ist weitgehend näherungsfrei möglich und wird – um als Anhalt bei der in Abschnitt 3 dargelegten, nicht ganz so geschlossen durchführbaren Auswertung des mit Abschneiden in ω formulierten Gleichungssystems dienen zu können – diesem in Abschnitt 2 vorangestellt. In Abschnitt 4 endlich werden die zuvor gewonnenen Aussagen mit den Ergebnissen der genannten Autoren verglichen.

1. Bereitstellung der Grundgleichungen

Die Beschreibung des Ein-Teilchen-Verhaltens der Elektronen in einer supraleitenden Schicht der Dicke a schließen wir an die Formulierung von THOMPSON und BLATT an.

Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung mit dem Ein-Teilchen-Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x < a \\ \infty & \text{für } x \leq 0, a \leq x \end{cases}, \quad -\infty \leq y, z \leq \infty \quad (1)$$

folgen mit $\hbar = 1$ die auf dem Periodizitätsquader (a, L, L) normierten Ein-Teilchen-Wellenfunktionen

$$\varphi_{nk}(x, \mathbf{r}) = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \exp i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \quad (2)$$

mit den Impulskomponenten⁸

$$k_x = \frac{n\pi}{a}, \quad k_y = \frac{2n_y\pi}{L}, \quad k_z = \frac{2n_z\pi}{L}, \quad n, \pm n_y, \pm n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ besetzen die Ein-Teilchen-Zustände eine Schar zu k_y, k_z paralleler und in k_x -Richtung äquidistanter Ebenen; wir werden sie kurz k_x -Ebenen nennen.

Als Zwei-Teilchen-Bewegungsgleichungen dienen die mit der Kontaktwechselwirkung

$$v(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = -V_0 \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \quad \mathbf{R} = (x, \mathbf{r}) \quad (3)$$

mit ortsunabhängigem Kopplungsparameter $V_0 > 0$ zu gewinnenden GORKOV-Gleichungen³

$$\left(i\omega_l + \frac{1}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - V(x) + \mu \right) G_{\omega_l}(x, x', \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Delta(x) F_{\omega_l}^+(x, x', \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4)$$

$$\left(i\omega_l - \frac{1}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + V(x) - \mu \right) F_{\omega_l}^+(x, x', \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Delta(x) G_{\omega_l}(x, x', \mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0 \quad (5)$$

für die GREEN-Funktionen G_{ω_l} und $F_{\omega_l}^+$. Die reell wählbare und gewählte Lücken-Funktion $\Delta(x)$ ist durch die Beziehung

$$\Delta(x) = \frac{V_0}{\beta} \sum_{\omega_l} F_{\omega_l}^+(x, x, 0) \quad (6)$$

⁸ Die den Impulskomponenten k_x und \mathbf{k} entsprechenden Energien werden später entweder als ϵ notiert, wenn sie sich auf den Ursprung des Impulsraumes beziehen, oder als \in wenn sie auf das chemische Potential μ reduziert sind. Infolgedessen bestehen mit (M =Elektronmasse)

$$\epsilon_n = \frac{1}{2M} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2, \quad \epsilon_k = \frac{1}{2M} k^2, \quad \epsilon_{nk} = \epsilon_n + \epsilon_k$$

die Beziehungen

$$\epsilon_{nk} = \epsilon_n + \epsilon_k = \epsilon_n + \epsilon_k = \epsilon_{nk} - \mu.$$

definiert. Darin bedeutet wie üblich (mit $k_B = 1$) β die reziproke Temperatur, T^{-1} . Ferner ist

$$\omega_l = (2l+1) \pi T \quad \pm l = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Der Index l an der Variablen ω möge einfacherer Schreibweise halber vorläufig unterdrückt werden.

Als Folge der Verwendung des Kontaktpotentials (3) divergiert der Ausdruck (6). Es ist u. a. das Ziel dieser Arbeit, die aus den beiden hauptsächlich benutzten Abschneide-Verfahren folgenden Resultate quantitativ zu vergleichen. Die explizite Formulierung erfolgt zweckmäßig in (n, \mathbf{k}) -Darstellung, zu der man mittels der FOURIER-Transformation

$$G_\omega(x, x', \mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2 a} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \int d^2\mathbf{k} G_\omega(n, n', \mathbf{k}) \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n'\pi x'}{a} \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}, \quad (8)$$

$$F_\omega^+(x, x', \mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2 a} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \int d^2\mathbf{k} F_\omega^+(n, n', \mathbf{k}) \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n'\pi x'}{a} \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \quad (9)$$

übergeht. Für die Lücken-Funktion ist die Darstellung

$$\mathcal{A}(x) = \frac{4}{2N+1} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \mathcal{A}(n, n') \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{n'\pi x}{a} \quad (10)$$

möglich, wenn man die Matrix \mathcal{A} durch

$$\mathcal{A}(n, n') = \frac{(2N+1) V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega} \int d^2\mathbf{k} F_\omega^+(n, n', \mathbf{k}) \quad (11)$$

definiert. Die transformierten GORKOV-Gleichungen nehmen dann die Gestalt

$$(i\omega - \epsilon_{nk}) G_\omega(n, n', \mathbf{k}) + \sum_{l, l'=1}^{\infty} \mathcal{A}(l, l') \sum_{m=1}^{\infty} F_\omega^+(m, n', \mathbf{k}) \frac{S(n m l l')}{2N+1} = \delta_{nn'}, \quad (12)$$

$$(i\omega + \epsilon_{nk}) F_\omega^+(n, n', \mathbf{k}) + \sum_{l, l'=1}^{\infty} \mathcal{A}(l, l') \sum_{m=1}^{\infty} G_\omega(m, n', \mathbf{k}) \frac{S(n m l l')}{2N+1} = 0 \quad (13)$$

an. Die Faktoren

$$S(n m l l') \equiv \frac{8}{a} \int_0^a dx \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{l\pi x}{a} \sin \frac{l'\pi x}{a} \quad (14)$$

$$= -\delta_{0, n+m+l-l'} - \delta_{0, n+m-l+l'} - \delta_{0, n-m+l+l'} + \delta_{0, n+m-l+l'} \\ + \delta_{0, n-m+l-l'} + \delta_{0, n-m-l+l'} - \delta_{0, n-m-l-l'} \quad (15)$$

fassen die Faltungseigenschaften der Produkte $\mathcal{A} \cdot F_\omega^+$ und $\mathcal{A} \cdot G_\omega$ zusammen. In Gl. (15) ist der Anteil $\delta_{0, n+m+l+l'}$ ausgelassen, weil alle vier Quantenzahlen ≥ 1 sind, ihre Summe also nicht verschwinden kann.

Das ursprünglich auf BCS zurückgehende Abschneide-Verfahren (Abschneiden in der Energie ϵ) lässt sich nun mit der Stufenfunktion

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}, \quad (16)$$

und der Abkürzung $\Theta_{nk} = \Theta(\omega_D - |\epsilon_{nk}|)$, worin ω_D die DEBYE-Frequenz bedeutet, durch

$$\mathcal{A}(n, n') = \frac{(2N+1) V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\omega_D} \int d^2\mathbf{k} \Theta_{nk} \Theta_{n'k} F_\omega^+(n, n', \mathbf{k}) \quad (11a)$$

ausdrücken.

