

# Zweitveröffentlichung



Plehn, Hartmut

## Supraleitende Multilagen und Mikrowellenabsorption

Datum der Zweitveröffentlichung: 12.12.2024

Verlagsversion (Version of Record), Buch

Persistenter Identifikator: 10.20378/irb-105006

### Erstveröffentlichung

Plehn, Hartmut (1995): Supraleitende Multilagen und Mikrowellenabsorption, Würzburg: Julius-Maximilians-Universität, Dissertation, Mikrofiche-Ausgabe, <https://d-nb.info/946647968>.

### Rechtehinweis

Dieses Werk ist durch das Urheberrecht und/oder die Angabe einer Lizenz geschützt. Es steht Ihnen frei, dieses Werk auf jede Art und Weise zu nutzen, die durch die für Sie geltende Gesetzgebung zum Urheberrecht und/oder durch die Lizenz erlaubt ist. Für andere Verwendungszwecke müssen Sie die Erlaubnis der Rechteinhaberinnen und Rechteinhaber einholen.

Für dieses Dokument gilt das deutsche Urheberrecht.

# **Supraleitende Multilagen und Mikrowellenabsorption**

Dissertation zur Erlangung des  
naturwissenschaftlichen Doktorgrades  
der Bayerischen Julius–Maximilians–Universität  
Würzburg

vorgelegt von  
**Hartmut Plehn**  
aus Karlstadt/Main

Würzburg 1995

Eingereicht am  
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

7. Juni 1995

1. Gutachter:

Prof. Dr. R. Kümmel

2. Gutachter:  
der Dissertation

Prof. Dr. E. K. U. Gross

1. Prüfer:

Prof. Dr. R. Kümmel

2. Prüfer:  
der mündlichen Prüfung

Prof. Dr. K. Keck

Tag der mündlichen Prüfung:

28. September 1995

Doktorurkunde ausgehändigt am:

*Für Alexandra und Franziska*

# Inhaltsverzeichnis

---

Einleitung	6
1 Selbstkonsistente Paarpotentiale	9
1.1 Beschreibung des Systems	9
1.2 Quasiklassische Greensche Funktionen	9
1.3 Iterative Lösung des Selbstkonsistenzproblems	12
1.4 Ergebnisse	15
2 Energiebänder und Zustandsdichten	19
2.1 Sensitivität bezüglich der Selbstkonsistenz	20
2.2 Lokalisierungseffekte	26
2.2.1 Quasiteilchenwellenfunktionen und Energiebänder	26
2.2.2 Globale Zustandsdichte	32
2.2.3 Lokale Zustandsdichte	38
2.2.4 Hochtemperatursupraleiter als $SN$ -Multilagen?	42
3 Optische Absorption	46
3.1 Physikalisches System und Modellannahmen	46
3.2 Methodische Grundlagen	47
3.2.1 Zeitabhängige Bogoliubov–de Gennes Gleichungen	47
3.2.2 Zeitabhängige Störungstheorie	49
3.3 Optische Übergänge zwischen Blochzuständen	52
3.3.1 Quasiteilchen (QT)–Zustände des ungestörten Systems	52
3.3.2 Übergangswahrscheinlichkeit	53
3.3.3 Absorbierte Leistung	54
3.4 Ergebnisse	61
3.5 Diskussion und Vergleich mit Experimenten	66

Zusammenfassung	70
A Lösung des Selbstkonsistenzproblems	73
B QT-Wellenfunktion in WKBJ-Näherung	77
C QT-Wellenfunktion im Fall unterschiedlicher Fermienergien	79
D QT-Wellenfunktion in Andreev-Näherung	83
E Matrixelemente im Fall unterschiedlicher Fermienergien	86

# Abbildungsverzeichnis

---

Selbstkonsistente Paarpotentiale	9
1.1 Die Geometrie des betrachteten Systems . . . . .	10
1.2 Selbstkonsistentes Paarpotential $\Delta(z)$ einer Multilage mit konstanter Fermienergie und transparenten Grenzflächen und äquivalente Stufenpotentialnäherung mit effektiven Schichtdicken . . . . .	10
1.3 Durch die Erhaltung des Impulses parallel zu den Grenzflächen gekoppelte Wellenzahlvektoren . . . . .	14
1.4 Selbstkonsistentes Paarpotential für $a = 4 \xi_0$ , $b = 1 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 2$ .	15
1.5 Selbstkonsistente Paarpotentiale für $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} < 1$ . . . . .	16
1.6 Selbstkonsistente Paarpotentiale für $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} > 1$ . . . . .	17
1.7 Selbstkonsistente Paarpotentiale für verschieden starke Kontaktflächenpotentiale $V_S$ . . . . .	18
Energiebänder und Zustandsdichten	19
2.1 Dispersionsrelation $E(k_{z\text{F}}, \kappa)$ der Multilage aus Abb. 1.2 . . . . .	22
2.2 Energiebänder der Multilage aus Abb. 1.2. . . . .	23
2.3 Dispersionsrelation $E(K)$ der untersten drei Bänder aus Abb. 2.2 für $k_{z\text{F}} = k_{\text{F}}$ . . . . .	24
2.4 Die globale Zustandsdichte für die Multilage aus Abb. 1.2 . . . . .	25
2.5 Bandstruktur $E(\kappa)$ einer Multilage mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ , $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ , $\varepsilon_{\text{FS}}/\Delta = 5000$ und $T = 0.5 T_C$ für $k_{z\text{FN}} = k_{\text{FN}}$ . . . . .	28
2.6 Energiebänder der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.5. . . . .	30
2.7 Energiebänder einer Multilage mit $\varepsilon_{\text{FN}} = \varepsilon_{\text{FS}}$ ; ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.5. . . . .	31

2.8	Globale Zustandsdichte von Multilagern mit dicken supraleitenden Schichten, $a = 8 \xi_0$ , $b = 18 \xi_0$ , und verschiedenen Verhältnissen der Fermienergien. . . . .	32
2.9	Globale Zustandsdichte von Multilagern mit $a = 5 \xi_0$ , $b = 8 \xi_0$ und verschiedenen Verhältnissen der Fermienergien. . . . .	33
2.10	Globale Zustandsdichte einer Multilage mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$ . . . . .	35
2.11	Globale Zustandsdichte einer Multilage mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ . . . . .	35
2.12	Temperaturabhängigkeit der globalen Zustandsdichte einer Multilage mit $a = 5 \xi_0$ , $b = 8 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ . . . . .	36
2.13	Temperaturabhängigkeit der reduzierten energetischen Position des “sub-gap peaks” einer Multilage mit $a = 5 \xi_0$ , $b = 8 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$ bzw. $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 2$ . . . . .	37
2.14	Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$ , ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.9. . . . .	39
2.15	Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ , ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.14. . . . .	39
2.16	Schnitte der lokalen Zustandsdichte aus Abb. 2.14 bei $z = -a/2$ und $z = b/2$ . . . . .	40
2.17	Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$ . . . . .	41
2.18	Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ und $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ . . . . .	41
2.19	Dispersionsrelation $E(k_{z\text{F}}, \kappa)$ des untersten Bandes einer Multilage mit $a = 4 \xi_0$ , $b = 1 \xi_0$ , $\varepsilon_{\text{FS}} = 100 \varepsilon_{\text{FN}}$ und $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{\text{FS}}$ bei $T = 0 \text{ K}$ . . . . .	43
2.20	Energiebänder der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19 ( $k_{\text{FN}} = 0.1 k_{\text{FS}}$ ). . . . .	43
2.21	Lokale Zustandsdichte der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19. . . . .	44
2.22	Globale Zustandsdichte der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19. . . . .	44
2.23	Tunnelleitfähigkeitsspektren von einkristallinem Bulk $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . . . . .	45
	<b>Optische Absorption</b> . . . . .	<b>46</b>
3.1	Multilage aus abwechselnd supraleitenden und normalleitenden Schichten mit elektrischem Wechselfeld $\mathcal{E}(t)$ . . . . .	47

3.2	Vergleich der globalen Zustandsdichte eines Gesamtsystems mit $\mathcal{N} = 70$ Perioden mit der eines Systems mit $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ . . . . .	56
3.3	Von einer Multilage mit $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}} = 5000 \Delta$ , $a = 1 \xi_0$ und $b = 5 \xi_0$ absorbierte Leistung $P(\omega)$ als Funktion der eingestrahnten Frequenz $\omega$ für verschiedene Temperaturen $T$ . . . . .	61
3.4	Beitrag von Übergängen aus dem Grundzustand und von Übergängen zwischen angeregten Zuständen zur für $T = 0.5 T_C$ absorbierten Leistung in Abb. 3.3. . . . .	62
3.5	Spektrum der Zustände positiver und negativer Energie der Multilage mit den Parametern aus Abb. 3.3 für $T \ll T_C$ . . . . .	63
3.6	Absorptionsspektren von Multilagen mit $a = 8 \xi_0$ , $b = 3 \xi_0$ bei $T \ll T_C$ für $\varepsilon_{\text{FN}} = \varepsilon_{\text{FS}}$ und $\varepsilon_{\text{FN}} = 0.98 \varepsilon_{\text{FS}}$ . . . . .	64
3.7	Absorbierte Leistung einer Multilage mit $a = 4 \xi_0$ , $b = 1 \xi_0$ , $\varepsilon_{\text{FS}} = 100 \varepsilon_{\text{FN}}$ , $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{\text{FS}}$ bei $T \ll T_C$ . . . . .	65
3.8	Absorbierte Leistung aus Abb. 3.7 über einen Bereich von $0.01 \Delta$ gemittelt. . . . .	66
3.9	Die beiden tiefsten, oszillierenden Blochbänder einer Multilage mit den Parametern aus Abb. 3.7 für $\kappa = 0$ und für $\kappa = \pi/d$ . . . . .	67
3.10	Illustration der paarweisen Quasiteilchen-Anregung durch optische Absorption in einer $SNS$ -Multilage mit $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ bei $T = 0 K$ . . . . .	69

# Einleitung

---

Supraleitende Multilagen wurden theoretisch zuerst von Andreev bei der Behandlung der thermischen Leitfähigkeit [1] und der elektronischen Struktur [2] von Supraleitern erster Art im Zwischenzustand diskutiert. In späteren Arbeiten wurden Kronig–Penney und auch allgemeinere Modelle für das Paarpotential verwendet [3-6]. Experimentell wurden Multilagen aus Supraleitern ( $S$ ) und normalen Metallen ( $N$ ) [7-9] oder Halbleitern [10, 11] im Hinblick auf ihre Thermodynamik und Transporteigenschaften untersucht. Insbesondere das Anwendungspotential von inhomogenen Supraleitern als kryoelektronische Bauelemente, wie SQUID's [12], Josephson–Feldeffekttransistoren [13] oder Mikrowellenmischer [14], macht diese Systeme technologisch interessant.

Seit der Entdeckung der keramischen Hochtemperatursupraleiter (HTSL) wird supraleitenden Multilagen eine noch höhere Aufmerksamkeit zuteil: Zum einen in der Form von künstlich erzeugten Supergittern verschiedener Kuprate [15-19] und zum anderen als Modelle, die helfen könnten, die intrinsische Schichtstruktur der HTSL zu verstehen. Es stellt sich die Frage, ob HTSL als supraleitende Multilagen beschrieben werden können, wobei sich die supraleitenden Kupferoxidebenen mit normaleitenden, halbleitenden oder isolierenden Zwischenschichten abwechseln. So haben Kleiner, Steinmeyer, Kunkel und Müller [20] die Josephson–Effekte [21] intrinsisch in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  (BSCCO)–Einkristallen nachgewiesen, siehe auch Ref. [22] und [23]. Aus der Temperaturabhängigkeit des kritischen Stromes folgern die Autoren, daß die Regionen zwischen den supraleitenden Kupferoxidebenen in ihren Proben isolierende Schichten sind und daß sich das gesamte System wie viele hintereinandergeschaltete Tunnelkontakte in Phase verhält. In einkristallinem  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  (YBCO) dagegen finden Tanaka, Takebayashi, Hashimoto, Kashiwaya, Hirayama und Koyanagi entlang der  $c$ –Achse periodisch abwechselnd BCS– und metallartige Tunnelleitfähigkeitsspektren [24]. Sie schließen daraus, daß YBCO aus intrinsisch supraleitenden Multilagen besteht, wobei die Regionen mit den Kupferoxidketten sich wie normaleitende Schichten zwischen den supraleitenden Kupferoxidebenen verhalten.

In BSCCO–Filmen [25] und –Einkristallen [26, 27] wird eine starke Abweichung der Temperaturabhängigkeit der Energielücke vom BCS–Verhalten gefunden [28]. Zusätzlich

liefern Tunnel- und Raman-Spektroskopie in einkristallinem BSCCO zwei “Energieslücken”, die auf Anisotropie zurückgeführt werden [26, 27].

Experimentelle und theoretische Untersuchungen der optischen Eigenschaften der HTSL könnten helfen, ein tieferes Verständnis dieser Materialien zu gewinnen. So wurden zahlreiche optische Experimente an YBCO-Kristallen und dünnen Filmen im Mikrowellenbereich und im fernen Infrarot durchgeführt, die auf das Fehlen einer Energieslücke [29-31], Anisotropie [32] und verschiedene Absorptionsmechanismen [33] hindeuten. Gerade Experimente mit dem elektrischen Feldvektor parallel zur  $c$ -Achse, d.h. senkrecht zu den Kupferoxidebenen, zeigen eine endliche Absorption bis zu niedrigen Frequenzen [34], die die Existenz tiefliegender Zustände nahelegt [35]. Im Hinblick auf die HTSL wurde die optische Antwort supraleitender Filme [36], schwach gekoppelter supraleitender Doppelschichten [37] und von Supraleitern im sauberen Grenzfall [38] theoretisch mit Hilfe der BCS-Theorie untersucht.

In der vorliegenden Arbeit wird das selbstkonsistente Paarpotential, die elektronische Struktur und die optische Absorption in supraleitenden Multilagen berechnet. Es wird dabei besonderes Gewicht auf die Untersuchung von Systemen gelegt, in denen sowohl die nebendiagonale Translationssymmetrie durch das Paarpotential  $\Delta$  als auch die diagonale Translationssymmetrie durch räumliche Variation des Skalarpotentials, das unterschiedliche Gitterstrukturen oder Ladungsträgerkonzentrationen beschreibt und so zu verschiedenen Fermienergien  $\varepsilon_{FN}$  und  $\varepsilon_{FS}$  in den normal- bzw. supraleitenden Schichten führt, gebrochen ist. Hier kommt es zur Konkurrenz zwischen Nebendiagonal (Andreev)-Streuung, d.h. Elektron-Loch-Streuung an den Inhomogenitäten des Paarpotentials, und Diagonal (Normal)-Streuung, d.h. konventioneller Elektron-Elektron- oder Loch-Loch-Streuung. Diese Streumechanismen führen zu unterschiedlichen Lokalisierungseffekten und bestimmen die elektronische Struktur der Multilagen.

Im 1. Kapitel wird das selbstkonsistente Paarpotential mit Hilfe der quasiklassischen Greenschen Funktionen berechnet und der Einfluß von Diagonalstreuung auf den “Proximity Effect” untersucht. Im Abschnitt 2.1 wird gezeigt, daß es für die betrachteten Systeme zur Berechnung der elektronischen Struktur ausreichend ist, das selbstkonsistente Paarpotential näherungsweise durch ein äquivalentes Stufenpotential zu beschreiben. Die Blochbänder, Quasiteilchen (QT)-Wellenfunktionen und sowohl die globale als auch die lokale Zustandsdichte werden in Abschnitt 2.2 für verschiedene Temperaturen, verschiedene Dicken der normal- und supraleitenden Schichten und verschiedene Verhältnisse  $\varepsilon_{FS}/\varepsilon_{FN}$  der Fermienergien berechnet. Es werden dabei insbesondere auch Systeme mit Parametern betrachtet, die für Multilagenmodelle zur Beschreibung der HTSL relevant sein könnten. Im 3. Kapitel werden die zuvor bestimmten Blochbänder

und QT-Wellenfunktionen bei der Berechnung der optischen Absorption mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie für die Bogoliubov–de Gennes Gleichungen verwendet.