Das in gewissem Sinne natürlichere „Abschneiden in ω “, das aus der Vorstellung einer durch retardierten Phononaustausch vermittelten Elektron-Elektron-Wechselwirkung entwickelt wurde, liefert andererseits die Form

$$\mathcal{A}(n, n') = \frac{(2N+1) V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \int d^2\mathbf{k} F_\omega^+(n, n', \mathbf{k}). \quad (11b)$$

2. Lösung der Gorkov-Gleichungen bei Abschneiden in ϵ

Bei Zugrundelegung der Gl. (11 a) tragen wegen der Θ -Faktoren unter dem Integral nur jene Ein-Teilchen-Zustände zur Wechselwirkung bei, die innerhalb der zum Ursprung des Impulsraumes konzentrischen Kugelschale mit den durch die Energien $\mu + \omega_D$ und $\mu - \omega_D$ bestimmten Radien liegen. Auf den k_x -Ebenen mit $\epsilon_n \leq -\omega_D$ sind dies Kreisringbereiche mit jeweils gleichem Flächeninhalt $2\pi\omega_D$, bzw. Kreisscheiben, sofern $|\epsilon_n| \leq \omega_D$. Rechnerischer Einfachheit halber werden wir alle jene Schichtdickenintervalle (Resonanz-Intervalle im Sinne von THOMPSON und BLATT) von der Betrachtung ausschließen, für die die letzte Ungleichung gilt.

Die durch $\epsilon_N < \omega_D < \epsilon_{N+1}$ definierte, von der Schichtdicke a abhängige Quantenzahl N nennt die Zahl der insgesamt an der Wechselwirkung beteiligten k_x -Niveaus und damit gleichzeitig den Rang der Lücken-Matrix Δ .

Eine weitere rechnerische Vereinfachung erreichen wir durch die Forderung

$$\mu - \omega_D + \epsilon_n \geq \mu + \omega_D - \epsilon_{n+1}, \quad n \leq N-1, \quad (17)$$

die besagt, daß sämtliche oben genannten Kreisringe paarweise überlappungsfrei bezüglich ihrer k_y , k_z -Erstreckung sind. Dadurch gilt in Gl. (11 a)

$$\Theta_{nk} \Theta_{n'k} = \Theta_{nk} \delta_{nn'}, \quad (18)$$

Mit Gl. (18) entsteht nun aus Gl. (11 a)

$$\Delta(n, n') = \Delta(n) \delta_{n, n'} = \frac{(2N+1) V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} \int d^2 \mathbf{k} \Theta_{nk} F_{\omega}^+(n, n, \mathbf{k}) \delta_{n, n'}, \quad (24)$$

womit sich die GORKOV-Gleichungen zu

$$(i\omega - \epsilon_{nk}) G_{\omega}(n, n', \mathbf{k}) + \sum_{l=1}^N \Delta(l) \sum_{m=1}^{\infty} F_{\omega}^+(m, n', \mathbf{k}) \frac{S(n m l l)}{2N+1} = \delta_{n, n'} \quad (25)$$

$$(i\omega + \epsilon_{nk}) F_{\omega}^+(n, n', \mathbf{k}) + \sum_{l=1}^N \Delta(l) \sum_{m=1}^{\infty} G_{\omega}(m, n', \mathbf{k}) \frac{S(n m l l)}{2N+1} = 0 \quad (26)$$

vereinfachen. Mit der Abkürzung

$$G_{\omega}^0(n, n', \mathbf{k}) \equiv G_{\omega}^0(n k) \delta_{n, n'} = \frac{\delta_{nn'}}{i\omega - \epsilon_{nk}} \quad (27)$$

für die GREEN-Funktion des normalleitenden Systems gewinnen wir durch Elimination von $G_{\omega}(n, n', \mathbf{k})$ die Gleichung

$$\begin{aligned} F_{\omega}^+(n, n', \mathbf{k}) &= G_{-\omega}^0(n k) G_{\omega}^0(n' k) \sum_{l=1}^N \Delta(l) \frac{S(n n' l l)}{2N+1} \\ &- G_{-\omega}^0(n k) \sum_{l, l'=1}^N \Delta(l) \Delta(l') \sum_{m, m'=1}^{\infty} G_{\omega}^0(m k) F_{\omega}^+(m', n', \mathbf{k}) \frac{S(n m l l) S(m m' l' l')}{(2N+1)^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

also strenge Diagonalität der Lücken-Matrix Δ . Die Bedingung (17) läßt sich mit der für diese Zwecke genügend genauen Beziehung

$$\mu \approx \frac{\pi^2 N^2}{2 M a^2} \quad (19)$$

umformen zu

$$N \lesssim \sqrt{\frac{\mu}{2\omega_D} (2n+1)}. \quad (20)$$

Soll die Lücken-Matrix in allen Indizes diagonal sein, ist $n=1$ zu setzen, so daß folgt

$$N \lesssim \sqrt{\frac{3\mu}{2\omega_D}}. \quad (21)$$

Bei Verwendung der schon von THOMPSON und BLATT benutzten Werte

$$\mu \approx 3 \cdot 10^4 \text{ } ^\circ\text{K} \quad \text{und} \quad \omega_D \approx 10^2 \text{ } ^\circ\text{K} \quad (22)$$

bedingt die Forderung (17) die Beschränkung auf den Bereich

$$N \lesssim 20 \quad \text{bzw.} \quad a \lesssim 70 \text{ \AA}. \quad (23)$$

Da aber das Resonanz-Verhalten der interessierenden Größen nach den Ergebnissen der genannten Autoren oberhalb dieses Schichtdickenbereichs schon weitgehend abgeklungen ist, bedeutet der Ausschluß größerer Schichtdicken keinen Verzicht auf wesentliches Detail.

Durch Iteration und Einsetzen in Gl. (24) erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(n) = & \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} \int d^2 \mathbf{k} \Theta_{nk} |G_{\omega}^0(nk)|^2 \left\{ \sum_{l=1}^N \mathcal{A}(l) \frac{S(nnl)}{2N+1} - \right. \\ & - \sum_{l', l'', l'''=1}^N \mathcal{A}(l') \mathcal{A}(l'') \mathcal{A}(l''') \sum_{m', m''=1}^{\infty} G_{\omega}^0(m'k) G_{-\omega}^0(m''k) \\ & \left. \cdot \frac{1}{(2N+1)^3} S(nm'l'l') S(m'm''l''l'') S(m''n l'''l''') \pm \dots \right\}. \quad (29) \end{aligned}$$

Diese störungstheoretische Entwicklung ist nunmehr wie üblich mittels Teilsummation über wenige Termtypen auszuwerten.

Zuerst führen wir den Ansatz

$$\mathcal{A}(l) = \mathcal{A} \cdot \Theta(N-l) \quad (30)$$

ein, dessen näherungsweise Berechtigung sich am Ergebnis erweisen wird. Damit lautet der $(2\nu+1)$ -te Term in der Klammer von Gl. (29)

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^{\nu} \mathcal{A}^{2\nu+1}}{(2N+1)^{2\nu+1}} \sum_{l', \dots, l \exp\{2\nu+1\}=1}^N \sum_{m', \dots, m \exp\{2\nu\}=1}^{\infty} G_{-\omega}^0(nk) G_{\omega}^0(m'k) \cdot \dots \cdot G_{-\omega}^0(m^{(2\nu)}k) G_{\omega}^0(nk) \\ \cdot S(nm'l'l') \cdot S(m', m''l''l'') \cdot \dots \cdot S(m^{(2\nu)}n l^{(2\nu+1)}l^{(2\nu+1)}), \quad n \leq N. \quad (31) \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Anteil dieses Ausdrucks, der durch Beschränkung aller Indizes $m^{(i)}$ auf die Werte 1 bis N entsteht, dann können wir – da auch der Index $n \leq N$ ist – von der Beziehung

$$\sum_{l=1}^N \frac{S(nnl)}{2N+1} = \delta_{n,m}, \quad n, m \leq N \quad (32)$$

Gebrauch machen. Damit gewinnen wir für besagte Anteile sofort die einfache Form

$$(-1)^{\nu} \frac{\mathcal{A}^{2\nu+1}}{(\omega^2 + \epsilon_{nk}^2)^{\nu+1}}, \quad (33)$$

so daß der Ausdruck (29) nach Summation der geometrischen Reihe aller Terme (33) als

$$\mathcal{A}(n) = \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} \int d^2 \mathbf{k} \Theta_{nk} \left\{ \frac{\mathcal{A}}{\omega^2 + E_{nk}^2} + R_n \right\} \quad (34)$$

geschrieben werden kann. Hierin ist $E_{nk} = \epsilon_{nk}^2 + \omega^2$, und R_n bedeutet die Gesamtheit aller jener Terme, in denen mindestens eine m -Summation von $N+1$ bis ∞ läuft.

Die Summation der obigen wie auch der in R_n noch auftretenden geometrischen Reihen unterliegt formal der Konvergenzbedingung $\mathcal{A}^2 < \omega^2 \leq \omega^2 + \epsilon_{nk}^2$, also wegen Gl. (7): $\mathcal{A}(T) < \pi T$. Jedoch berührt diese nicht die Allgemeingültigkeit der bei der Summation erhaltenen Funktionen. Diese Behauptung läßt sich durch Einsetzen von $\mathcal{A}(n)$ sowie der auf ganz entsprechendem Wege zu findenden GREEN-

Funktionen $F_{\omega}^+(n, n', \mathbf{k})$ und $G_{\omega}(n, n', \mathbf{k})$ in die GORKOV-Gleichungen verifizieren.

Der Reihenrest R_n wird im Anhang 1 ausgewertet. Dabei zeigt sich, daß er nur noch Beiträge enthält, die von zweiter und höherer Ordnung in dem Entwicklungsparameter $\alpha \equiv \mathcal{A}/\mu \approx 10^{-3}$ klein sind gegenüber den in Gl. (3) bereits abgespaltenen Hauptterm. Die Abschätzung allein der Anteile der Ordnung α^2 liefert

$$|R_n^{(1)}| < \frac{10N}{(2N+1)^2} \frac{\mu^2}{\epsilon_{N+2,k}^2} \frac{\mathcal{A}}{\omega^2 + E_{nk}^2} \cdot \alpha^2 \quad (35)$$

und mit den speziellen Werten von Gl. (22)

$$|R_n^{(1)}| < 4 \frac{\mathcal{A}}{\omega^2 + E_{kn}^2} \alpha^2. \quad (36)$$

Nach Einführung von Zahlenfaktoren f_n gemäß

$$0 \leq f_n < 1, \quad n \leq N \quad (37)$$

kann die Abschätzung (36) formal als Gleichung geschrieben werden, womit dann Gl. (34) die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(n) = & \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \\ & \cdot \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} \int d^2 \mathbf{k} \Theta_{nk} \frac{\mathcal{A}}{\omega^2 + E_{nk}^2} \{1 + 4f_n \alpha^2\} \quad (38) \end{aligned}$$

annimmt. Die scheinbare n -Abhängigkeit des α -unabhängigen Hauptterms beseitigen wir durch Übergang zu der Integrationsvariablen ϵ_{nk} , so daß die n, k -Indizierung außer an dem Faktor f_n unterbleibt.

ben kann:

$$\begin{aligned} \Delta(n) &= \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \\ &\cdot \sum_{\omega=-\infty}^{\omega_D} \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\Delta}{\omega^2 + E^2} \{1 + 4f_n(\epsilon^2)\}. \quad (39) \end{aligned}$$

Dies läßt sich schließlich noch umschreiben zu

$$\left| \frac{\Delta(n) - \Delta}{\Delta} \right| < 4\alpha^2, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (40)$$

woraus wir – bis auf Abweichungen der Größenordnung 10^{-6} – unmittelbar die Rechtfertigung für den Ansatz (30) entnehmen.

Im weiteren wollen wir die zu α^2 proportionale Korrektur in Anbetracht ihrer Geringfügigkeit außer acht lassen. Dann gewinnen wir durch Einsetzen der Beziehung

$$\frac{1}{E} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta E = \frac{2}{\beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\omega_D} \frac{1}{(2l+1)^2 \pi^2 T^2 + E^2} \quad (41)$$

in Gl. (38) als implizite Bestimmung für den Lücken-Parameter $\Delta(\bar{T}, a, N)$ die Gleichung

$$1 = \frac{(2N+1)V_0}{4\pi a} \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\operatorname{th} \frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}. \quad (42)$$

Leicht ist nun der Grenzfall $\Delta \rightarrow 0$ zu behandeln, durch den bei einem Übergang zweiter Art die Übergangstemperatur T_c definiert ist. Aus Gl. (29) folgt, daß in diesem Falle alle Glieder höherer Ordnung in Δ gegenüber dem linearen Term verschwinden. Das bedeutet die sogar exakte Gültigkeit von Gl. (42) mit $\Delta = 0$. Die Bestimmungsgleichung für T_c lautet deshalb

$$1 = \frac{(2N+1)V_0 M}{4\pi a} \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\operatorname{th} \frac{1}{2} \beta_c \epsilon}{\epsilon}. \quad (43)$$

Unter der Bedingung $T_c \ll T_D \equiv \omega_D$ kann in praktisch ausreichender Näherung

$$\begin{aligned} \tau_c &\equiv \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\operatorname{th} \frac{1}{2} \beta_c \epsilon}{\epsilon} \approx \ln \left(\frac{2\gamma}{\pi} \frac{T_D}{T_c} \right), \\ \ln \gamma &= C = 0,57721\dots \quad (44) \end{aligned}$$

gesetzt werden, womit sich die Möglichkeit der expliziten Darstellung

$$T_c(a, N) = \frac{2\gamma}{\pi} T_D \cdot \exp \left(- \frac{4\pi a}{(2N+1) M V_0} \right) \quad (45)$$

der kritischen Temperatur T_c als Funktion der Schichtdicke bietet. Die Funktion T_c weist keine explizite Abhängigkeit vom chemischen Potential μ auf. Dieses geht aber implizit und durchaus entscheidend über die Definition

$$| \in_N | = \left| \frac{\pi^2 N^2}{2 M a^2} - \mu(a, N) \right| \leq \omega_D \quad (46)$$

der Resonanz-Intervalle in den Verlauf von T_c ein, der in Abb. 1 über der Schichtdicke aufgetragen ist. Aus der a -Abhängigkeit des chemischen Potentials – wie sie von THOMPSON und BLATT wie auch von FALK

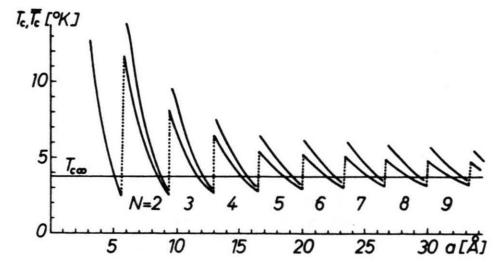


Abb. 1. T_c (untere) und \bar{T}_c (obere Kurvenstücke) als Funktionen der Schichtdicke a gemäß Gl. (45) bzw. Gl. (77). Die gestrichelten Verbindungsstücke der T_c -Kurvenäste sind willkürlich, aber in hier ausreichender Näherung als gerade angenommen. Parameter: $T_D = 100$ °K, $T_{c\infty}$ = Übergangstemperatur des unendlichen Supraleiters = 3,75 °K.

bestimmt wurde – folgt u. a. die besonders bei kleinsten Schichtdicken merkliche Nicht-Äquidistanz der Resonanzstellen.

Aus den Gln. (10), (24) und (30) ergibt sich schließlich die im Grenzfall $T = T_c$ exakte, aber auch für $T < T_c$ bis auf Korrekturen der Ordnung α^2 gültige Ortsdarstellung der Lücken-Funktion

$$\Delta(x) = \frac{4}{2N+1} \sum_{n=1}^N \sin^2 \frac{n\pi x}{a}. \quad (47)$$

Die vereinfachende Wirkung der Bedingung (17) bestand in der Ausschaltung der Außerdiagonalelemente der Lücken-Matrix. Zusammen mit der Bedingung $|\in_n| < \omega_D$ lieferte das die völlige Entartung der Lücken-Matrix und daher unmittelbar auch die Eindeutigkeit der Lösung (43), (47).