# Materialparameter und selbstkonsistente Paarpotentiale

---

## 1.1 Beschreibung des Systems

Wir betrachten ein System aus abwechselnd normalleitenden ( $N$ ) Schichten<sup>1</sup> der Dicke  $a$  und supraleitenden ( $S$ ) Schichten der Dicke  $b$ , siehe Abb. 1.1. Es habe in  $z$ -Richtung die Periodizitätslänge  $d = a + b$  und sei in  $x$ - und  $y$ -Richtung hinreichend ausgedehnt, um Translationsinvarianz annehmen zu können. Unterschiedliche effektive Massen in den  $N$ - und  $S$ -Schichten führen, ebenso wie unterschiedliche Fermienergien, zu Elektron–Elektron– bzw. Loch–Loch–Streuung in den Grenzschichten [39]. In etwas vereinfachter Weise wird das modelliert, indem die Leitungsbandelektronen in den  $N$ - und  $S$ -Schichten durch die Dispersionsrelation freier Elektronen mit gleichen effektiven Massen  $m$  aber unterschiedlichen Leitungsbandunterkanten beschrieben werden und die effektive Fermienergie in den  $S$ -Schichten,  $\varepsilon_{\text{FS}} = \hbar^2 k_{\text{FS}}^2 / 2m$ , sich von der in den  $N$ -Schichten,  $\varepsilon_{\text{FN}} = \hbar^2 k_{\text{FN}}^2 / 2m$ , unterscheidet. Die  $z$ -Abhängigkeit eines für  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$  selbstkonsistent berechneten Paarpotentials ist in Abb. 1.2 gezeigt.

## 1.2 Quasiklassische Greensche Funktionen

Die Selbstkonsistenzrechnungen für Multilagen wurden wie von Kieselmann [41] für “Proximity”-Kontakte und Ashida *et al.* [42, 43] für Doppellagen mit Hilfe der qua-

---

<sup>1</sup>“Normalleitend” bezieht sich auf Regionen, in denen der supraleitende Ordnungsparameter reduziert ist aber nicht notwendigerweise völlig verschwindet.

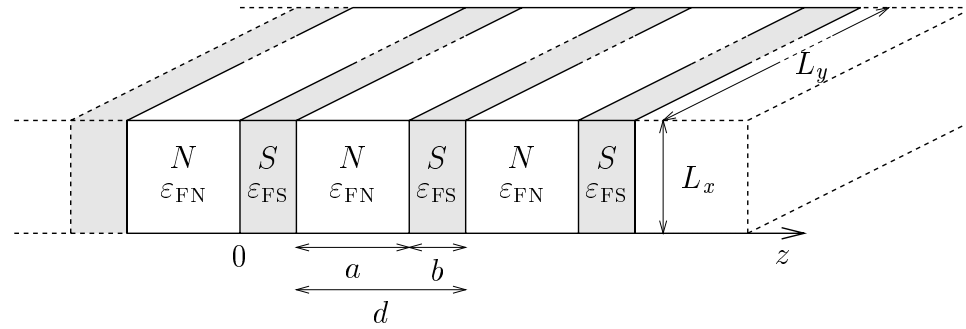


Abbildung 1.1: Die Geometrie des betrachteten Systems. Die normalleitenden Schichten haben die Fermienergie  $\varepsilon_{\text{FN}}$  und in  $z$ -Richtung die Dicke  $a$ , die supraleitenden Schichten die Fermienergie  $\varepsilon_{\text{FS}}$  und die Dicke  $b$ .

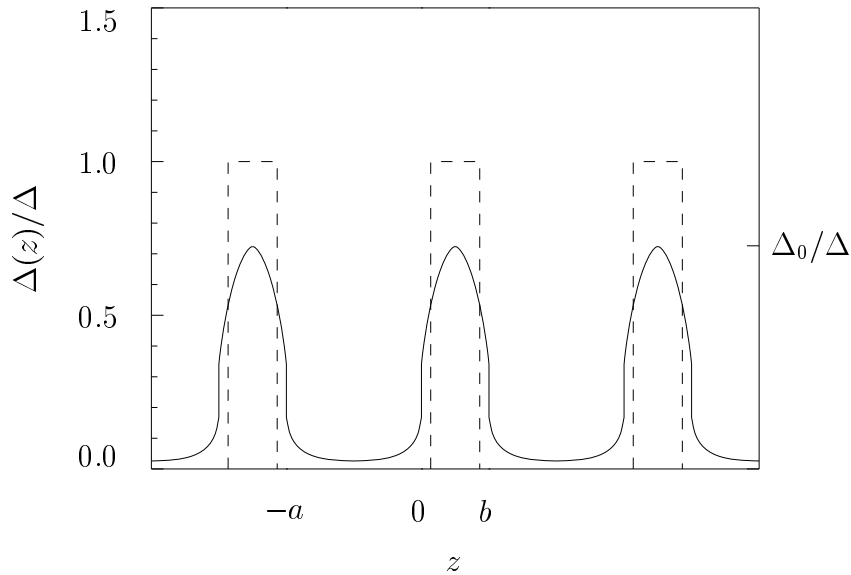


Abbildung 1.2: Die durchgezogene Linie zeigt das selbstkonsistente Paarpotential  $\Delta(z)$  einer Multilage mit konstanter Fermienergie und transparenten Grenzflächen [40];  $T_{CN} = 0.1T_{CS}$ ,  $a = 6\xi_0$ ,  $b = 3\xi_0$ ,  $\xi_0 = \hbar^2 k_{\text{FS}} / \pi m \Delta(0)$ ,  $\Delta(0) = 1.76 T_{CS}$ ,  $\Delta = \Delta(0.5 T_{CS}) = 0.95 \Delta(0)$ . In Abschnitt 2.1 wird gezeigt, daß die äquivalente Stufenpotentialdarstellung mit effektiven Schichtdicken (gestrichelte Linie) in guter Näherung die gleichen Energiebänder und Zustandsdichten liefert.

siklassischen Greenschen Funktionen  $\hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)$  durchgeführt. Im Grenzfall schwacher Kopplung werden diese durch die Gleichungen

$$[i\epsilon_n \hat{\tau}_3 - \hat{\Delta}(z), \hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)] + i(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{z}}) \hbar v_F \frac{d}{dz} \hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n) = 0 \quad (1.1)$$

bestimmt [41, 44]. Dabei sind  $\epsilon_n = (2n - 1)\pi k_B T$  die Matsubara-Energien,  $v_F(z)$  ist die Fermigeschwindigkeit,  $\hat{\tau}_i$  sind die Pauli-Matrizen,  $\hat{\mathbf{k}}$  und  $\hat{\mathbf{z}}$  sind Einheitsvektoren in Impuls- bzw.  $z$ -Richtung und  $[A, B] = AB - BA$ . Die Matrix  $\hat{\Delta}$  des Paarpotentials ist gegeben durch

$$\hat{\Delta}(z) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(z) \\ -\Delta^*(z) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

und genügt für eine isotrope ( $s$ -Wellen) Paarwechselwirkung der Selbstkonsistenzgleichung [41, 44]

$$\Delta(z) = k_B T \sum_n V_0(z) \int d\Omega_k (4\pi)^{-1} \text{Tr}[\hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)(\hat{\tau}_1 - i\hat{\tau}_2)]. \quad (1.3)$$

Hier ist  $V_0(z)$  das dimensionslose Maß für die Stärke der Paarwechselwirkung [44], und  $d\Omega_k$  ist das Raumwinkelement bezüglich der Impulsrichtung  $\hat{\mathbf{k}}$ . Die Summation  $\sum_n$  über die Matsubara-Frequenzen muß bei einer Frequenz von der Größenordnung der Debye-Frequenz  $\omega_D$  abgeschnitten werden [41]. Gl. (1.3) wurde von Bruder [44] für anisotrope Paarwechselwirkungen, z.B.  $d$ -Wellen Symmetrie des Ordnungsparameters, erweitert. Sie kann in eine für numerische Zwecke besser geeignete Form gebracht werden, indem man die Paarwechselwirkung eliminiert und eine  $z$ -abhängige kritische Temperatur

$$T_C(z) = \begin{cases} T_{CN} & \text{in } N, \\ T_{CS} & \text{in } S \end{cases} \quad (1.4)$$

einführt [44]: Mit der quasiklassischen Greenschen Funktion des homogenen Supraleiters aus Anhang A

$$\hat{g}(\epsilon_n) = \frac{-i\pi}{E_n} (\epsilon_n \hat{\tau}_3 - \Delta \hat{\tau}_2), \quad (1.5)$$

$$E_n = \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta^2} \quad (1.6)$$

folgt im Limes  $\Delta \xrightarrow{T \rightarrow T_C} 0$  aus Gl. (1.3)

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V_0} &= k_B T_C \sum_{0 < \epsilon_n < \hbar \omega_D} \int d\Omega_k (4\pi)^{-1} \frac{2\pi}{\epsilon_n} \\
 &= k_B T_C \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T_C} \frac{2\pi}{(2n-1)\pi k_B T_C} = \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T_C} \frac{1}{n-0.5} \\
 &= \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T_C} \frac{1}{n-0.5} - \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T} \frac{1}{n-0.5} + \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T} \frac{1}{n-0.5} \\
 &\approx \ln\left(\frac{T}{T_C}\right) + \sum_{n=1}^{\hbar \omega_D / 2\pi k_B T} \frac{1}{n-0.5}. \tag{1.7}
 \end{aligned}$$

Einsetzen von Gl. (1.7) in Gl. (1.3) liefert [40, 41]

$$\Delta(z) = \frac{k_B T \sum_n \int d\Omega_k (4\pi)^{-1} \text{Tr}[\hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)(\hat{\tau}_1 - i\hat{\tau}_2)]}{\ln[T/T_C(z)] + \sum_n 1/(n-0.5)}. \tag{1.8}$$

Es zeigt sich, daß in Gl. (1.8) das Verhältnis der für  $\omega_D \rightarrow \infty$  divergierenden Ausdrücke im Zähler und Nenner konvergiert und für  $\hbar \omega_D \gtrsim 10 k_B T_C$  praktisch nicht mehr von  $\omega_D$  abhängt [41, 44].

## 1.3 Iterative Lösung des Selbstkonsistenzproblems

Die Berechnung der Funktion  $\hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)$  und der in den Abbildungen 1.2 und 1.4–1.7 gezeigten Paarpotentiale  $\Delta(z)$  wird analog zu Kieselmann [41] und Bruder [44] durchgeführt: Ausgehend von einem Stufenpotential, das in den  $N$ -Schichten mit kritischer Temperatur  $T_{CN} < T$  verschwindet und das an den Grenzflächen zu den  $S$ -Schichten mit kritischer Temperatur  $T_{CS} > T$  auf  $\Delta = \Delta_S$  springt, werden die Gln. (1.1) und (1.8) iterativ in einer  $N$ -Schicht und einer  $S$ -Schicht der Breite  $a/2$  bzw.  $b/2$  gelöst, bis Selbstkonsistenz erreicht ist. Die quasiklassischen Greenschen Funktionen müssen dabei der Normierungsbedingung [41, 44]

$$\hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)^2 = -\pi^2 \tag{1.9}$$

und an der Phasengrenze in  $z = 0$  den Anschlußbedingungen [41, 44-46]

$$\hat{d}_N = \hat{d}_S, \tag{1.10a}$$

$$\hat{d}_S \hat{s}_S^2 = -i\pi \frac{1-R}{1+R} \left[ \hat{s}_S \left( 1 - \frac{i}{2\pi} \hat{d}_S \right), \hat{s}_N \right] \tag{1.10b}$$

genügen, wobei folgende Abkürzungen eingeführt wurden:

$$\hat{d}_N \equiv \hat{g}_N(\hat{\mathbf{k}}_N, 0; \epsilon_n) - \hat{g}_N(\underline{\hat{\mathbf{k}}}_N, 0; \epsilon_n), \quad (1.11a)$$

$$\hat{s}_N \equiv \hat{g}_N(\hat{\mathbf{k}}_N, 0; \epsilon_n) + \hat{g}_N(\underline{\hat{\mathbf{k}}}_N, 0; \epsilon_n), \quad (1.11b)$$

$$\hat{d}_S \equiv \hat{g}_S(\hat{\mathbf{k}}_S, 0; \epsilon_n) - \hat{g}_S(\underline{\hat{\mathbf{k}}}_S, 0; \epsilon_n), \quad (1.11c)$$

$$\hat{s}_S \equiv \hat{g}_S(\hat{\mathbf{k}}_S, 0; \epsilon_n) + \hat{g}_S(\underline{\hat{\mathbf{k}}}_S, 0; \epsilon_n) \quad (1.11d)$$

mit

$$\hat{\mathbf{k}}_N = \mathbf{k}_N/k_{\text{FN}} = (\mathbf{k}_\varrho + k_{z\text{FN}} \hat{\mathbf{z}}) / k_{\text{FN}}, \quad (1.12a)$$

$$\underline{\hat{\mathbf{k}}}_N = \underline{\mathbf{k}}_N/k_{\text{FN}} = (\mathbf{k}_\varrho - k_{z\text{FN}} \hat{\mathbf{z}}) / k_{\text{FN}}, \quad (1.12b)$$

$$\hat{\mathbf{k}}_S = \mathbf{k}_S/k_{\text{FS}} = (\mathbf{k}_\varrho + k_{z\text{FS}} \hat{\mathbf{z}}) / k_{\text{FS}}, \quad (1.12c)$$

$$\underline{\hat{\mathbf{k}}}_S = \underline{\mathbf{k}}_S/k_{\text{FS}} = (\mathbf{k}_\varrho - k_{z\text{FS}} \hat{\mathbf{z}}) / k_{\text{FS}} \quad (1.12d)$$

und

$$k_{z\text{FN}} = \sqrt{k_{\text{FN}}^2 - k_\varrho^2}, \quad (1.13a)$$

$$k_{z\text{FS}} = \sqrt{k_{\text{FS}}^2 - k_\varrho^2}. \quad (1.13b)$$

Die Normierungsbedingung (1.9) ist streng nur in Systemen erfüllt, in denen zumindest in einer Region weit entfernt von der Phasengrenze die Funktion  $\hat{g}$  und das Paarpotential  $\Delta$  Bulk–Werte annehmen [42, 45]. Solange jedoch die Schichtdicken groß gegen die Fermi–Wellenlänge  $1/k_{\text{F}}$  sind, wie das in den hier betrachteten Multilagen mit Schichten einiger Kohärenzlängen Dicke der Fall ist, können Quanteninterferenzeffekte aufgrund von Reflexionen an den Phasengrenzen vernachlässigt werden und die Normierungsbedingung (1.9) bleibt näherungsweise weiterhin gültig [47].

Der Reflexionskoeffizient  $R$  in Gl. (1.10b) stellt einen Parameter dar, der von den Materialien und von dem für die Phasengrenze gewählten Modell abhängt. Bei Annahme eines Potentialsprunges aufgrund verschiedener Fermienergien  $\epsilon_{\text{FS}} \neq \epsilon_{\text{FN}}$  und eines zusätzlichen  $\delta$ –funktionsförmigen Skalarpotentials der Stärke  $V_S$  in  $z = 0$  [39] erhält man

$$R(k_\varrho) = \frac{\left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k_{z\text{FN}} - k_{z\text{FS}}) \right]^2 + V_S^2}{\left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k_{z\text{FN}} + k_{z\text{FS}}) \right]^2 + V_S^2}. \quad (1.14)$$

Die verschiedenen Wellenvektoren, die wegen der Erhaltung des Impulses  $\hbar\mathbf{k}_\varrho$  parallel zu den Schichten für unterschiedliche Fermienergien in  $N$  und  $S$  koppeln, sind in Abb. 1.3 gezeigt.