Bei Verzicht auf die Bedingung (17) lautet die linearisierte Lücken-Matrix-Gleichung allgemeiner

$$\begin{aligned} \Delta(n, n') &= \frac{(2N+1) M V_0}{4\pi a} \tau_c(n, n') \\ &\cdot \sum_{l, l'=1}^N \Delta(l, l') \frac{S(n n' l l')}{2N+1}, \quad n, n' = 1, 2, \dots, N, \quad (48) \end{aligned}$$

worin $\tau_c(n, n')$ die zur Temperatur T_c genommene Matrix

$$\tau(n, n') = \frac{1}{2\pi M \beta} \sum_{\omega=-\infty}^{\infty} \int d^2\mathbf{k} \frac{\Theta_{nk} \Theta_{n'k}}{(-i\omega + \epsilon_{nk})(i\omega + \epsilon_{n'k})} \quad (49)$$

bedeutet. Man erkennt durch Einsetzen, daß die Gl. (43) auch diese allgemeinere Lücken-Gleichung löst. Die Eindeutigkeit dieser Lösung ist aber nun ohne Diskussion der vollständigen Determinanten-Bedingung des Systems (48) nicht mehr feststellbar.

Zum Schluß dieses Abschnitts sei noch der Grenzfall $T=0$ betrachtet. Die th-Funktion in Gl. (42) wird in diesem Fall gleich eins, so daß der Lücken-Parameter nach Integration in der Form

$$\Delta_0 = \frac{\omega_D}{\operatorname{sh} \frac{4\pi a}{(2N+1)MV_0}} \quad (50)$$

oder – solange Δ_0 hinreichend klein gegenüber $2\omega_D$ bleibt – genähert als

$$\Delta_0 \approx 2\omega_D \exp\left(-\frac{4\pi a}{(2N+1)MV_0}\right) \quad (51)$$

dargestellt werden kann. Zusammen mit Gl. (45) ergibt sich hieraus die Beziehung

$$\Delta_0(a) \approx \frac{\pi}{\gamma} T_c(a) \approx 1,76 T_c(a). \quad (52)$$

3. Lösung der Gorkov-Gleichungen bei Abschneiden in ω

Im vorigen Abschnitt bewirkte die Beschränkung auf hinreichend dünne Schichten zusammen mit dem Ausschluß der Resonanz-Intervalle die strenge Gleichheit der Diagnalelemente der Matrix (49) sowie das

$$\begin{aligned} \Delta(n) = & \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{+\omega_D} \int d^2\mathbf{k} |G_\omega^0(n, k)|^2 \left\{ \sum_{l=1}^N \Delta(l) \frac{S(n, n, l, l)}{2N+1} \right. \\ & - \sum_{l', l'', l'''=1}^N \Delta(l') \Delta(l'') \Delta(l''') \sum_{m', m''=1}^{\infty} G_{\omega}^0(m', k) G_{-\omega}^0(m'', k) \\ & \left. \cdot \frac{1}{(2N+1)^3} S(n, m', l', l'') S(m', m'', l'', l''') S(m'', n, l''', l''') \pm \dots \right\}, \quad (57) \end{aligned}$$

in der sie nun auch völlig analog Gl. (29) behandelt werden kann. Insbesondere bleibt die Abschätzung (36) formal gültig, womit die Gültigkeit der Beziehung

$$1 = \frac{(2N+1)V_0}{8\pi^2 a \beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \int d^2\mathbf{k} \frac{1}{\omega^2 + E_{nk}^2} \quad (58)$$

Verschwinden aller ihrer Außendiagonalelemente. Die damit erzielte Reduktion des Gleichungssystems für die Elemente der Lücken-Matrix Δ auf die Gleichung für die eine Größe Δ ist in dem nun zu betrachtenden Fall – zumindest mit jener Strenge – nicht mehr möglich.

Der Unterschied zwischen den Definitionen (11 a) und (11 b) der Lücken-Matrix berührt nicht die allgemeine Struktur der iterierten Lücken-Gleichung

$$\Delta(n, n') = \tau(n, n') F_{nn'}(\Delta), \quad (53)$$

worin F als Funktion der Lücken-Matrix zu verstehen ist. Daher hat die analog der Matrix $\tau(n, n')$, Gl. (49), nun jedoch mit Abschneiden in ω statt in ϵ definierte Matrix $\bar{\tau}$ denselben entscheidenden Einfluß auf die gegenseitige Größenordnung der $\Delta(n, n')$ wie im vorigen Abschnitt die Matrix τ . Im Anhang 2 werden die Elemente $\bar{\tau}(n, n')$ näherungsweise berechnet bzw. abgeschätzt. Diese Diskussion ergibt, daß die Vereinfachung

$$\bar{\tau}(n, n') = \bar{\tau} \delta_{nn'} \Theta(N-n), \quad n, n' = 1, 2, \dots \quad (54)$$

bis auf Abweichungen um weniger als 1% zulässig ist, solange die mittels

$$|\epsilon_n| < 100 \frac{T_D - \pi T_c}{\pi \ln \frac{2\gamma T_D}{\pi T_c}} \quad (55)$$

gekennzeichneten Schichtdicken-Intervalle [mit Gl. (22): $|\epsilon_n| \lesssim 10\omega_D$] ausgeschlossen werden und außerdem die Schichtdicke insgesamt durch

$$N^2 < 0,8 \mu/\omega_D \quad (56)$$

[mit Gl. (22): $N \lesssim 15$ bzw. $a \lesssim 50 \text{ \AA}$] begrenzt bleibt. Die Lücken-Gleichung reduziert sich unter diesen Voraussetzungen auf die zu Gl. (29) analoge Form

im Rahmen der Näherung (54) gesichert ist. Darüber hinaus kommt der Abschätzung (36) keine Bedeutung für den vorliegenden Fall zu, weil ja durch die Voraussetzung (54) schon Fehler nahe der Prozentgrenze bedingt sind.

In Gl. (58) läßt sich sofort das ϵ -Integral ausführen, wobei die Integrationsgrenzen (ϵ_n, ∞) we-

gen Gl. (54) durch $(-\infty, \infty)$ ersetzt werden dürfen:

$$1 = \frac{(2N+1)MV_0}{4\pi a} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=\omega_D}^{\omega_D} \frac{\pi}{V\omega^2 + \Delta^2}. \quad (59)$$

Da eine geschlossene Auswertung dieses Ausdrucks mit einfachen Mitteln nicht möglich zu sein scheint, betrachten wir zunächst die Grenzfälle $T = \bar{T}_c$ und $T = 0$ (Überstreichung des T_c soll wie bei $\bar{\tau}$ die Definition durch Abschneiden in ω andeuten, zum Unterschied von den mit Abschneiden in ϵ erhaltenen entsprechenden unüberstrichenen Größen).

die explizit die Gestalt

$$T_c = \bar{T}_c \frac{T_D - \pi \bar{T}_c}{T_D} \exp \left\{ \frac{5\pi^2 \bar{T}_c^2}{6T_D(T_D - \pi \bar{T}_c)} - \frac{\pi^3 \bar{T}_c^3 (T_D + \pi \bar{T}_c)}{2T_D(T_D - \pi \bar{T}_c)(T_D + 2\pi \bar{T}_c)(T_D + 3\pi \bar{T}_c)} \right\} \quad (62)$$

hat. Die an sich zweckmäßiger Darstellung dieser Relation durch ihre inverse Form $\bar{T}_c = \bar{T}_c(T_c)$ ließe sich nicht ohne weitere Näherungen gewinnen. Wir verzichten deshalb auf ihre formale Wiedergabe und verweisen statt ihrer auf Abb. 2.

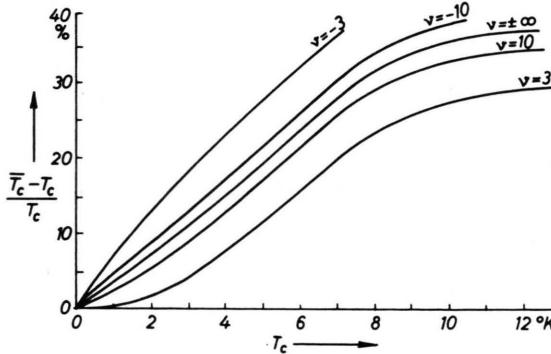


Abb. 2. Relative Abweichung von \bar{T}_c gegenüber T_c bei $T_D = 100^\circ\text{K}$. Definition des Parameters v : $|\epsilon_N| = v T_D$ bzw. $\epsilon_{N+1} = -v T_D$. Die Kurve mit $v = -\infty$ entspricht der nullten Näherung, Gl. (62), die übrigen Kurven folgen aus Gl. (77) für deren Gültigkeitsgrenzen und $N=2$.

Die Neuformulierung von Gl. (11 a) in der Form (11 b) äußert sich also in einer Vergrößerung der T_c -Werte vermöge eines selbst T_c -abhängigen Faktors und ist in Abb. 1 durch die gegenüber der Kurve T_c angehobenen Kurvenstücke \bar{T}_c dargestellt.

Die Größe \bar{T}_c hängt vermöge Gl. (62) außer von T_c auch noch von der DEBYE-Temperatur T_D bzw. der DEBYE-Frequenz ω_D ab. Die Form dieser Abhängigkeit wird demgemäß wesentlich durch Einzelheiten der auf die ω -Summation wirkenden Abschneide-

Als Bestimmungsgleichung für \bar{T}_c ergibt sich aus Gl. (59) mit Gl. (A 2.8)

$$1 = \frac{(2N+1)MV_0}{4\pi a} \bar{\tau}_c. \quad (60)$$

Wir erhalten aus dem Vergleich dieser Formel mit dem entsprechenden früheren Ergebnis, Gln. (43) und (44), bei demselben Wert der Schichtdicke a wie auch des Kopplungsparameters V_0 die einfache Beziehung

$$\tau_c = \bar{\tau}_c, \quad (61)$$

vorschrift beeinflußt. Für eine Rechnung praktikabel, wenn auch sicherlich zu weitgehend idealisiert, ist wohl nur die für Gl. (11 b) gewählte Form. Wäre die Abschneidevorschrift in Gl. (11 b) mittels eines für $\omega \geq \omega_D$ stetig abklingenden Dämpfungsfaktors statt der in den Summationsgrenzen verarbeiteten Stufenfunktion $\Theta(\omega_D - |\omega|)$ formuliert worden, hätte sich vermutlich eine geringere Differenz zwischen \bar{T}_c und T_c ergeben.

Das Verhalten der Lücken-Funktion $\Delta(x)$ im Grenzfall $T = \bar{T}_c$ wird in der soweit behandelten Näherung (54) wiederum durch Gl. (47) beschrieben.

Der andere Grenzfall, $T = 0$, erlaubt den Übergang von der ω -Summe zum ω -Integral, so daß Gl. (59) in die mit Gl. (50) identische Beziehung

$$\Delta_0 = \omega_D \left[\operatorname{sh} \frac{4\pi a}{(2N+1)MV_0} \right]^{-1} \quad (63)$$

übergeht.

Um über die bisher in diesem Abschnitt benutzte Näherung (54) hinauszukommen, wollen wir nun noch am Grenzfall der kritischen Temperatur den Einfluß der n -Abhängigkeit der Diagonalelemente $\bar{\tau}_c(n)$ diskutieren. Dabei soll weiterhin die Bedingung (56) gelten, die einmal die Außendiagonalelemente $\bar{\tau}_c(n, n')$ unberücksichtigt zu lassen gestattet, die aber zum anderen auch eine erhebliche Vereinfachung des an die Stelle von Gl. (54) tretenden Ansatzes erlaubt. Es genügt nämlich, entweder allein die Abweichung des Elements $\bar{\tau}_c(N)$ von $\bar{\tau}_c$ in Rechnung zu stellen oder allein die des Elements $\bar{\tau}_c(N+1)$ von dem Wert Null.

Beginnen wir mit dem ersten Fall: Der Ansatz lautet mit den Gln. (A 2.7), (A 2.8) und (A 2.13)

$$\bar{\tau}_c(n) = \begin{cases} \bar{\tau}_c & \dots n < N, \\ \bar{\tau}_c - \delta \bar{\tau}_c(N) & \dots n = N, \\ 0 & \dots n > N. \end{cases} \quad (64)$$

Die Lücken-Gleichung schreibt sich zunächst unter Benutzung der Gln. (43) und (44)

$$(2N+1) \tau_c \Delta(n) - \bar{\tau}_c(n) \left\{ \Delta(n) + 2 \sum_{l=1}^N \Delta(l) \right\} = 0 \quad (65)$$

und mit Gl. (59) bei formal zu $\bar{\tau}_c(n)$ analogem Ansatz für $\Delta(n)$

$$(2N+1) (\bar{\tau}_c - \tau_c) \Delta - 2 \bar{\tau}_c \delta \Delta(N) = 0, \quad (66)$$

$$(2N+1) (\bar{\tau}_c - \tau_c - \delta \bar{\tau}_c(N)) \Delta + [(2N+1) \tau_c - 3 \bar{\tau}_c + 3 \delta \bar{\tau}_c(N)] \delta \Delta(N) = 0. \quad (67)$$

Die zugehörige Determinanten-Bedingung

$$(\bar{\tau}_c - \tau_c)^2 + [2N \tau_c + \delta \bar{\tau}_c(N)] (\bar{\tau}_c - \tau_c) + 2 \tau_c \delta \bar{\tau}_c(N) = 0 \quad (68)$$

definiert die Übergangstemperatur T_c . Ihre Auflösung ist genähert

$$\bar{\tau}_c - \tau_c = \frac{1}{N} \delta \bar{\tau}_c(N). \quad (69)$$

Diese Beziehung tritt also für die durch

$$-10 \omega_D \lesssim \epsilon_N \lesssim -3 \omega_D \quad (70)$$

definierten Schichtdicken-Intervalle an die Stelle von Gl. (62).

$$T_c = \bar{T}_c \frac{T_D - \pi \bar{T}_c}{T_D} \exp \left\{ \frac{5 \pi^2 \bar{T}_c^2}{6 T_D (T_D + \pi \bar{T}_c)} - \frac{\pi^3 \bar{T}_c^3 (T_D + \pi \bar{T}_c)}{2 T_D (T_D - \pi \bar{T}_c) (T_D + 2 \pi \bar{T}_c) (T_D + 3 \pi \bar{T}_c)} + \frac{T_D - \pi \bar{T}_c}{\pi} \left(\frac{1}{N} \Big|_{\epsilon_N} - \frac{4N}{(2N+1)^2 \epsilon_{N+1}} \right) \right\}, \quad (77)$$

und diese Näherung unterliegt, abgesehen von Gl. (56), nur noch der Einschränkung Gl. (A 2.6). Aus Gl. (77) liest man ab, daß beide Korrekturen im Sinne einer Abflachung des Resonanzverhaltens wirken. Sie spielen eine merkliche Rolle nur bei den ersten Resonanzen, d. h. für kleine N .