Im Unterschied zu den Selbstkonsistenzrechnungen für  $INS$ –“Proximity”–Kontakte [41] und  $SN$ –Phasengrenzen [44] mit ihren halbunendlich ausgedehnten  $S$ –Schichten

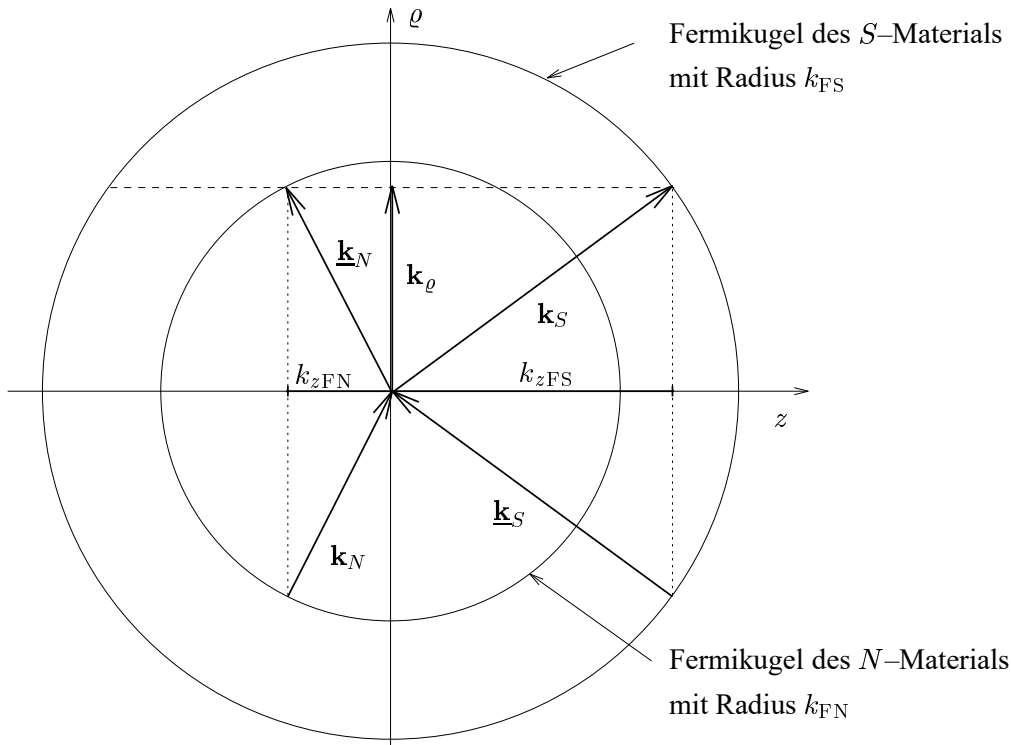


Abbildung 1.3: Die vier Wellenzahlvektoren  $\mathbf{k}_N$ ,  $\underline{\mathbf{k}}_N$ ,  $\mathbf{k}_S$  und  $\underline{\mathbf{k}}_S$  an der Fermioberfläche, die die gleiche Impulskomponente  $\hbar\mathbf{k}_\rho$  entlang der Phasengrenze haben, werden durch die Anschlußbedingungen, Gln. (1.10)–(1.14), miteinander gekoppelt. Für  $\varepsilon_{FS} > \varepsilon_{FN}$  sind all die Quasiteilchen, für die  $k_\rho = |\mathbf{k}_\rho| > k_{FN}$  ist, wegen spiegelnder Reflexion an der Phasengrenze in  $S$  lokalisiert.

wird für  $SN$ -Multilagen die exponentiell mit  $z$  in  $S$  ansteigende Lösung für  $\hat{g}$  mitgenommen, siehe Anhang A. Die Linearkombination dieser Lösung mit der exponentiell abfallenden und der konstanten Lösung wird in  $z = b/2$  der Randbedingung für spiegelnde Reflexion unterworfen. Die gleiche Randbedingung wird in der  $N$ -Schicht in  $z = -a/2$  verwendet. Spiegelnde Reflexion an den Systemgrenzen, d.h. das Verschwinden der Linearkombinationen der Quasiteilchenwellenfunktionen, aus denen die Green'schen Funktionen aufgebaut sind, wird auch von Ashida *et al.* [42] bei der Untersuchung von  $SN$ -Doppellagen angenommen. Die Autoren weisen darauf hin, daß ein mit diesen Randbedingungen für  $SN$ -Doppellagen selbstkonsistent berechnetes Paarpotential für  $R = 0$ , d.h. für  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  und  $V_S = 0$ , durch periodische Fortsetzung in ein Multilagen-Paarpotential wie das in Abb. 1.2 gezeigte übergeht. Auch bei der Untersuchung von  $SN$ -Multilagen mit  $\varepsilon_{FS} \neq \varepsilon_{FN}$  und  $V_S \neq 0$  ist es laut Golubov aufgrund der Translationssymmetrie des Systems ausreichend, nur eine halbe Elementarzelle zu be-

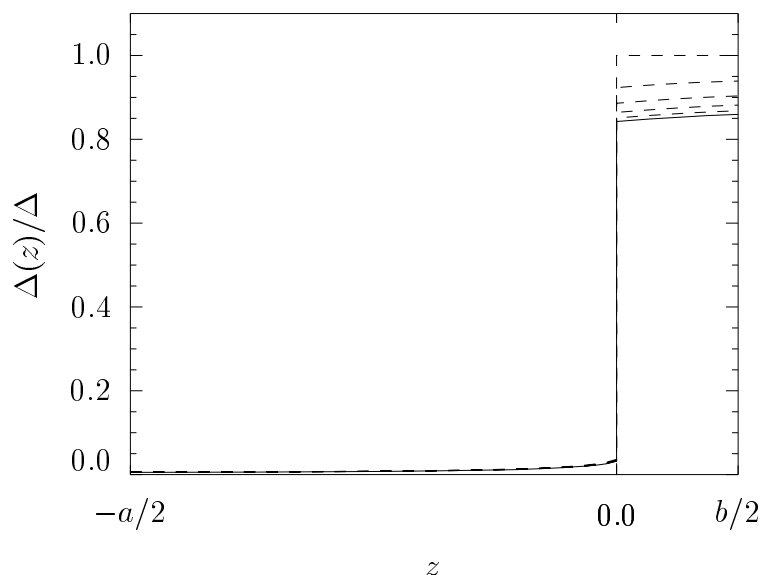


Abbildung 1.4: Selbstkonsistentes Paarpotential einer supraleitenden Doppellage mit unendlich hohen Wänden in  $z = -a/2 = 2\xi_0$  und  $z = b/2 = 0.5\xi_0$ . Die gestrichelten Linien (sichtbar im Bereich  $0 < z < b/2$ ) zeigen die iterative Annäherung an die Selbstkonsistenz;  $T_{CN} = T \ll T_{CS}$ ,  $\varepsilon_{FS}/\varepsilon_{FN} = 2$  [40].

trachten [48]. Wir sind deshalb zuversichtlich, daß auch die periodischen Fortsetzungen der für  $R \neq 0$  und Systemgrößen mehrerer Kohärenzlängen berechneten Paarpotentiale in den Abbildungen 1.4–1.7 gute Näherungen für Multilagen–Paarpotentiale darstellen [40].

Zur näheren Erläuterung der Vorgehensweise bei der iterativen Lösung des Selbstkonsistenzproblems wird in Anhang A der erste Iterationsschritt analytisch durchgeführt. Einige Details bei der nur noch numerisch möglichen Berechnung der Iterationen höherer Ordnung werden dort ebenfalls angegeben. In Abb. 1.4 sind die Zwischenergebnisse für  $\Delta(z)$  bei der iterativen Annäherung an die Selbstkonsistenz als gestrichelte Linien angegeben.

## 1.4 Ergebnisse

Für gleiche Fermienergien in  $S$  und  $N$  und ideale, saubere Kontaktflächen ( $V_S = 0$ ) verschwindet die Wahrscheinlichkeit für Normalreflexion,  $R = 0$ , Cooperpaare können ungehindert durch die transparente Grenzfläche diffundieren und es kommt sowohl in  $S$  als auch in  $N$  zu einem starken “Proximity Effect”, d.h. zu einer großen Abweichung

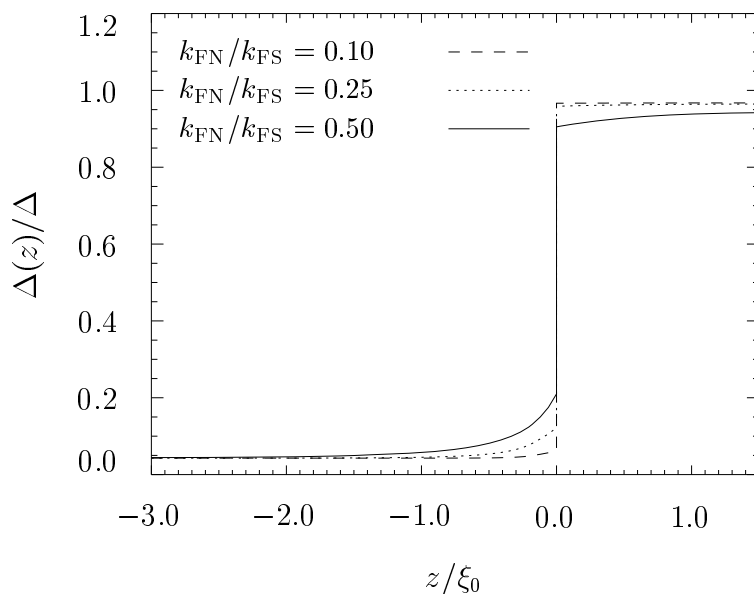


Abbildung 1.5: Selbstkonsistentes Paarpotential  $\Delta(z)$  im Bereich  $-a/2 \leq z \leq b/2$  für  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 0.1$  ( $R_0 \equiv R(k_\varrho = 0) = 0.67$ ),  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 0.25$  ( $R_0 = 0.36$ ) und  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 0.5$  ( $R_0 = 0.11$ ); ansonsten Parameter wie in Abb. 1.2.

des selbstkonsistenten Paarpotentials von der Stufenpotentialform, siehe Abb. 1.2. Die Reduktion des Ordnungsparameters in  $N$  gegenüber dem in  $S$  kommt durch die kleinere kritische Temperatur  $T_{CN} = 0.1 T_{CS}$  bzw. Paarwechselwirkung  $V_0$ , siehe Gl. (1.7), zustande.

In den Abbildungen 1.4-1.6 erkennt man, daß für  $k_{\text{FS}} \neq k_{\text{FN}}$  der “Proximity Effect” in  $S$  und  $N$  “asymmetrisch” ist: Für  $k_{\text{FS}} > k_{\text{FN}}$  werden in den Abbildungen 1.4 und 1.5 all die QT-Anregungen, deren Impuls parallel zu den Schichten größer als der Fermiimpuls der  $N$ -Schichten ist (siehe Abb. 1.3), an den Grenzflächen spiegelnd reflektiert. Sie sind im Supraleiter lokalisiert und führen zu einer Verringerung des “Proximity Effects” in  $S$ . Die Schwächung des “Proximity Effects” in  $N$  ist auf die endliche Wahrscheinlichkeit für Normalreflexion,  $R > 0$ , zurückzuführen. Mit wachsender Fehlanpassung der Fermiwellenzahlen nimmt diese Wahrscheinlichkeit zu, und das selbstkonsistente Paarpotential wird auch in  $N$  “stufenförmiger”. In Abb. 1.6 für  $k_{\text{FS}} < k_{\text{FN}}$  ist die Situation gerade umgekehrt. Totalreflexion findet in den Normalleitern statt, der “Proximity Effect” ist deshalb dort schwächer als in den Supraleitern. Die Verhältnisse der Fermiwellenzahlen  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}}$  wurden so gewählt, daß die Wahrscheinlichkeiten für Normalreflexion bei senkrechtem Einfall,  $R_0 = R(k_\varrho = 0)$ , in den Abbildungen 1.5 und 1.6 gleich sind.

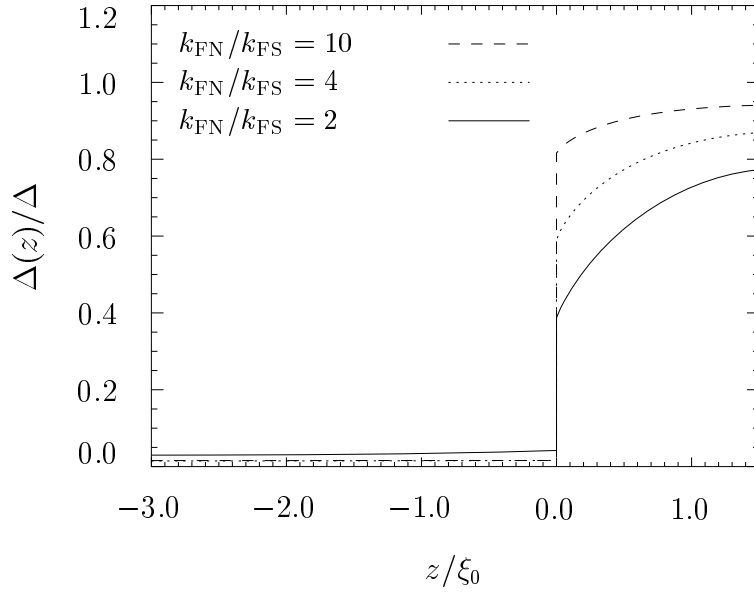


Abbildung 1.6: Selbstkonsistentes Paarpotential  $\Delta(z)$  im Bereich  $-a/2 \leq z \leq b/2$  für  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 10$  ( $R_0 = 0.67$ ),  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 4$  ( $R_0 = 0.36$ ) und  $k_{\text{FN}}/k_{\text{FS}} = 2$  ( $R_0 = 0.11$ ); ansonsten Parameter wie in Abb. 1.2.

In Abb. 1.7 ist die Abschwächung des “Proximity Effects” für gleiche Fermienergien in  $S$  und  $N$  und nichtverschwindendes Grenzflächenpotential  $V_S > 0$  “symmetrisch”. Sie kommt durch die endliche Wahrscheinlichkeit für Normalreflexion zustande. Die Reflexionskoeffizienten bei senkrechtem Einfall  $R_0$  sind wieder die gleichen wie in den Abbildungen 1.5 und 1.6.

Der Einfluß verschiedener Fermienergien in  $S$  und  $N$  oder eines Grenzflächenpotentials auf das selbstkonsistente Paarpotential in Multilagen und  $SN$ -Doppellagen ist somit qualitativ vergleichbar mit den Ergebnissen von Kieselmann [41] für  $INS$ -“Proximity“-Kontakte. Im Unterschied zu “Proximity“-Kontakten, wo das Paarpotential in der unendlich dicken  $S$ -Schicht schon bei  $z \gtrsim 2\xi_0$  seinen Bulk-Wert annimmt, findet man hier eine stärkere Reduktion in  $0 < z < b/2$  und außerdem  $d\Delta(z)/dz|_{z=b/2} = 0$ , vgl. die Abbildungen 1.5–1.7 mit Figs. 7–9 aus Ref. [41].

Man sieht in den Abbildungen 1.4 und 1.5, daß für Multilagen mit  $\varepsilon_{\text{FS}} > \varepsilon_{\text{FN}}$  und  $T_{\text{CN}} \ll T$  das Stufenpaarpotential eine gute Näherung für das selbstkonsistente Paarpotential darstellt. Für  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ , wo das selbstkonsistente Paarpotential signifikant von der Stufenform abweicht, siehe Abb. 1.2, wird in Abschnitt 2.1 gezeigt, daß die Stufenpoten-

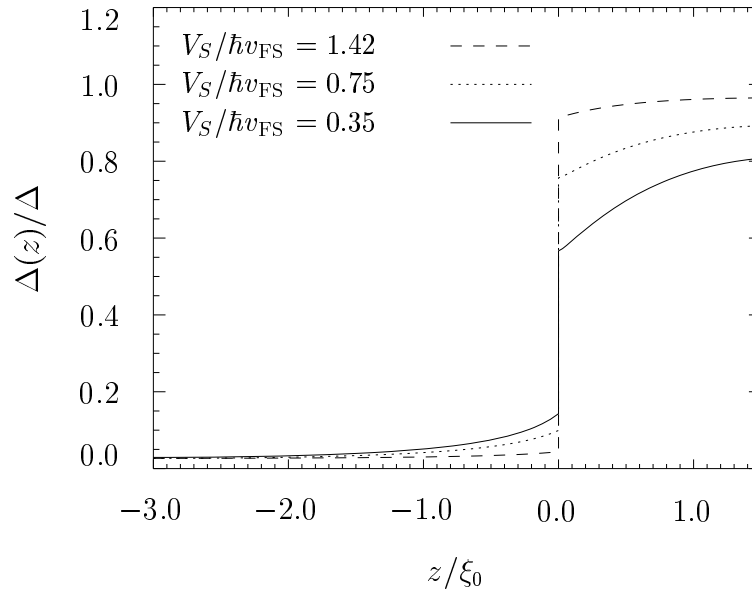


Abbildung 1.7: Selbstkonsistentes Paarpotential  $\Delta(z)$  für  $V_S/\hbar v_{\text{FS}} = 1.42$  ( $R_0 = 0.67$ ),  $V_S/\hbar v_{\text{FS}} = 0.75$  ( $R_0 = 0.36$ ) und  $V_S/\hbar v_{\text{FS}} = 0.35$  ( $R_0 = 0.11$ );  $v_{\text{FS}} = \hbar k_{\text{FS}}/m$ , ansonsten Parameter wie in Abb. 1.2.

tialnäherung zur Berechnung von Energiebändern und Zustandsdichten ausreicht, wenn man den Einfluß des “Proximity Effects” durch effektive Schichtdicken berücksichtigt.

# 2

## Energiebänder und Zustandsdichten

---

Zur Berechnung der elektronischen Struktur von  $SN$ -Multilagen verwenden wir die Bogoliubov–de Gennes Gleichungen (BdGG) mit den Paarpotentialen aus Kapitel 1. Der Wechsel der Methode an dieser Stelle ist von Vorteil, da verschiedene Fermienergien in  $N$  und  $S$  direkt durch ein räumlich variierendes Skalarpotential  $U(z)$  berücksichtigt werden können, so daß ein phänomenologischer Reflexionskoeffizient  $R$ , wie er in die Randbedingung (1.10a) für die quasiklassischen Greenschen Funktionen eingeht, nicht eingeführt werden muß. Außerdem ist die Methode der quasiklassischen Greenschen Funktionen nicht anwendbar auf Systeme, in denen die Fermienergie nicht sehr viel größer als das Paarpotential ist. Auch in diesen Fällen, die gerade in den HTSL von Bedeutung sein könnten, ist es möglich, exakte Lösungen der BdGG zu berechnen, falls die Stufenpotentialform eine gute Näherung für das Paarpotential  $\Delta(z)$  darstellt.

In Kapitel 1 haben wir bereits gesehen, daß mit steigendem Verhältnis  $\varepsilon_{FS}/\varepsilon_{FN}$  die Stufenpotentialnäherung für das Paarpotential immer besser gerechtfertigt ist, siehe Abb. 1.5. Für den Fall gleicher Fermienergien in  $S$  und  $N$ , für den das selbstkonsistente Paarpotential am stärksten vom Stufenpotentialverlauf abweicht, siehe Abb. 1.2, wird zunächst in Abschnitt 2.1 gezeigt, daß die Stufenpotentialnäherung zur Berechnung der elektronischen Struktur trotzdem ausreicht, falls der Einfluß des “Proximity Effects” durch effektive Schichtdicken berücksichtigt wird. In Abschnitt 2.2 wird dann unter Verwendung der Stufenpotentialnäherung im allgemeinen Fall verschiedener Fermienergien der Einfluß der konkurrierenden Effekte von Normalreflexion aufgrund der Fehlanpassung der Fermiimpulse einerseits und Andreev–Reflexion andererseits auf die Energiebänder und Zustandsdichten untersucht.

## 2.1 Sensitivität bezüglich der Selbstkonsistenz

Zur Bestimmung der QT–Wellenfunktionen und Energien bei beliebigen räumlichen Paarpotentialvariationen wird die WKBJ–Näherung für die BdGG verwendet [4, 49, 50]. Für die QT–Wellenfunktionen des Systems ohne äußere Felder

$$\hat{\psi}^{(0)}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

mit den Elektron– und Lochkomponenten  $u(\mathbf{r})$  und  $v(\mathbf{r})$  machen wir den Ansatz

$$\hat{\psi}^{(0)}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^{(0)}(z)e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}}, \quad (2.2)$$

wobei  $\mathbf{k}_\rho = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$  der Wellenvektor der Bewegung parallel zu den  $SN$ –Grenzflächen ist und  $\boldsymbol{\rho} = x \mathbf{e}_x + y \mathbf{e}_y$ . Die Funktionen  $\hat{\psi}^{(0)}(z)$  erfüllen die eindimensionalen BdGG

$$\begin{pmatrix} h^{(0)}(z) & \Delta(z) \\ \Delta(z) & -h^{(0)}(z) \end{pmatrix} \hat{\psi}^{(0)}(z) = E \hat{\psi}^{(0)}(z) \quad (2.3)$$

mit

$$h^{(0)}(z) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m} + U(z) - \mu; \quad (2.4)$$

$\mu$  ist das chemische Potential.

Es gilt  $\mu - U(z) \equiv \varepsilon_{\text{FN}} = \hbar^2 k_{\text{FN}}^2 / 2m$  in den  $N$ –Schichten und  $\mu - U(z) \equiv \varepsilon_{\text{FS}} = \hbar^2 k_{\text{FS}}^2$  in den  $S$ –Schichten. In Multilagennsystemen der Periodizitätslänge  $d$  müssen die Lösungen von Gl. (2.3) die Blochbedingung

$$\hat{\psi}^{(0)}(z + d) = e^{i\kappa d} \hat{\psi}^{(0)}(z) \quad (2.5)$$

mit der Blochwellenzahl  $\kappa$  erfüllen.

Das Paarpotential  $\Delta(z)$  für eine Multilage mit  $\varepsilon_{\text{FN}} = \varepsilon_{\text{FS}} \equiv \varepsilon_{\text{F}} = \hbar^2 k_{\text{F}}^2 / 2m \gg \Delta(z)$  ist durch die durchgezogene Kurve in Abb. 1.2 gegeben. Wir definieren

$$k_{z\text{F}} \equiv \sqrt{k_{\text{F}}^2 - k_\rho^2} \quad (2.6)$$

und machen den folgenden WKBJ–Ansatz [40]:

$$\hat{\psi}^{(0)}(z) = \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} e^{i\eta(z)/2} \\ e^{-i\eta(z)/2} \end{pmatrix} e^{i\xi(z)} e^{ik_{z\text{F}}z}. \quad (2.7)$$

Setzt man Gl. (2.7) in die BdGG (2.3) ein und vernachlässigt Terme der Größenordnung  $\Delta/\varepsilon_F$ , so erhält man die folgenden Gleichungen für die langsam veränderlichen Funktionen  $\eta(z)$  und  $\xi(z)$  [4, 50]:

$$\nabla_z \eta = \frac{2m}{\hbar^2 k_{zF}} [E - \Delta(z) \cos \eta], \quad (2.8a)$$

$$\nabla_z \xi = i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} \Delta(z) \sin \eta. \quad (2.8b)$$

Die zwei Lösungen  $\eta_1(z), \xi_1(z)$  und  $\eta_2(z), \xi_2(z)$  von Gl. (2.8) sind durch die zwei linear unabhängigen, asymptotischen Quasiteilchenwellenfunktionen, die tief in den  $S$ -Schichten bekannt sind, charakterisiert [4, 50]. Die Anpassung der Linearkombinationen der entsprechenden Lösungen, Gl. (2.7), in  $z = -a/2$  und die Periodizitätsbedingung (2.5) liefern nach Anhang B die Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} 0 &= 2 \sin \{ [\eta_2(-a/2) - \eta_1(-a/2)] / 2 \} \cos [(\kappa - k_{zF}) d] \\ &+ \exp \{ -i [\xi_2(-a/2) - \xi_1(-a/2) + 2\xi_S] \} \sin [\eta_1(-a/2)] \\ &- \exp \{ i [\xi_2(-a/2) - \xi_1(-a/2) + 2\xi_S] \} \sin [\eta_2(-a/2)], \end{aligned} \quad (2.9)$$

mit

$$\xi_S \equiv i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} b/2, \quad (2.10)$$

$$\Delta_0 = \Delta(b/2). \quad (2.11)$$

Zur Berechnung von Energieeigenwerten aus Gl. (2.9) werden die Differentialgleichungen (2.8) mit den Randbedingungen

$$\eta_1(z = b/2) = \arccos(E/\Delta_0), \quad (2.12a)$$

$$\xi_1(z = b/2) = i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} b/2 \quad (2.12b)$$

und

$$\eta_2(z = b/2) = -\arccos(E/\Delta_0), \quad (2.13a)$$

$$\xi_2(z = b/2) = -i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} b/2 \quad (2.13b)$$

in die Integralgleichungen [50]

$$\eta_1(z) = \arccos(E/\Delta_0) - \frac{2m}{\hbar^2 k_{zF}} \int_z^{b/2} [E - \Delta(z') \cos \eta_1(z')] dz', \quad (2.14a)$$

$$\xi_1(z) = i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} b/2 - i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} \int_z^{b/2} \Delta(z') \sin \eta_1(z') dz' \quad (2.14b)$$

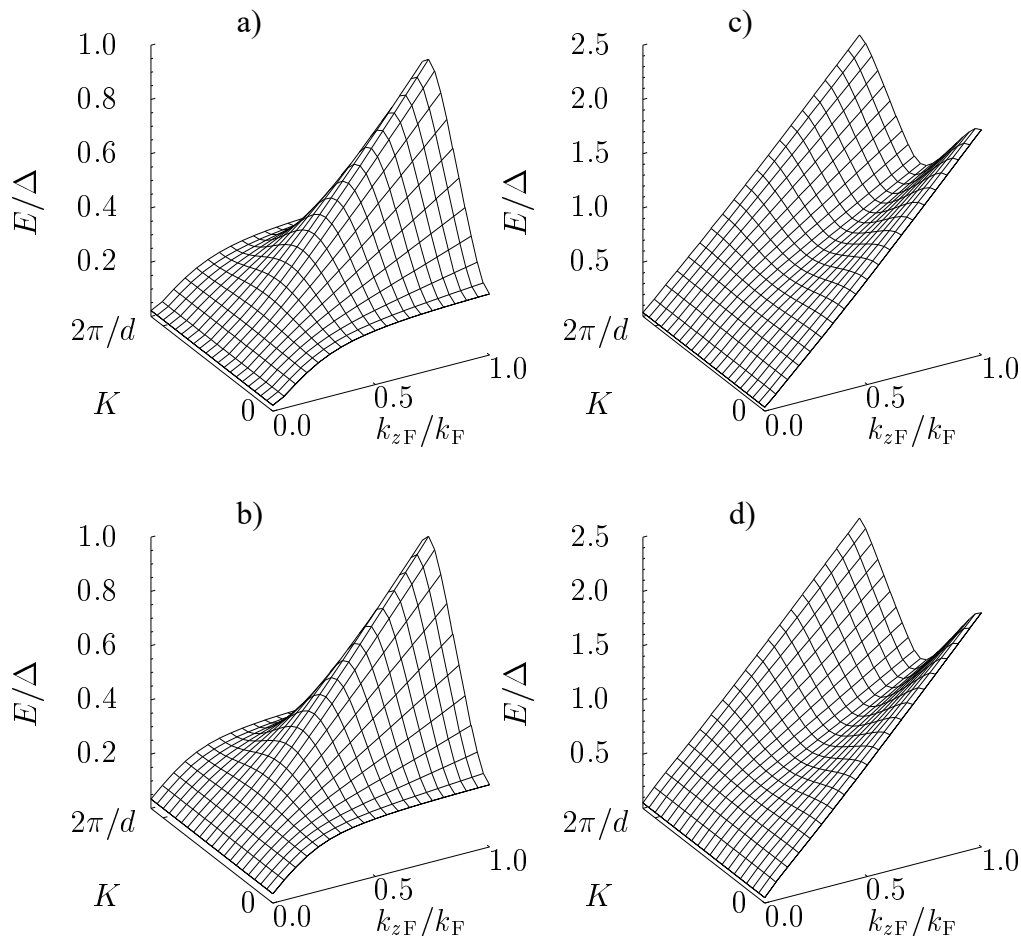


Abbildung 2.1: Dispersionsrelation  $E(k_{zF}, \kappa)$  als Funktion von  $k_{zF} = (k_F^2 - k_Q^2)^{1/2}$  und  $K = k_{zF} - \kappa$  für das niedrigste (a,b) und das nächsthöhere (c,d) Band der Multilage aus Abb. 1.2; (a,c) für das Stufenpotential, (b,d) für das selbstkonsistente Paarpotential.

bzw.

$$\eta_2(z) = -\arccos(E/\Delta_0) - \frac{2m}{\hbar^2 k_{zF}} \int_z^{b/2} [E - \Delta(z') \cos \eta_2(z')] dz', \quad (2.15a)$$

$$\xi_2(z) = -i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} b/2 - i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} \int_z^{b/2} \Delta(z') \sin \eta_2(z') dz' \quad (2.15b)$$

umgeformt. Diese werden zum einen analytisch in 1. Ordnung Picard–Iteration und zum anderen numerisch gelöst. In 1. Ordnung Picard–Iteration erhält man

$$\eta_1(z) = \arccos(E/\Delta_0) - \frac{2mE}{\hbar^2 k_{zF}} f(z), \quad (2.16a)$$

$$\xi_1(z) = i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} (z + f(z)) \quad (2.16b)$$

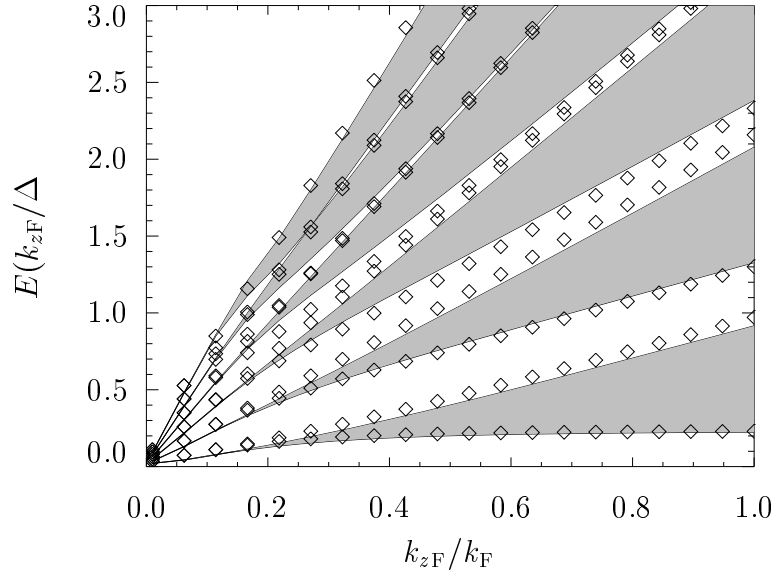


Abbildung 2.2: Energiebänder der Multilage aus Abb. 1.2. Die Karos zeigen die Bandkanten, die für das selbstkonsistente Paarpotential berechnet wurden. Die Bänder des Stufenpotentials sind durch die schraffierten Flächen gegeben. Der Übersichtlichkeit halber sind nur die untersten sechs Zweige des Spektrums dargestellt.

und

$$\eta_2(z) = -\arccos(E/\Delta_0) - \frac{2mE}{\hbar^2 k_{zF}} f(z), \quad (2.17a)$$

$$\xi_2(z) = -i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} (z + f(z)), \quad (2.17b)$$

wobei allein die Funktion  $f(z)$  Information über die räumliche Variation des Ordnungsparameters in integrierter Form enthält:

$$f(z) \equiv \int_z^{b/2} [1 - \Delta(z')/\Delta_0] dz'. \quad (2.18)$$

Die Funktionen  $\eta_{1,2}(-a/2, E, k_{zF})$  und  $\xi_{1,2}(-a/2, E, k_{zF})$  werden für das selbstkonsistente Paarpotential sowohl numerisch aus Gl. (2.14) und (2.15) als auch in 1. Ordnung Picard–Iteration aus Gl. (2.16) und (2.17) bestimmt und in die Eigenwertgleichung (2.9) eingesetzt. Wie in *SNS*–Kontakten [50] ist dabei die Eigenwertgleichung in 1. Ordnung Picard–Iteration mit dem selbstkonsistenten Paarpotential, durchgezogene Kurve in Abb. 1.2, identisch mit derjenigen, die man mit dem periodischen Stufenpotential, gestrichelte Kurve in Abb. 1.2, erhält. Sie hat die Form von Gl. (2.40) mit effektiven *S*–