4. Vergleich mit den Ergebnissen von Thompson und Blatt sowie von Falk

Bei der formalen Behandlung in den vorangehenden Abschnitten haben wir uns um die Einhaltung einer bestimmten Rechengenauigkeit bemüht, so daß wir nun in der Lage sind, die Gültigkeit der von

Ganz entsprechend verläuft die Ableitung für die Intervalle

$$3 \omega_D \lesssim \epsilon_N \lesssim 10 \omega_D, \quad (71)$$

für die man

$$\bar{\tau}_c(n) = \begin{cases} \bar{\tau}_c & \dots n \leq N, \\ \delta \bar{\tau}_c(N+1) & \dots n = N+1, \\ 0 & \dots n > N+1 \end{cases} \quad (72)$$

anzusetzen hat. Den Gln. (66) und (67) entspricht jetzt das System

$$(2N+1) (\bar{\tau}_c - \tau_c) \Delta - 2 \tau_c \cdot \delta \Delta(N+1) = 0 \quad (73)$$

$$2N \delta \bar{\tau}_c(N+1) \Delta + [(2N+1) \tau_c - 3 \delta \bar{\tau}_c(N+1)] \delta \Delta(N+1) = 0, \quad (74)$$

und die Determinanten-Bedingung führt auf die Lösung

$$\bar{\tau}_c - \tau_c \approx - \frac{4N}{(2N+1)^2} \delta \bar{\tau}_c(N+1). \quad (75)$$

Wegen Gl. (56) fällt jeweils die Korrektur in Gl. (69) oder die in Gl. (75) – wenn nicht gar beide – in die zugelassene Rechengenauigkeit, und daher können beide Beziehungen zu

$$\bar{\tau}_c - \tau_c = \frac{1}{N} \delta \bar{\tau}_c(N) - \frac{4N}{(2N+1)^2} \delta \bar{\tau}_c(N+1) \quad (76)$$

zusammengefaßt werden. Mit den Gln. (A 2.12) und (A 2.13) wird daraus explizit

THOMPSON und BLATT wie auch von FALK gewonnenen Aussagen zu beurteilen.

Die erste Frage betraf die Gültigkeit des BSC-reduzierten Ansatzes der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung auch im Fall von Schichtgeometrie des Supraleiters. Auf diesem Ansatz beruht die Rechnung von THOMPSON und BLATT². Da jene Arbeit vom Abschneiden in ϵ ausgeht, beziehen wir uns zum Vergleich der BSC-Methode mit dem GORKOV-Formalismus zunächst auf die Rechnung von Abschnitt 2.

Der mit der GORKOV-Theorie gegenüber dem BSC-Ansatz erreichte Gewinn an Allgemeinheit äußert sich danach genau in dem Reihenrest R_n der Gl. (34), der aus der vollständigen Berücksichtigung der Zwi-

schenzustände in den höheren Gliedern der Entwicklung (29) resultierte. Um also die GORKOV-Gleichungen (24), (25) und (26) auf eine zur BSC-Lücken-Gleichung äquivalente Form zu reduzieren, hätte man lediglich die m -Summationen in den Gln. (25) und (26) ebenfalls der Abschneidevorschrift zu unterwerfen. Gl. (40) zeigt, daß der quantitative Unterschied zwischen den beiden Ansätzen völlig belanglos ist.

Von geringfügigen Fehlern ($\lesssim 1\%$), die aus der unterdrückten n -Abhängigkeit der Lücken-Matrix-Elemente erwachsen, abgesehen führt die Rechnung mit Abschneiden in ω auf dieselbe explizite a -Abhängigkeit des Lücken-Parameters wie zuvor die Rechnung mit Abschneiden in ϵ [Gln. (63) und (50)]. Diese Identität war zu erwarten; denn in beiden Fällen bedingt der Übergang $T \rightarrow 0$ den Übergang von der ω -Summation zur ω -Integration, so daß über einen in ϵ und ω symmetrischen Integranden bezüglich beider Variablen integriert werden muß. Damit verschwindet aber in diesem Grenzfall der Wesensunterschied zwischen dem Abschneiden in ϵ und dem in ω .

Der von THOMPSON und BLATT benutzte Ansatz ist also zumindest bei Beachtung der Bedingungen (55) und (56) durch das Resultat, Gl. (63), gerechtfertigt.

Die von FALK durchgeführte Rechnung müßte nach dem zuletzt Gesagten zwangsläufig auf das THOMPSONSche Resultat führen. Die Notwendigkeit der numerischen Anpassung mittels eines geeignet zu wählenden Parameterwertes ($\lambda = 0,82$ in ⁶) hat zwei Gründe. Der erste besteht in dem Ansatz $\Delta(x) = \Delta = \text{const}$, der das Auftreten der Faltungs-Faktoren $S(n, n', l, l')$ in den GORKOV-Gleichungen verhindert und an ihre Stelle einfache KRONECKER- δ -Faktoren setzt. Die Folge ist ein Faktor $2N$ statt $2N+1$ in Gl. (63), ein Unterschied, der sich bei kleinen N deutlich bemerkbar macht.

Die hierdurch verursachte Abweichung vom Ergebnis von THOMPSON und BLATT konnte nicht ohne eine zusätzliche Freiheit beseitigt werden. Eine solche wurde aber gerade in Form der Mittelungsvorschrift geschaffen, vermöge deren die x -abhängige erste Iteration der Lücken-Funktion mit dem Ansatz in Beziehung gesetzt wird. Diese Vorschrift, nach der FALK die Mittelung nicht auf die wahre Schichtdicke, sondern auf eine Art Halbwertsdicke der Verteilung der supraleitenden Elektronen bezieht, ist, wie die Rechnungen der Abschnitte 2 und 3 zeigen, vom formalen Standpunkt aus überflüssig.

Ferner wurde von FALK bemerkt, daß die zunächst nur für $T = 0$ erhaltene Lücken-Gleichung nach Erweiterung des Energie-Integranden um einen Faktor $\frac{1}{2}\beta E$ auf den gesamten „supraleitenden“ Temperaturbereich $0 \leq T \leq T_c$ angewandt werden können. Bei Abschneiden in ϵ ergibt dies, wie wir aus Gl. (42) ersahen, tatsächlich die richtige Beziehung. Die Behandlung des Problems in Abschnitt 3 zeigte jedoch, daß für größere Werte der kritischen Temperatur quantitativ durchaus wesentliche Abweichungen zwischen den mit beiden Abschneide-Formulierungen gewonnenen Resultaten bestehen. Diese Unterschiede sind hauptsächlich eine Folge der Anwendung der Gl. (A 2.10) auf Gl. (61) und wachsen mit der Temperatur. Die prozentualen Unterschiede zwischen \bar{T}_c und T_c , wie sie in Gl. (77) zum Ausdruck kommen, können daher sogleich auch als obere Grenze entsprechender Differenzen des Lücken-Parameters im Temperaturbereich $0 < T \leq T_c$ gelten.

Die bei Abschneiden in ϵ innerhalb gewisser Grenzen gültige Beziehung (52)

$$\Delta_0(a) = \text{const} \cdot T_c(a),$$

gilt in vergleichbarer Näherung nicht mehr, sobald die beiden darin verknüpften Größen auf der Grundlage der ω -Abschneide-Operation ermittelt sind; denn dem durch Gl. (77) beschriebenen Unterschied zwischen T_c und \bar{T}_c steht keine entsprechende Verschiedenheit bei der Lücken-Funktion $\Delta_0(a)$ gegenüber.

Herrn Prof. Dr. G. LÜDERS danke ich für die Anregung dieser Arbeit und für ihre stete Förderung.

Anhang

1. Auswertung des Korrekturterms R_n

Die in Gl. (34) auftretende Größe R_n umfaßt gemäß ihrer Definition genau alle jene Einzelterme der Entwicklung (29), in denen sich mindestens eine der m -Summationen von $N+1$ bis ∞ erstreckt. Wir klassifizieren die durch R_n dargestellte Gesamtheit von Termen nach der Zahl dieser in jedem Einzelbeitrag vorkommenden von $N+1$ bis ∞ laufenden m -Summationen, und überzeugen uns sogleich davon, daß auf diese Weise eine größerenordnungsmäßige Unterteilung in R_n erreicht ist. Dazu braucht man nur den ungünstigsten Fall $m = N+1$ zu betrachten, für den unter Berücksichtigung von Gl. (23) und (19)

$$\epsilon_{mk} \approx \frac{\pi^2}{2 M a^2} [(N+1)^2 - N^2] \approx \frac{2N+1}{N^2} \mu \gtrsim \frac{1}{10} \mu$$

wird, so daß die mit diesem ϵ_{nk} gebildete G^0 -Funktion nicht die Größenordnung $10/\mu$ überschreiten kann, während die G^0 -Faktoren für Quantenzahlen $m \leq N$ immerhin die Größenordnung $1/\Delta$ erreichen.

Wir betrachten also zunächst alle jene Einzelterme, in denen gerade eine m -Summation von $N+1$ bis ∞ läuft. Ihre Gesamtheit kann durch

$$\sum_{r=0}^{n-1} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^\nu \frac{2\nu\Delta}{(2N+1)^2} \left(\frac{\Delta^2}{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2} \right) \frac{1}{(-i\omega + \epsilon_{nk})(i\omega + \epsilon_{s+2r,k})} \quad (\text{A 1.1})$$

dargestellt werden, worin zur Abkürzung $s = 2N - (n-2)$ gesetzt ist. In einem Term, der $2\nu+2$ G^0 -Faktoren enthält, kann [vgl. dazu Gl. (31)] die unbeschränkte m -Summation in jedem der 2ν inneren G^0 -Faktoren auftreten. Die aus der Identität aller dieser Beiträge resultierenden Vielfachheit wird in Gl. (A 1.1) durch den Faktor 2ν in Rechnung gestellt. — Die S -Faktoren beschränken die r -Summation, d. h. wegen $m = s + 2r$ die m -Summation, in der angegebenen Weise.

Das Produkt der beiden unpaarigen G^0 -Faktoren in Gl. (A 1.1) wird nun zuerst durch Partialbruchzerlegung in eine Summe aus zwei Termen zerlegt, die sogleich mit ihrem jeweiligen Konjugiert-Komplexen erweitert werden. Die dabei entstehenden in ω ungeraden Anteile können sofort unterdrückt werden, da sie spätestens bei der symmetrisch auszuführenden ω -Summation wegfielen. Es bleibt also vorerst

$$\frac{1}{\epsilon_{s+2r,k} + \epsilon_{nk}} \left(\frac{\epsilon_{nk}}{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2} + \frac{\epsilon_{s+2r,k}}{\omega^2 + \epsilon_{s+2r,k}^2} \right). \quad (\text{A 1.2})$$

Während ϵ_{nk} innerhalb des Integrations-Intervalls $[-\omega_D, \omega_D]$ variiert, durchläuft $\epsilon_{s+2r,k}$ das Intervall

$$\left[\frac{4(N+r+1)(N+r-n+1)}{N^2} \mu - \omega_D, \frac{4(N+r+1)(N+r-n+1)}{N^2} \mu + \omega_D \right] \quad (\text{A 1.3})$$

d. h., diese Variable ist groß gegenüber ϵ_{nk} und genähert konstant. Man kann den ersten Faktor in Gl. (A 1.2) entwickeln und mit dem zweiten zusammenfassen. Die symmetrische Integration bezüglich ϵ_{nk} gestattet, die mit einem in ϵ_{nk} ungeraden Faktor behafteten Anteile schon hier auszulassen. Von den verbleibenden Gliedern kommen nur noch die von niedrigster, d. h. zweiter Ordnung in $1/\epsilon_{s+2r,k}$ für die beabsichtigte Näherung in Betracht. Damit wird aus dem Formelteil (A 1.2)

$$- \frac{1}{\epsilon_{s+2r,k}^2} \cdot \frac{\epsilon_{nk}^2}{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2} + \frac{1}{\omega^2 + \epsilon_{s+2r,k}^2}. \quad (\text{A 1.4})$$

Setzen wir nun dieses in Gl. (A 1.1) ein und führen die ν -Summation aus, dann bleibt nach einfachen Umformungen

$$- \frac{2}{(2N+1)^2} \cdot \frac{\Delta^3}{\omega^2 + E_{nk}^2} \cdot \frac{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} \cdot \sum_{r=0}^{n-1} \left\{ - \frac{1}{\epsilon_{s+2r,k}^2} \cdot \frac{\epsilon_{nk}^2}{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2} + \frac{1}{\omega^2 + \epsilon_{s+2r,k}^2} \right\}. \quad (\text{A 1.5})$$

Im zweiten Summanden dürfen wir sogar noch ω^2 gegenüber $\epsilon_{s+2r,k}^2$ vernachlässigen, weil das asymptotische Verhalten dieses Anteils dadurch lediglich auf $1/\omega^2$ reduziert wird, was aber für die Konvergenz der ω -Summation noch ausreicht. Mit dieser Vernachlässigung nimmt der Beitrag (A 1.1) schließlich die Gestalt

$$- \frac{2}{(2N+1)^2} \cdot \frac{\Delta\omega^2}{(\omega^2 + E_{nk}^2)^2} \sum_{r=0}^{n-1} \frac{\Delta^2}{\epsilon_{s+2r,k}^2} \quad (\text{A 1.6})$$

an. Als Folge der symmetrischen ω -Summation und ϵ -Integration sind also alle Beiträge der Ordnung $\alpha \equiv \Delta/\mu$ ausgefallen, und es bleibt als Hauptkorrekturterm ein solcher der Ordnung $\alpha^2 \approx 10^{-7}$.

Damit ergibt sich aber die Notwendigkeit, auch diejenigen Terme von R_n zu berücksichtigen, die zwei von $N+1$ bis ∞ laufende m -Summen enthalten. Dadurch kommen insgesamt noch sechs strukturell verschiedene Termserien ins Spiel, die einzeln nach dem obigen Muster auszuwerten sind. Wir verzichten hier aber auf die Wiedergabe der Rechnungen und geben sogleich deren Resultat an. Der Korrekturterm der Ordnung α^2 lautet insgesamt

$$\begin{aligned}
R_n^{(1)} = & \frac{2 \Delta^2}{(2N+1)^2} \frac{\Delta}{\omega^2 + E_{nk}^2} \left[\sum_{r=0}^{n-1} \frac{1}{\epsilon_{s+2r,k}^2} \left\{ \frac{\omega^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} - \frac{N}{2N+1} \left(1 - \frac{\Delta^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} \right) + \right. \right. \\
& + \frac{1}{(2N+1)^2} \left(-\frac{3}{2} \frac{\Delta^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} + 2 \frac{\Delta^2 \omega^2}{(\omega^2 + E_{nk}^2)^2} + 2 \frac{\Delta^4}{(\omega^2 + E_{nk}^2)^2} \right) \Big\} \\
& + \frac{1}{2N+1} \sum_{r=0}^{n-2} \sum_{r'=r+1}^{n-1} \frac{1}{\epsilon_{s+2r,k} \epsilon_{s+2r',k}} \left\{ -1 + 2 \frac{\Delta^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{2N+1} \left(-3 \frac{\Delta^2}{\omega^2 + E_{nk}^2} + 4 \frac{\Delta^2 \omega^2}{(\omega^2 + E_{nk}^2)^2} + 4 \frac{\Delta^4}{(\omega^2 + E_{nk}^2)^2} \right) \right\} \right]. \quad (\text{A 1.7})
\end{aligned}$$

Wir interessieren uns lediglich für eine obere Schranke des Betrages von $R_n^{(1)}$. Dazu werden alle negativen Vorzeichen durch positive ersetzt. Dann kann die erste geschweifte Klammer durch den Zahlenwert 3 und die zweite durch 7 majorisiert werden, wenn u. a. für N der Minimalwert 1 benutzt wird. Die r - und r' -Abhängigkeit wird unter Vergrößerung der betreffenden ϵ -Faktoren mittels $r=r'=0$ beseitigt und daraufhin die r - und r' -Summation ausgeführt. Man erhält

$$|R_n^{(1)}| < \frac{10N}{(2N+1)^2} \frac{\mu^2}{\epsilon_{s+2r,k}^2} \frac{\Delta}{\omega^2 + E_{nk}^2} \alpha^2 \quad (\text{A 1.8})$$

und mit dem gemäß Gl. (23) größten zulässigen Wert $N=20$ ergibt das

$$|R_n^{(1)}| < 4 \frac{\Delta}{\omega^2 + E_{nk}^2} \alpha^2. \quad (\text{A 1.9})$$