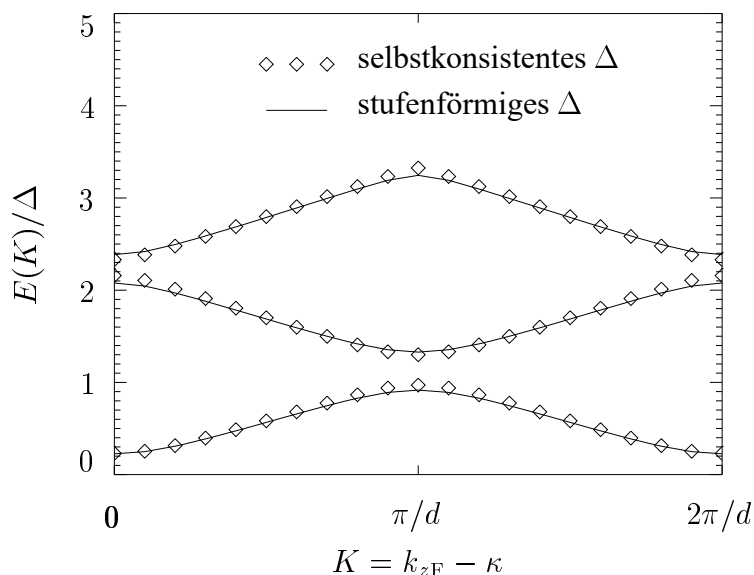


Abbildung 2.3: Dispersionsrelation  $E(K)$  der untersten drei Bänder aus Abb. 2.2 für  $k_{zF} = k_F$ .

und  $N$ -Schichtdicken. Die Nullstellen von Gl. (2.9), die für gegebenes  $k_{zF}$  und  $\kappa$  die Energieeigenwerte  $E(k_{zF}, \kappa)$  liefern, werden numerisch bestimmt. In den Abbildungen 2.1-2.4 werden die Energiespektren und Zustandsdichten, die man für das selbstkonsistente Paarpotential mit den numerisch aus Gl. (2.14) und (2.15) berechneten Lösungen  $\eta_{1,2}(-a/2, E, k_{zF})$  und  $\xi_{1,2}(-a/2, E, k_{zF})$  erhält, mit denjenigen verglichen, die sich mit den in 1. Ordnung Picard-Iteration aus Gl. (2.16) und (2.17) bestimmten Lösungen, d.h. für das periodische Stufenpotential mit den effektiven Schichtdicken  $a_{\text{eff}}$ , Gl. (2.19), und  $b_{\text{eff}} = d - a_{\text{eff}}$ , ergeben. Die gute quantitative Übereinstimmung der mit den beiden beschriebenen Methoden erhaltenen Spektren zeigt, daß die folgende approximative Vorgehensweise bei der Berechnung der elektronischen Struktur von Multilagen ausreicht: Ersetze wie in Abb. 1.2 angedeutet das selbstkonsistente Paarpotential  $\Delta(z)$  durch ein Stufenpotential, wobei die Fläche unter beiden Kurven die gleiche ist, und ordne den  $N$ -Schichten mit verschwindendem Paarpotential die effektive Dicke

$$a_{\text{eff}} = 2f(-a/2) = 2 \int_{-a/2}^{b/2} [1 - \Delta(z')/\Delta_0] dz' \quad (2.19)$$

zu. Der Fehler bei dieser Näherung liegt in einem kleinen Unterschied [50] in der Zustandsdichte für  $E \rightarrow 0$ , der durch das endliche selbstkonsistente Paarpotential in

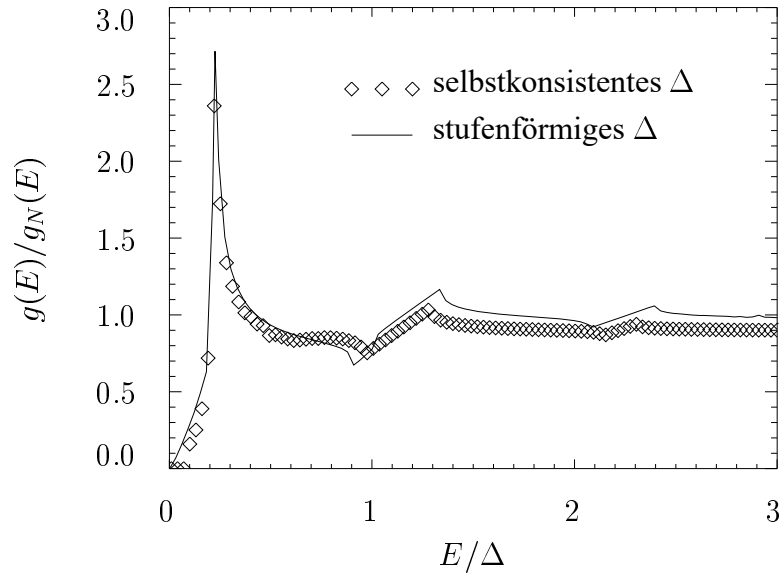


Abbildung 2.4: Die globale Zustandsdichte pro Einheitsfläche — normiert auf  $g_N(E) = 2mdk_F/\pi^2\hbar^2$  — für die Multilage aus Abb. 1.2. Der “Subgap peak” bei  $E \approx 0.3 \Delta$  ist durch die unterste Bandkante bei  $k_{zF} = k_F$  in Abb. 2.1–2.3 bedingt. Für die betrachtete Multilage mit  $a = 6 \xi_0 > b = 3 \xi_0$  findet man keinen “BCS–Peak” bei  $E = \Delta$ .

$z = -a/2$  bedingt ist, und in einer minimalen Reduktion der Bandweiten, siehe die Abbildungen 2.2–2.4.

## 2.2 Lokalisierungseffekte

In Kap. 1 haben wir gesehen, daß das selbstkonsistente Paarpotential in Multilagen mit  $\varepsilon_{\text{FS}} > \varepsilon_{\text{FN}}$  (und  $T_{\text{CN}} \ll T$ ) in guter Näherung stufenförmig ist, siehe die Abbildungen 1.4 und 1.5. Für Multilagen mit  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ , in denen das selbstkonsistente Paarpotential (durchgezogene Kurve in Abb. 1.2) stark von der Stufenform abweicht, wurde in Abschnitt 2.1 gezeigt, daß das Stufenpotential (gestrichelte Kurve in Abb. 1.2) zur Berechnung der elektronischen Struktur trotzdem ausreicht, wenn man den Einfluß des “Proximity Effects” in effektiven Schichtdicken berücksichtigt. Deshalb werden im folgenden Systeme mit  $\varepsilon_{\text{FS}} \geq \varepsilon_{\text{FN}}$  betrachtet, und es wird für das Paarpotential  $\Delta(z)$  in Gl. (2.3) die Stufenpotentialnäherung verwendet.

### 2.2.1 Quasiteilchenwellenfunktionen und Energiebänder

In den supraleitenden Schichten sind die Lösungen der BdGG (2.3) mit dem periodischen Stufenpotential aus Abb. 1.2 gegeben durch eine Linearkombination von vier linear unabhängigen Lösungen mit den Entwicklungskoeffizienten  $A_1 \dots A_4$

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^{(0)}(z) &= A_1 \begin{pmatrix} \Gamma^+ \\ \Gamma^- \end{pmatrix} \sin(k_S^+ z) + A_2 \begin{pmatrix} \Gamma^+ \\ \Gamma^- \end{pmatrix} \cos(k_S^+ z) \\ &+ A_3 \begin{pmatrix} \Gamma^- \\ \Gamma^+ \end{pmatrix} \sin(k_S^- z) + A_4 \begin{pmatrix} \Gamma^- \\ \Gamma^+ \end{pmatrix} \cos(k_S^- z), \end{aligned} \quad (2.20)$$

wobei

$$k_S^\pm = \sqrt{k_{z\text{FS}}^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2} E \delta}, \quad (2.21)$$

$$k_{z\text{FS}} \equiv \sqrt{k_{\text{FS}}^2 - k_\rho^2} \quad (2.22)$$

und

$$\delta \equiv \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{E^2}}, \quad (2.23)$$

$$\Gamma^\pm \equiv \sqrt{1 \pm \delta}. \quad (2.24)$$

Für  $E \geq \Delta$  ist  $\delta$  reell. Für  $E < \Delta$  ist  $\delta$  rein imaginär, und  $\Gamma^\pm$  und die Wellenzahlen  $k_S^\pm$  sind komplex. Die Quasiteilchenwellenfunktionen im Normalleiter lassen sich als Linearkombination von vier Elektron- und Lochlösungen darstellen:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^{(0)}(z) &= A_5 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \sin(k_N^+ z) + A_6 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(k_N^+ z) \\ &+ A_7 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin(k_N^- z) + A_8 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(k_N^- z) \end{aligned} \quad (2.25)$$

mit

$$k_N^\pm = \sqrt{k_{z\text{FN}}^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad (2.26)$$

$$k_{z\text{FN}} \equiv \sqrt{k_{\text{FN}}^2 - k_\rho^2}. \quad (2.27)$$

Die Anschlußbedingungen der in den Teilbereichen  $0 < z < b$  und  $-a < z < 0$  gültigen Lösungen (2.20) bzw. (2.25) sind wie üblich durch die Forderung nach Stetigkeit und stetiger Differenzierbarkeit der Quasiteilchenwellenfunktion an den Phasengrenzen in  $z = -a$  und  $z = 0$  gegeben, d.h.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^{(0)}(z) \Big|_{-a-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^{(0)}(z) \Big|_{-a+\epsilon}, \quad (2.28a)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^{(0)}(z) \Big|_{0-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^{(0)}(z) \Big|_{0+\epsilon}, \quad (2.28b)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{d}{dz} \hat{\psi}^{(0)}(z) \right] \Big|_{-a-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{d}{dz} \hat{\psi}^{(0)}(z) \right] \Big|_{-a+\epsilon}, \quad (2.28c)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{d}{dz} \hat{\psi}^{(0)}(z) \right] \Big|_{0-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{d}{dz} \hat{\psi}^{(0)}(z) \right] \Big|_{0+\epsilon}. \quad (2.28d)$$

Sie liefern zusammen mit der Periodizitätsbedingung (2.5), die die Lösung am Ort  $z = -a - \epsilon$  mit der Lösung am Ort  $z = b - \epsilon$  verknüpft, die Eigenwertgleichung [40, 51]

$$D_0 + D_1\theta + D_2\theta^2 + D_1\theta^3 + D_0\theta^4 = 0 \quad (2.29)$$

und die Entwicklungskoeffizienten  $A_1 \dots A_8$ ;  $\theta \equiv e^{i\kappa d}$ . Die Funktionen  $D_i(E, k_\rho)$ ,  $i = 0, 1, 2$ , sind in Anhang C explizit in den Gln. (C.4)–(C.6) angegeben. Sie sind entweder alle reell oder alle rein imaginär, so daß sie sich immer zu reellen Funktionen in der Eigenwertgleichung umdefinieren lassen. In Anhang C wird auch die Vorgehensweise bei der numerischen Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten  $A_1 \dots A_8$  erläutert. Multiplikation der Eigenwertgleichung (2.29) mit  $\theta^{*2}$  und Addition der daraus resultierenden Gleichung zur ursprünglichen liefert eine quadratische Gleichung für  $\cos(\kappa^\pm d)$  mit den beiden Lösungen

$$\begin{aligned} \cos(\kappa^\pm d) &= -\tilde{D}_1/4 \pm \left[ \left( \tilde{D}_1/4 \right)^2 - \tilde{D}_2/4 + 1/2 \right]^{1/2} \\ &\equiv F^\pm(E, k_\rho), \end{aligned} \quad (2.30)$$

wobei

$$\tilde{D}_1 \equiv D_1/D_0, \quad (2.31a)$$

$$\tilde{D}_2 \equiv D_2/D_0. \quad (2.31b)$$

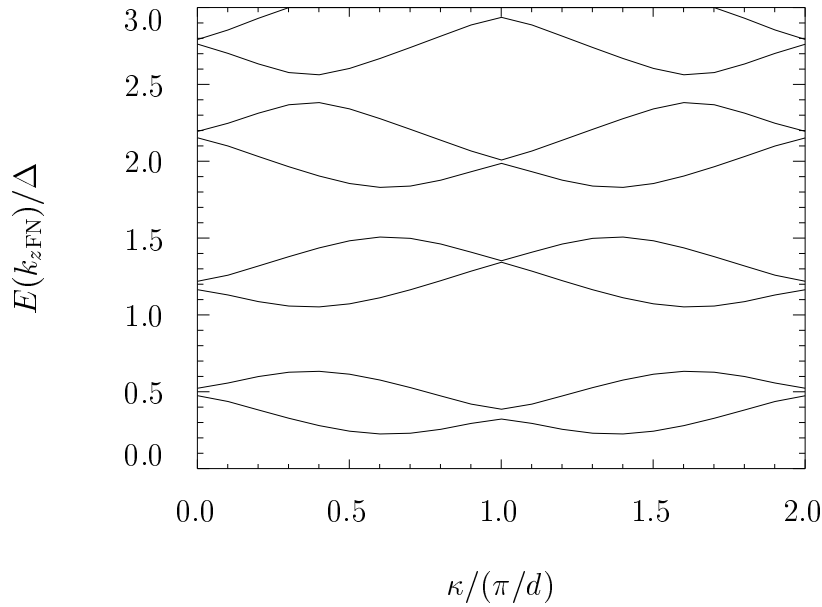


Abbildung 2.5: Bandstruktur  $E(\kappa)$  einer Multilage mit  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 3 \xi_0$ ,  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ ,  $\varepsilon_{\text{FS}}/\Delta = 5000$  und  $T = 0.5 T_C$  für  $k_{z\text{FN}} = k_{\text{FN}}$ .

Die beiden Bedingungen

$$\left(\tilde{D}_1/4\right)^2 - \tilde{D}_2/4 + 1/2 \geq 0 \quad (2.32)$$

und

$$|F^\pm(E, k_\varrho)| \leq 1 \quad (2.33)$$

legen die Bereiche für  $E$  und  $k_{z\text{FN}}$  fest, für die die Eigenwertgleichung (2.30) Lösungen besitzt, und liefern die Energiebänder in den Abbildungen 2.5 und 2.6.

### Andreev–Näherung

Im Spezialfall gleicher Fermienergien in  $S$  und  $N$ ,  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}} \equiv \varepsilon_{\text{F}}$ , läßt sich Gl. (2.30) für

$$\varepsilon_{\text{F}} \equiv \frac{\hbar^2 k_{\text{F}}^2}{2m} \gg \Delta \quad (2.34)$$

mit Hilfe der Andreev–Näherung vereinfachen. Dazu werden die Quadratwurzeln in den Gln. (2.21) und (2.26) gemäß

$$k_S^\pm \approx k_{z\text{F}} \pm q\delta, \quad (2.35a)$$

$$k_N^\pm \approx k_{z\text{F}} \pm q \quad (2.35b)$$

mit

$$k_{zF} \equiv \sqrt{k_F^2 - k_q^2}, \quad (2.36)$$

$$q \equiv \frac{mE}{\hbar^2 k_{zF}} \quad (2.37)$$

entwickelt. Für die überwiegende Zahl der Zustände in der Fermikugel, für die  $k_{zF}$  in der Größenordnung von  $k_F$  ist, ist diese Näherung unter der in Gl. (2.34) angegebenen Bedingung sehr gut gerechtfertigt. [Physikalisch bedeutet die Andreev–Näherung, daß der  $z$ –Impuls der Mehrzahl der Quasiteilchen in der Nähe der Fermikante so groß ist, daß er durch räumliche Variationen des kleinen Paarpotentials kaum geändert wird und in sehr guter Näherung erhalten bleibt. In dieser Näherung impliziert die Stetigkeit der Wellenfunktion auch die Stetigkeit ihrer Ableitung. Es kommt nicht zu einer Mischung von Zuständen mit  $z$ –Impulsen in bzw. entgegen der  $z$ –Richtung, und die QT–Wellenfunktionen sind im wesentlichen Linearkombinationen einer elektron– und einer lochartigen QT–Anregung mit nahezu gleichem Impuls aber entgegengesetzten Gruppengeschwindigkeiten, siehe Anhang D. QT–Zustände mit entgegengesetzten Impulsen sind zueinander entartet.] Mit Gl. (2.35) und  $k_{zF} \gg q$  erhält man für  $\tilde{D}_{1,2}$  aus Gl. (2.31) [51]

$$\tilde{D}_1 = -4Z \cos(k_{zF}d), \quad (2.38a)$$

$$\tilde{D}_2 = 2 + 4Z^2 - 4 \sin^2(k_{zF}d), \quad (2.38b)$$

wobei

$$Z \equiv \cos(q\delta b) \cos(qa) - \frac{1}{\delta} \sin(q\delta b) \sin(qa). \quad (2.39)$$

Die Gleichungen (2.38) und (2.39) liefern, eingesetzt in Gl. (2.30), die bekannte Eigenwertgleichung [3-5]

$$\cos[(\kappa^\pm \pm k_{zF})d] = \cos(q\delta b) \cos(qa) - \frac{1}{\delta} \sin(q\delta b) \sin(qa). \quad (2.40)$$

Diese Gleichung ist auch in 1. Ordnung Picard–Iteration der WKBJ–Näherung für selbstkonsistente Paarpotentiale gültig, wie in Abschnitt 2.1 gezeigt wurde.  $\kappa^+$  bezieht sich auf das obere,  $\kappa^-$  auf das untere Vorzeichen in Gl. (2.40). In Abb. 2.7 sind die Energiebänder, die in jedem Subband für die beiden Vorzeichen  $\pm$  in Gl. (2.40) mit Variation von  $\kappa^\pm$  den gleichen Energiebereich überspannen, dargestellt. In den Abbildungen 2.6 und 2.7 erkennt man, daß die Blochbänder für kleine  $E$  und  $k_{zFN}$  zu diskreten Energieniveaus entarten. Die Quasiteilchen in diesen Niveaus sind in den  $S$ –Schichten so stark gedämpft, daß keine Blochwellen–Propagation zwischen verschiedenen  $N$ –Schichten stattfindet. Sie sind aufgrund von Andreev–Reflexion in den  $N$ –Schichten lokalisiert.

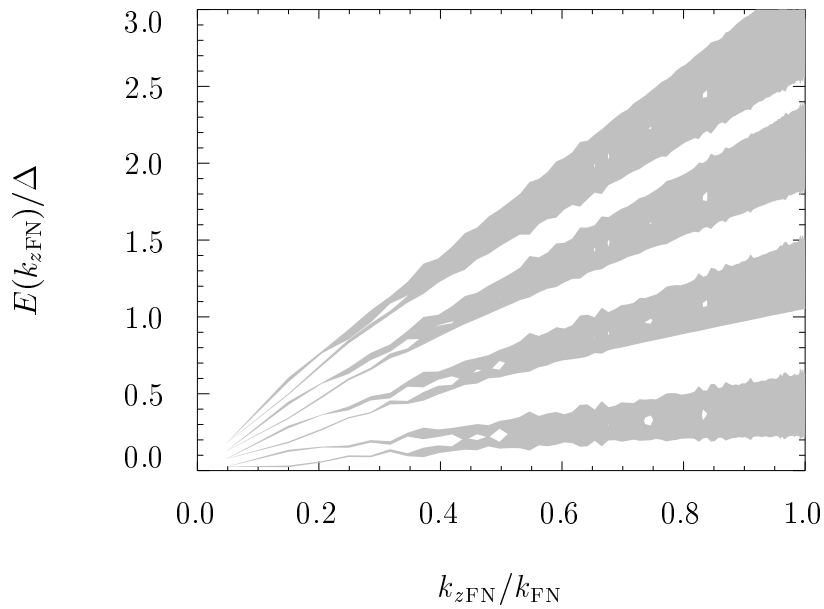


Abbildung 2.6: Energiebänder der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.5.

In Abb. 2.5 wird deutlich, daß für  $\varepsilon_{\text{FS}} > \varepsilon_{\text{FN}}$  das räumlich variierende Skalarpotential  $U(z)$  die Entartung bei  $\kappa d = n\pi$ ,  $n = \text{ganzzahlig}$ , aufhebt, die man im Fall gleicher Fermienergien,  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ , hat. Für kleine  $k_{z\text{FN}}$  wird die Separation der Bandkanten größer, und es kommt zu der Aufspaltung der Bänder in Abb. 2.6.

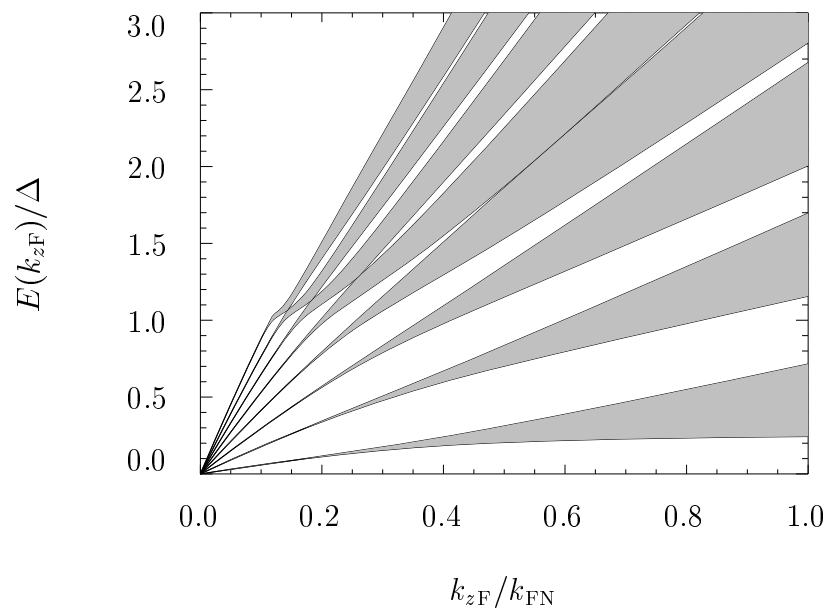


Abbildung 2.7: Energiebänder einer Multilage mit  $\epsilon_{FN} = \epsilon_{FS}$ ; ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.5.

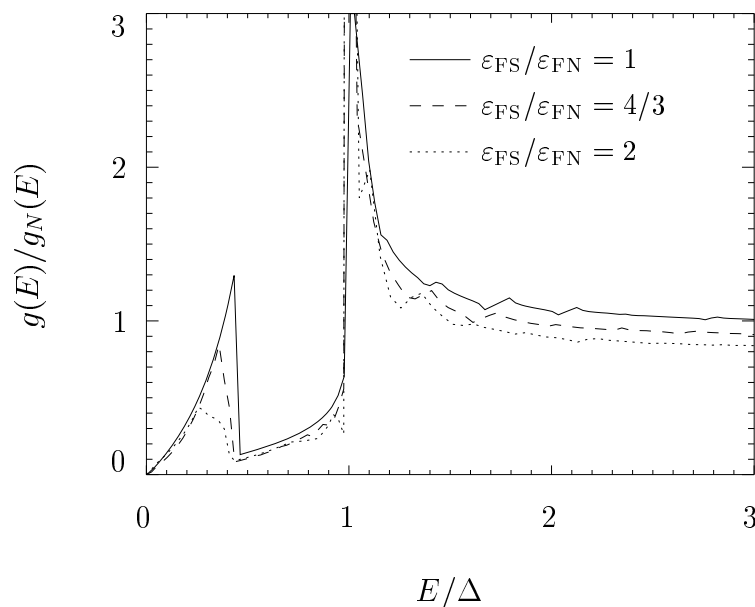


Abbildung 2.8: Globale Zustandsdichte von Multilagen mit dicken supraleitenden Schichten,  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 18 \xi_0$ , und verschiedenen Verhältnissen der Fermienergien.

## 2.2.2 Globale Zustandsdichte

Aus den Lösungen der Eigenwertgleichung (2.30) wird die globale Zustandsdichte pro Flächeneinheit der Querschnittsfläche  $L_x L_y$  für die beiden Spinrichtungen und pro Periodizitätslänge  $d$  berechnet:

$$\begin{aligned}
 g(E) &= \frac{1}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{k}_\varrho, \kappa} \delta(E - E(k_\varrho, \kappa)) \\
 &= \frac{1}{\pi} \int dk_\varrho k_\varrho \sum_{i=+,-} \frac{d}{\pi} \int d\kappa^i \delta(E - E(k_\varrho, \kappa^i)) \\
 &= \frac{d}{\pi^2} \int dk_\varrho k_\varrho \sum_{i=+,-} \left| \frac{\partial \kappa^i}{\partial E(k_\varrho, \kappa^i)} \right|_{E(k_\varrho, \kappa^i)=E}. \tag{2.41}
 \end{aligned}$$

Aus Gl. (2.30) folgt

$$\left| \frac{\partial \kappa^i}{\partial E(k_\varrho, \kappa^i)} \right| = \frac{1}{d} \left| \frac{\partial \arccos[F^i(E, k_\varrho)]}{\partial E} \right|. \tag{2.42}$$

Die Integration über  $k_\varrho$  in Gl. (2.41) ist für gegebenes  $E$  auf die Intervalle beschränkt, in denen die Gln. (2.32) und (2.33) erfüllt sind. Diese Intervalle ergeben sich aus den Schnitt-

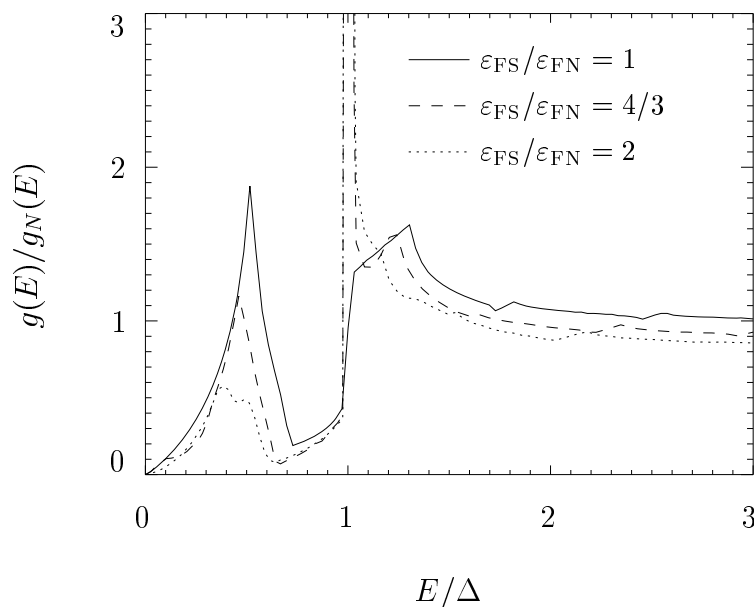


Abbildung 2.9: Globale Zustandsdichte von Multilagen mit  $a = 5 \xi_0$ ,  $b = 8 \xi_0$  und verschiedenen Verhältnissen der Fermienergien.

ten von  $E = \text{const.}$  mit den Kurven in den Abbildungen 2.6 und 2.7, die die schattierten Flächen eingrenzen.

Die Energieeigenwerte sowohl der Zustände, die aufgrund der  $k_\varrho$ -Fehlanpassung in den  $S$ -Schichten lokalisiert sind, als auch derjenigen, die in den  $N$ -Schichten wegen fast perfekter Andreev-Reflexion gebunden sind, sind unabhängig von  $\kappa$ . Sie tragen zur Zustandsdichte bei wie die entsprechenden  $(E, k_\varrho)$  Zustände in isolierten supraleitenden Filmen der Dicke  $b$  bzw. in  $SN$ -Kontakten mit  $N$ -Schichtdicke  $a$  und unendlich ausgedehnten  $S$ -Schichten. Die  $k_\varrho$ -Fehlanpassung, vgl. Abb. 1.3, führt zu einem imaginären  $k_{zFN}$  und somit zu einem exponentiellen Abfall der Quasiteilchenwellenfunktionen in den  $N$ -Schichten.

Einige typische Ergebnisse für globale Zustandsdichten sind in den Abbildungen 2.8–2.12 zu sehen [40, 51]. Für Systeme mit dicken  $S$ -Schichten und  $\varepsilon_{FN} = \varepsilon_{FS}$  zeigt die Zustandsdichte in Abb. 2.8 den “subgap peak” bei  $E < \Delta$ , den BCS-Peak bei  $E = \Delta$  und die Tomasch-McMillan-Anderson Oszillationen bei  $E > \Delta$ , die man auch in  $SN$ -Kontakten findet [40, 50, 52]. Mit wachsendem Verhältnis  $\varepsilon_{FS}/\varepsilon_{FN}$  nimmt der “subgap peak” ab und der BCS-Peak wird aufgrund der wachsenden Anzahl von in den Supraleitern lokalisierten Quasiteilchen höher. In Multilagen mit dünneren  $S$ -Schichten, siehe Abb. 2.9, ist der “subgap peak” stärker ausgeprägt und der Effekt der Tomasch-

McMillan–Anderson Oszillationen in der Nähe von  $E \geq \Delta$  wird bedeutsamer. Für  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 2$  führt die Aufspaltung der Bänder, die im Zusammenhang mit den Abbildungen 2.5 und 2.6 diskutiert wurde, auch zu einer merklichen Aufspaltung des “subgap peaks”. Für  $a = 8 \xi_0 > b = 3 \xi_0$  und  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$  dominiert der “subgap peak” die globale Zustandsdichte in Abb. 2.10. Dagegen führt bei gleichen Schichtdicken und für  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$  die Lokalisierung von Quasiteilchen in den Supraleitern dazu, daß der BCS–Peak bei  $E \gtrsim \Delta$  stärker als der “subgap peak” ausgeprägt ist, siehe Abb. 2.11.

### Temperaturabhängigkeit

Abb. 2.12 zeigt den Einfluß der Temperatur auf die Zustandsdichte. Die Temperaturabhängigkeit der energetischen Position des “subgap peaks” im Vergleich zu derjenigen des BCS–Peaks eines homogenen Supraleiters ist in Abb. 2.13 für zwei Multilagen und einen *SNS*–Kontakt dargestellt. Im Temperaturbereich nicht zu nahe bei  $T_C$  wandert der “subgap peak” langsamer zu kleineren Energien als  $\Delta(T)$ . Dieser Effekt wird mit steigender Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Quasiteilchen in *S*, d.h. mit steigendem  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}}$  oder  $b$ , noch verstärkt. In HTSL wurden experimentell Energielücken gefunden, die — normiert auf ihren Wert bei  $T = 0 \text{ K}$  — deutlich über der BCS–Kurve  $\Delta(T)/\Delta(T = 0)$  lagen [26, 28]. Es bleibt zu klären, ob diese Ergebnisse etwas mit der Temperaturabhängigkeit des “subgap peaks” in unserem einfachen Multilagenmodell zu tun haben.

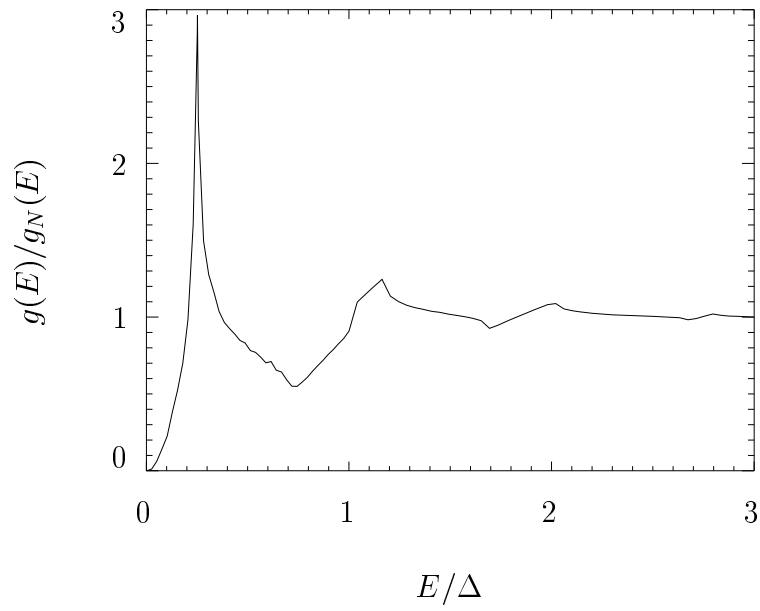


Abbildung 2.10: Globale Zustandsdichte einer Multilage mit  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 3 \xi_0$  und  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$ .