2. Berechnung der Matrixelemente $\bar{\tau}(n, n')$

Die Elemente der Matrix $\bar{\tau}$ sind analog Gl. (49) durch

$$\bar{\tau}(n, n') = \frac{1}{2\pi M \beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \int d^2k \frac{1}{(-i\omega + \epsilon_{nk})(i\omega + \epsilon_{n'k})} \quad (\text{A 2.1})$$

definiert. Nach Umwandlung des Integrals in ein solches bezüglich der Variablen ϵ_k und Partialbruchzerlegung ebenfalls bezüglich ϵ_k werden die komplexen Nenner mit ihren konjugierten Ausdrücken erweitert und die dadurch im Zähler entstehenden Klammern ausmultipliziert. Der Imaginärteil hat die Form $\omega F(\omega^2)$, liefert also in Anbetracht der symmetrisch auszuführenden ω -Summation keinen Beitrag. Der Realteil lautet nach geeigneter Zusammenfassung

$$\bar{\tau}(n, n') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \frac{1}{4\omega^2 + (\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2} \int_0^\infty d\epsilon_k \left\{ \frac{2\omega^2 - \epsilon_{nk}(\epsilon_n - \epsilon_{n'})}{\omega^2 + \epsilon_{nk}^2} + \frac{2\omega^2 + \epsilon_{n'k}(\epsilon_n - \epsilon_{n'})}{\omega^2 + \epsilon_{n'k}^2} \right\}, \quad (\text{A 2.2})$$

woraus durch Integration unmittelbar der Ausdruck

$$\bar{\tau}(n, n') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\epsilon_n - \epsilon_{n'}}{4\omega^2 + (\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2} \ln \frac{(\epsilon_n - \mu)^2 + \omega^2}{(\epsilon_{n'} - \mu)^2 + \omega^2} + \frac{2|\omega|}{4\omega^2 + (\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2} \left(\pi - \text{arc tg} \frac{\epsilon_n}{\omega} - \text{arc tg} \frac{\epsilon_{n'}}{\omega} \right) \right\} \quad (\text{A 2.3})$$

entsteht. Für die Diagonalelemente vereinfacht sich diese Formel zu

$$\bar{\tau}(n, n) \equiv \bar{\tau}(n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \frac{1}{|\omega|} \left\{ \frac{\pi}{2} - \text{arc tg} \frac{\epsilon_n}{|\omega|} \right\} \quad (\text{A 2.4})$$

Der darin auftretende arc tg wird durch

$$\text{arc tg} \frac{\epsilon_n}{|\omega|} = \frac{\pi}{2} \text{sign } \epsilon_n - \frac{|\omega|}{\epsilon_n} \quad (\text{A 2.5})$$

ersetzt, was einen Fehler von maximal 1% bedingt, solange

$$|\epsilon_n| \gtrsim 3\omega_D \quad (\text{A 2.6})$$

bleibt. Diese Bedingung ist also etwas einschneidender als die analoge Bedingung $|\epsilon_n| \geq \omega_D$, durch die im Abschnitt 2 die Resonanzintervalle von der Betrachtung ausgeschlossen wurden. Gl. (A 2.4) und (A 2.5) zusammen liefern für die Diagonalelemente

$$\bar{\tau}(n) = \begin{cases} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \left\{ \frac{\pi}{|\omega|} - \frac{1}{|\epsilon_n|} \right\} \dots n \leq N, \\ \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=-\omega_D}^{\omega_D} \frac{1}{\epsilon_n} \dots n > N. \end{cases} \quad (\text{A 2.7})$$

Zur Auswertung der Summen haben wir auf die Definition (7) zurückzugreifen, mit der sich der Hauptterm in der Gestalt

$$\bar{\tau} = 2 \sum_{l=0}^{l_D} \frac{1}{2l+1} \quad (\text{A 2.8})$$

schreibt, wenn außerdem

$$l_D = \left[\frac{T_D - \pi T}{2 \pi T} \right] \quad (\text{A 2.9})$$

($[x] = \text{größte ganze Zahl } \leq x$) definiert wird. Mit Hilfe der Formel⁹

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} = C + \ln n + \frac{1}{2n} - \frac{1}{12n(n+1)} - \frac{1}{12n(n+1)(n+2)} - \dots \quad (\text{A 2.10})$$

($C = \ln \gamma = \text{EULERSche Konstante} = 0,57721 \dots$) kann Gl. (A 2.8) zu

$$\begin{aligned} \bar{\tau} &= C + \ln 2(2l_D + 1) + \ln \frac{2l_D + 1}{2l_D} - \frac{5}{12l_D(2l_D + 1)} \\ &\quad + \frac{l_D + 1}{2l_D(2l_D + 1)(2l_D + 3)(2l_D + 4)} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A 2.11})$$

umgeformt werden. Indem wir diese Gleichung wieder mit der ursprünglichen T -Abhängigkeit schreiben, unterdrücken wir jedoch die eckigen aus Gl. (A 2.9) herrührenden Klammern. Dadurch werden lediglich gewisse Details im Verlauf von $\bar{\tau}(T)$ unterdrückt, die eine offenbar uninteressante Folge der scharfen Definition des Abschneidewertes ω_D sind. Dann ist

$$\begin{aligned} \bar{\tau} &= \ln \frac{2\gamma T_D}{\pi T} + \ln \frac{T_D}{T_D - \pi T} - \frac{5\pi^2 T^2}{6T_D(T_D - \pi T)} + \\ &\quad + \frac{\pi^3 T^3 (T_D + \pi T)}{2T_D(T_D - \pi T)(T_D + 2\pi T)(T_D + 3\pi T)} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A 2.12})$$

Die Korrekturglieder in Gl. (A 2.7) sind einfach auszuwerten und ergeben

$$\delta\bar{\tau}(n) \equiv \frac{T}{|\epsilon_n|} \sum_{l=0}^{l_D} 2 = \frac{T_D - \pi T}{\pi |\epsilon_n|}. \quad (\text{A 2.13})$$

Nur für $3\omega_D \lesssim |\epsilon_n| \lesssim 10\omega_D$ bedingen diese eine Verbesserung des Hauptterms (A 1.12) um mehr als 1%.

Bei den Außendiagonalelementen begnügen wir uns mit einer Abschätzung ihrer (auf $\bar{\tau}$ bezogenen) Größenordnung. Die Matrixelemente werden majorisiert durch

$$|\bar{\tau}(n, n')| < \sum_{l=0}^{l_D} \left\{ \frac{8\pi^2 T^2}{(\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2} (2l+1) + \frac{T}{\epsilon_{n'} - \epsilon_n} \ln \frac{\epsilon_n}{\epsilon_{n'}} \right\}. \quad (\text{A 2.14})$$

Nach Ausführung der l -Summation ist das

$$|\bar{\tau}(n, n')| < 2 \frac{(T_D + \pi T)^2}{(\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2} + \frac{T_D + \pi T}{\pi(\epsilon_{n'} - \epsilon_n)} \ln \frac{\epsilon_n}{\epsilon_{n'}}. \quad (\text{A 2.15})$$

Bei der Wahl der Werte (22) bleibt für den ungünstigsten Fall, $n = 1, n' = 3$

$$\frac{\tau}{|\tau(1, 3)|} \lesssim \begin{cases} 5\% & \text{für } N \leq 10, \\ 1\% & \text{für } N \leq 15, \\ 5\% & \text{für } N \leq 20, \end{cases} \quad (\text{A 2.16})$$

während alle übrigen $\bar{\tau}(n, n')$ noch deutlich unter diesen Werten bleiben. Diese Gegenüberstellung zeigt wiederum, daß gewisse einschränkende Bedingungen im Fall der Behandlung des Problems mit Abschneiden in ω schärfer gefaßt werden müssen als bei Abschneiden in ϵ .

⁹ K. ROTTMANN, Mathematische Formelsammlung, BI-Hochschul-Taschenbuch 13, Mannheim 1960.