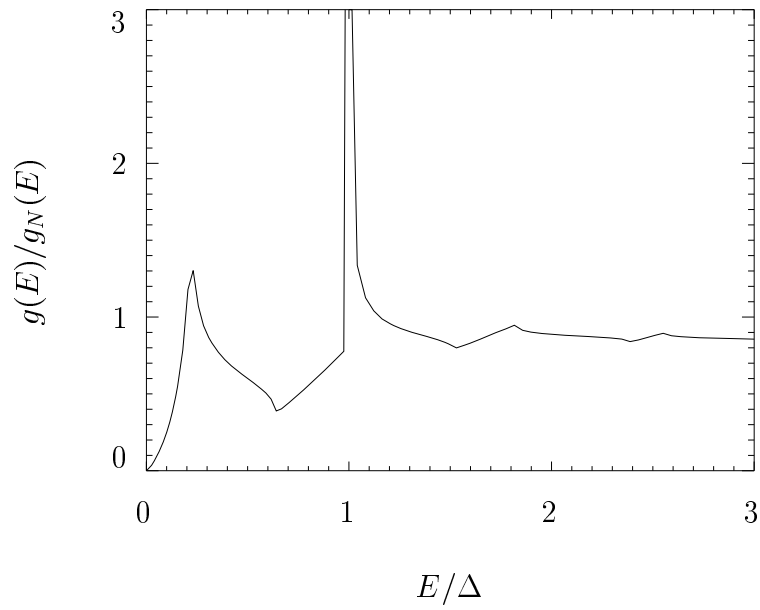


Abbildung 2.11: Globale Zustandsdichte einer Multilage mit  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 3 \xi_0$  und  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 4/3$ .

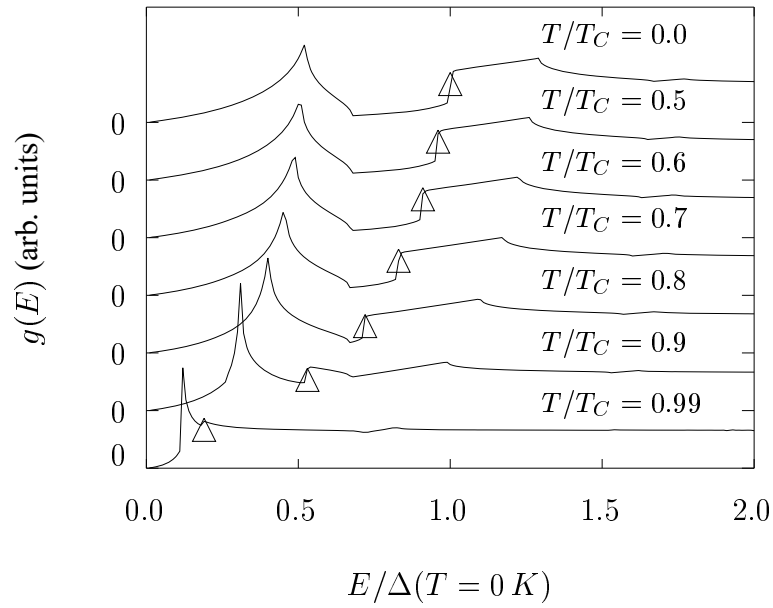


Abbildung 2.12: Temperaturabhängigkeit der globalen Zustandsdichte einer Multilage mit  $a = 5 \xi_0$ ,  $b = 8 \xi_0$  und  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ . Die Dreiecke markieren die energetische Position des BCS-Peaks eines homogenen Supraleiters.

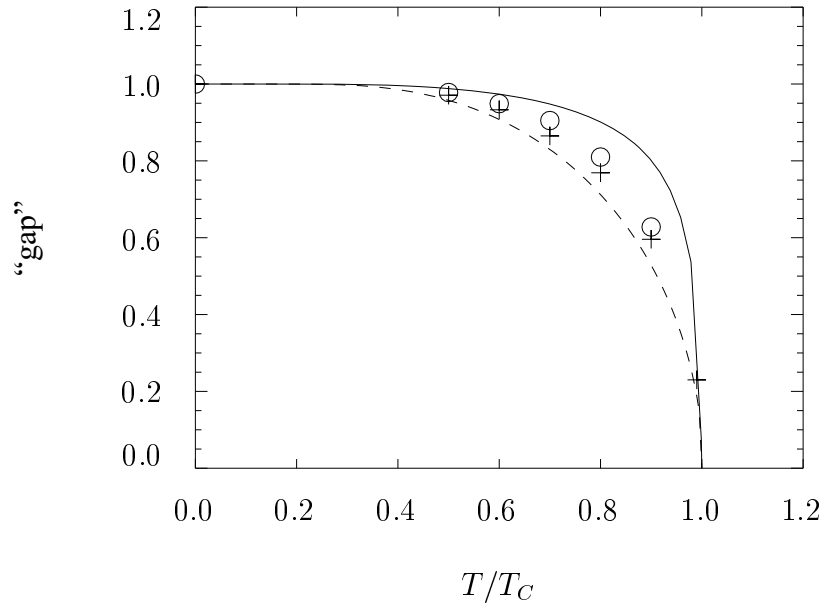


Abbildung 2.13: Temperaturabhängigkeit der reduzierten energetischen Position des “subgap peaks” einer Multilage mit  $a = 5 \xi_0$ ,  $b = 8 \xi_0$  und  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$  (+) bzw.  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 2$  (o) [40, 51]. Die durchgezogene Linie zeigt diese Temperaturabhängigkeit für einen  $SN S$ -Kontakt ( $b \rightarrow \infty$ ) mit  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$  und  $N$ -Schichtdicke  $a = 6 \xi_0$ . Zum Vergleich ist die Temperaturabhängigkeit der Energielücke eines homogenen BCS-Supraleiters als gestrichelte Linie angegeben.

### 2.2.3 Lokale Zustandsdichte

Die lokale Zustandsdichte ist gegeben durch die Einteilchenspektralfunktion im Quasiteilchenbild

$$\rho(E, z) = \sum_i [|u_i(z)|^2 \delta(E - E_i) + |v_i(z)|^2 \delta(E + E_i)], \quad (2.43)$$

wobei die Summation über  $i = (\mathbf{k}_\rho, \kappa)$  auf die positiven Energieeigenzustände beschränkt ist [53]. Zur Berechnung der lokalen Zustandsdichte werden zusätzlich zu den Energieeigenwerten auch die Quasiteilchenwellenfunktionen benötigt. Sie werden in Anhang D für den Fall  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}} \gg \Delta$  aus der Anpaßbedingung an der Phasengrenze, aus der Periodizitätsbedingung (2.5) und der Normierungsbedingung

$$\int [|u(\mathbf{r})|^2 + |v(\mathbf{r})|^2] d^3r = 1 \quad (2.44)$$

berechnet. Für den allgemeineren Fall,  $\varepsilon_{\text{FS}} \neq \varepsilon_{\text{FN}}$ , wird in Anhang C die Vorgehensweise bei der numerischen Bestimmung der Koeffizienten der Quasiteilchenwellenfunktionen erläutert.

Der Vergleich von Abb. 2.14 mit Abb. 2.15 und von Abb. 2.17 mit Abb. 2.18 zeigt, daß der Anstieg der Zustandsdichte bei  $E = \Delta$  mit wachsendem Verhältnis  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}}$  tatsächlich in den  $S$ -Schichten,  $0 < z < b/2$ , stattfindet. Dies ist die Konsequenz der zunehmenden Lokalisierung von Quasiteilchen in diesen Regionen. Der “subgap peak” in Abb. 2.14 nimmt wegen der endlichen Eindringtiefe der Quasiteilchen zur Mitte der  $S$ -Schichten hin exponentiell ab, und es bildet sich eine kleine Energielücke in  $S$ , siehe gestrichelte Kurve in Abb. 2.16. In den Abbildungen 2.17 und 2.18 wird deutlich, daß die Lokalisierung von Quasiteilchen mit  $E < \Delta$  in  $N$  aufgrund von Andreev-Reflexion weniger “scharf” ist als die Lokalisierung von Quasiteilchen mit  $E \gtrsim \Delta$  in  $S$  aufgrund der unterschiedlichen Fermienergien. Quasiteilchen, die an den Phasengrenzen Andreev-Reflexion erleiden, haben eine Eindringtiefe  $\hbar^2 k_{z\text{FS}}/m\sqrt{\Delta^2 - E^2} \sim \hbar^2 k_{\text{FS}}/m\Delta \sim \xi_0$  von der Größenordnung der Kohärenzlänge  $\xi_0$ , die Mehrzahl der normalreflektierten Quasiteilchen ist dagegen bereits nach atomaren Abständen  $\sim 1/k_{\text{FN},S}$  exponentiell in  $N$  gedämpft.

Diejenigen Zustände, die wegen  $k_\rho \rightarrow k_{\text{FN}}$  die  $S$ -Schichten kaum “spüren”, liefern für  $E \rightarrow 0$  in  $N$  einen nichtverschwindenden Beitrag in unseren Multilagen-Zustandsdichten, so daß diese die Energielücke, die von Hara, Ashida und Nagai [54] für Doppellagen berechnet wurde, nicht beinhalten.

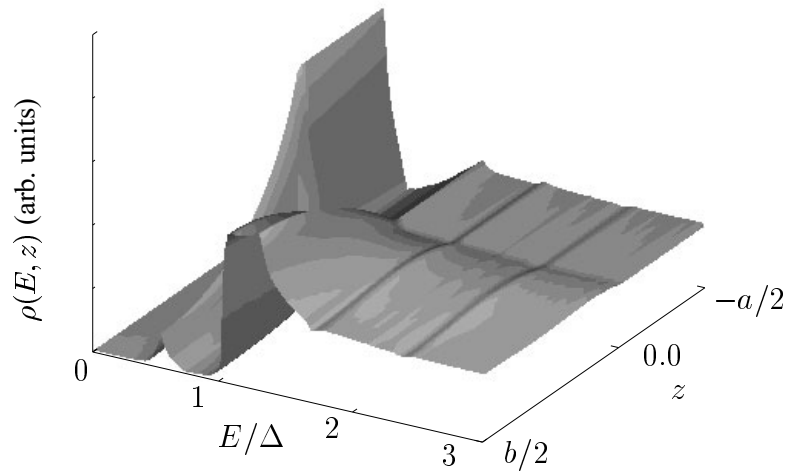


Abbildung 2.14: Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit  $\eta_{FS}/\epsilon_{FN} = 1$ , ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.9.

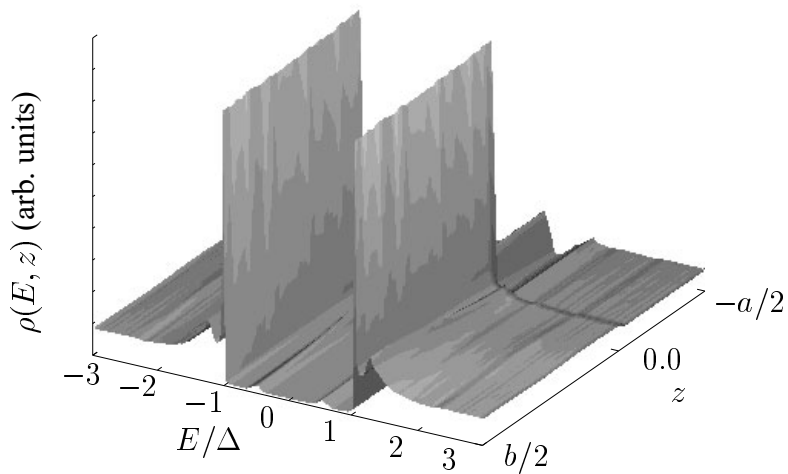


Abbildung 2.15: Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit  $\eta_{FS}/\epsilon_{FN} = 4/3$ , ansonsten gleiche Parameter wie in Abb. 2.14.

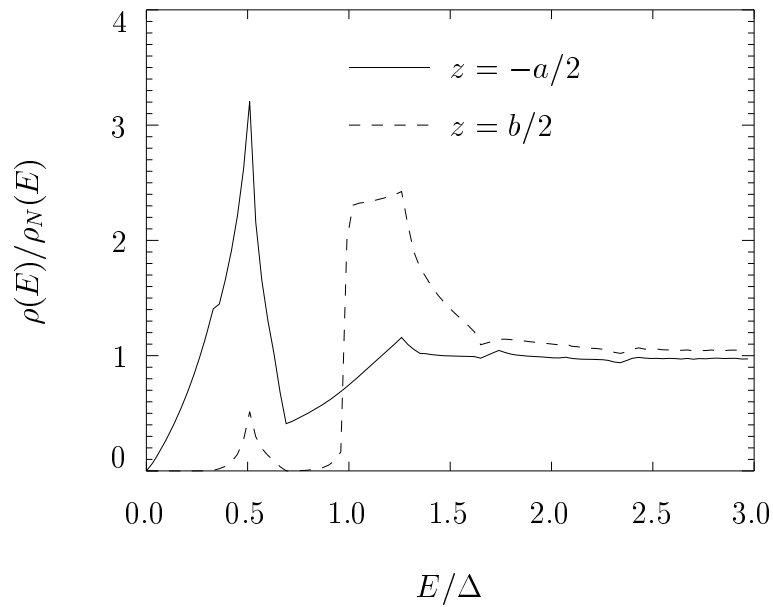


Abbildung 2.16: Schnitte der lokalen Zustandsdichte aus Abb. 2.14 bei  $z = -a/2$  und  $z = b/2$ ;  $\rho_N(E)$  ist die lokale Zustandsdichte für  $T > T_{CS}$ . Es besteht eine sehr gute qualitative Übereinstimmung mit der lokalen Zustandsdichte, die von Tanaka und Tsukada [6] aus einer Kombination der BdGG mit den Gorkov-Gleichungen berechnet wurde.

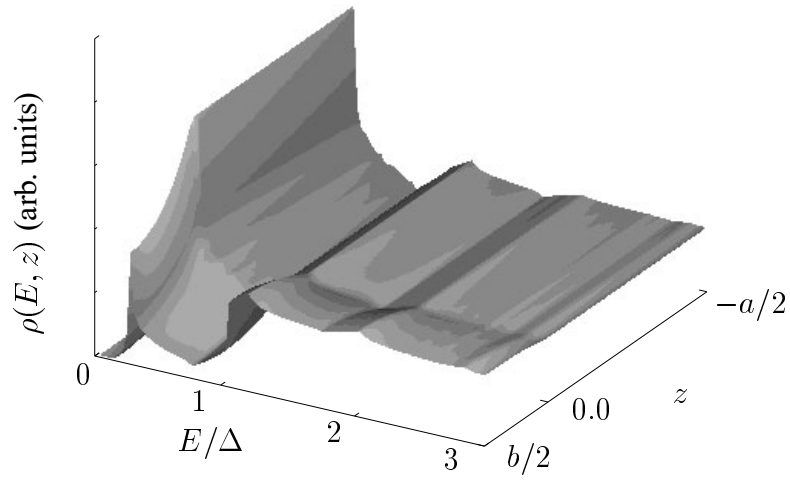


Abbildung 2.17: Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 3 \xi_0$  und  $\epsilon_{\text{FS}}/\epsilon_{\text{FN}} = 1$  [55].

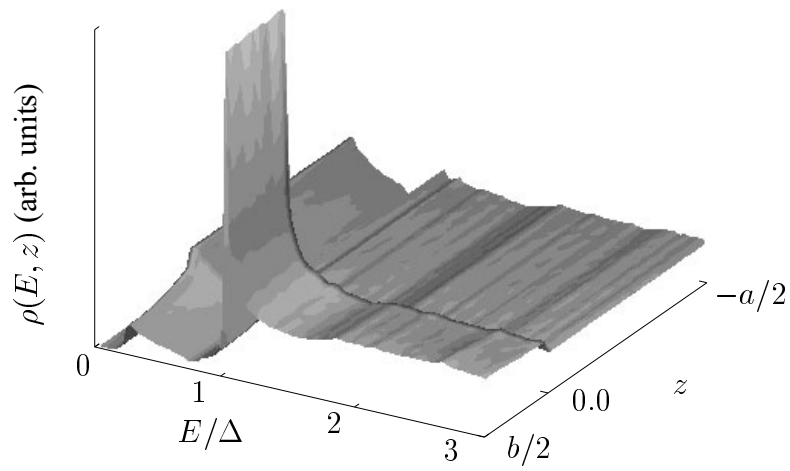


Abbildung 2.18: Lokale Zustandsdichte einer Multilage mit  $a = 8 \xi_0$ ,  $b = 3 \xi_0$  und  $\epsilon_{\text{FS}}/\epsilon_{\text{FN}} = 4/3$  [55].

### 2.2.4 Hochtemperatursupraleiter als $SN$ -Multilagen?

In den numerischen Berechnungen von Energiebändern und Zustandsdichten wurde bisher  $\Delta/\varepsilon_{\text{FS},N} < 2 \times 10^{-4} \ll 1$  angenommen. Mit Blick auf die HTSL wurden die Energiebänder und Zustandsdichten in den Abbildungen 2.19-2.22 für größere Verhältnisse  $\Delta/\varepsilon_{\text{FS}} = 10^{-2}$  und  $\Delta/\varepsilon_{\text{FN}} = 1$  berechnet [40]. In Abb. 2.19 ist die Bandstruktur des untersten Subbandes, d.h. die Abhängigkeit der Energie von  $k_{z\text{FN}}$  und von der Blochwellenzahl  $\kappa$ , gezeigt. Die Oszillationen der Energien als Funktion von  $k_{z\text{FN}}$  in Abb. 2.20 sind ähnlich zu denen, die man in Supraleiter-Halbleiter-Supraleiter ( $SHS$ ) Kontakten [39, 56] findet. Es gibt jedoch zwei grundlegende Unterschiede zwischen den Energiespektren von Multilagen mit  $\varepsilon_{\text{FS}} \gg \varepsilon_{\text{FN}}$  und  $SHS$ -Kontakten: Die zusätzliche  $\kappa$ -Abhängigkeit in den Multilagen, die durch die schattierten Flächen in Abb. 2.20 angedeutet ist, und die diskreten, endlichen Energien von den Quasiteilchen, die sich in  $SHS$ -Kontakten mit unterschiedlichen effektiven Massen parallel zu den Grenzflächen bewegen [39, 56]; diese Energien gehen in unseren Multilagen mit konstanten effektiven Massen gegen Null. Die lokalen und globalen Zustandsdichten in den Abbildungen 2.21 und 2.22 sind für  $E > \Delta$  praktisch diejenigen eines Bulk-Supraleiters. Dies kommt von der gegenüber der in den  $N$ -Schichten sehr viel höheren Elektronendichte in den  $S$ -Schichten und von der großen Fehlanpassung für alle außer den kleinsten  $k_{\rho}$ , die ein Eindringen der überwiegenden Mehrzahl von Elektronen von den  $S$ -Schichten in die  $N$ -Schichten verhindert. Es verbleibt eine fast konstante Zustandsdichte für  $E < \Delta$ , die in den  $N$ -Schichten lokalisiert ist, siehe Abb. 2.21, und die nahe  $E = 0$  verschwindet. Die Annäherung der Multilagen-Zustandsdichte an die BCS-Zustandsdichte für  $E > \Delta$  mit wachsendem Verhältnis  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}}$  ist auch in Abb. 2.9 sichtbar.

Die lokalen Zustandsdichten in den Abbildungen 2.14-2.18 und 2.21, die die detaillierteste Information über die elektronische Struktur beinhalten, können experimentell mit Hilfe der Tunnelleitfähigkeitsmikroskopie ("scanning tunneling microscopy", STM) gemessen werden. Tanaka *et al.* [24] finden in ihren STM-Experimenten an einkristallinen Bulk-Proben des HTSL  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  abwechselnd BCS-artige und metallartige Leitfähigkeitsspektren, siehe Abb. 2.23. Die lokale Zustandsdichte in Abb. 2.21, die abwechselnd in den  $S$ -Schichten BCS-artig und in den  $N$ -Schichten metallartig ist, legt die Vermutung nahe, daß die Ergebnisse unseres einfachen Multilagenmodells, das auf Fermiflüssigkeitstheorie und Gorkov-Paarwechselwirkung basiert [57, 58], auch einige Relevanz für das Verständnis der elektronischen Struktur von HTSL haben könnte, trotz der vielen offenen Fragen hinsichtlich des normalen und supraleitenden Zustands der HTSL wie Anwendbarkeit der Fermiflüssigkeitstheorie und Ursprung der Paarwechselwirkung.

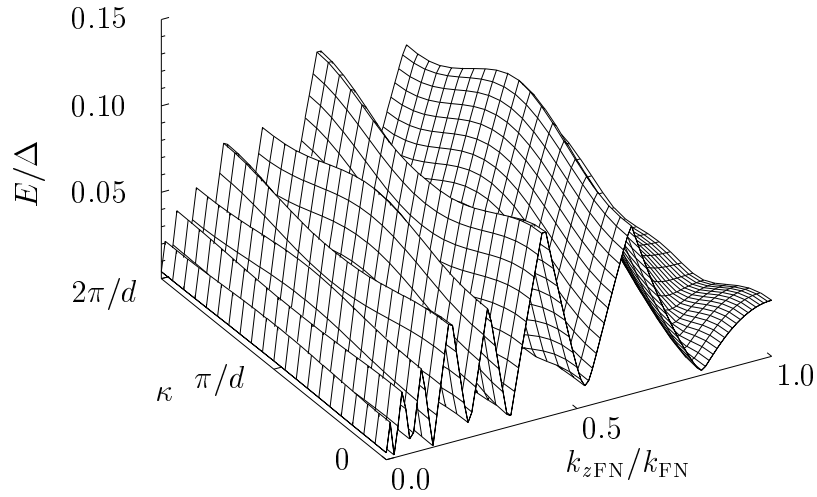


Abbildung 2.19: Dispersionsrelation  $E(k_{zF}, \kappa)$  des untersten Bandes einer Multilage mit  $a = 4 \xi_0$ ,  $b = 1 \xi_0$ ,  $\varepsilon_{FS} = 100 \varepsilon_{FN}$  und  $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{FS}$  bei  $T = 0 K$ .

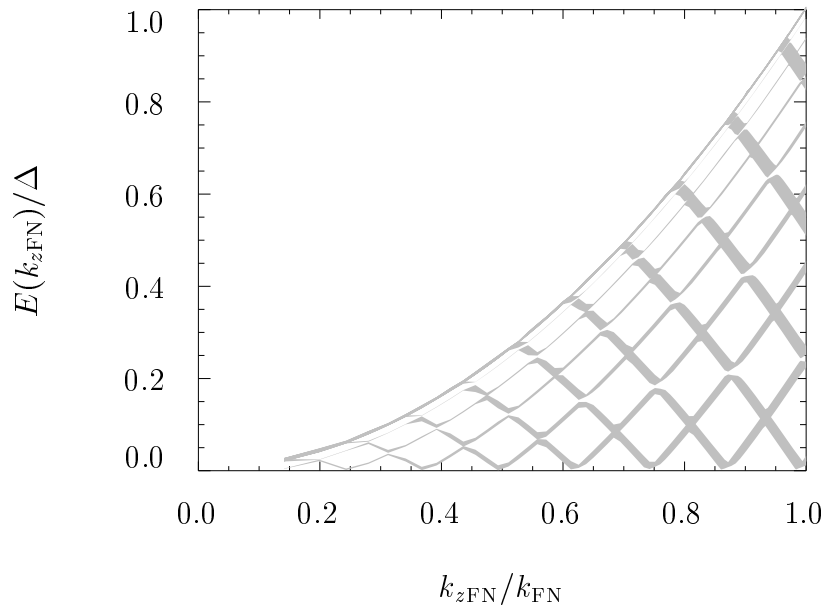


Abbildung 2.20: Energiebänder der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19 ( $k_{FN} = 0.1 k_{FS}$ ).

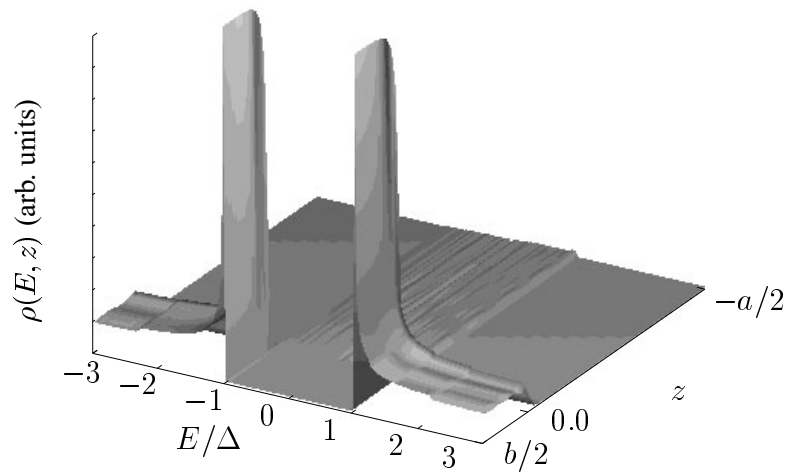


Abbildung 2.21: Lokale Zustandsdichte der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19. Die metallartige Zustandsdichte in den  $N$ -Schichten und die BCS-artige Zustandsdichte in den  $S$ -Schichten bleiben qualitativ bis  $\bar{\varphi}_S \lesssim 10 \Delta$  erhalten.

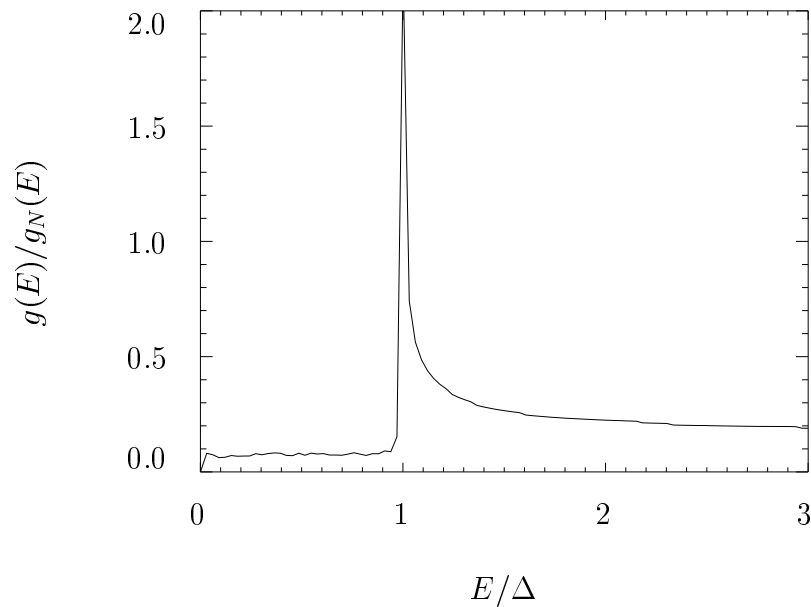


Abbildung 2.22: Globale Zustandsdichte der Multilage mit den Parametern aus Abb. 2.19.

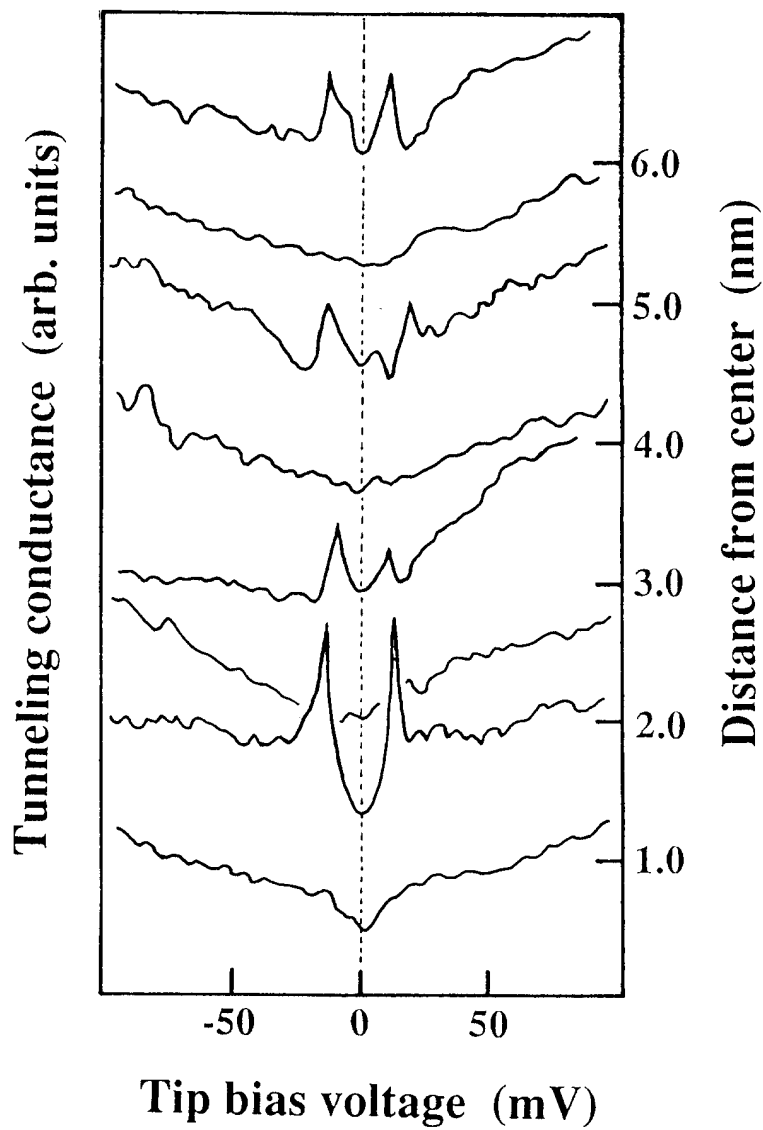


Fig. 9. Typical tunneling conductance spectra obtained every 0.8 nm.

Abbildung 2.23: Tunnelleitfähigkeitsspektren von einkristallinem Bulk  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  [24]. Die Spektren wurden alle 0.8 nm entlang der Oberfläche gemessen, die nach Interpretation der Autoren in diesem Experiment im Winkel von etwa  $43^\circ$  zur  $c$ -Achse verlief.

# 3

## Optische Absorption

---

### 3.1 Physikalisches System und Modellannahmen

Wie in den vorangegangenen Kapiteln wird ein System von abwechselnd normalleitenden und supraleitenden Schichten der Dicken  $a$  bzw.  $b$  betrachtet, siehe Abb. 3.1. Auf das System wird in  $x$ -Richtung das senkrecht zu den  $SN$ -Phasengrenzen polarisierte elektrische Wechselfeld

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t) \mathbf{e}_z \quad (3.1)$$

eingestrahlt. Die Amplitude des Feldes wird in den  $N$ -Schichten über die Systemgröße  $L_x$  als konstant angenommen. Wir betrachten hinreichend tiefe Temperaturen, für die das Eindringen des Feldes in die  $S$ -Schichten vernachlässigt werden kann, so daß Ladungsakkumulationen nur an den  $SN$ -Phasengrenzen auftreten. In der innerhalb der  $N$ -Schichten gültigen Eichung  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  und  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_y = 0$  kann dann das elektrische Feld allein durch das Vektorpotential

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{c\mathcal{E}_0}{\omega} \sin(\omega t) \sum_{s=-N/2}^{N/2} \Theta(-sd + a + z) \Theta(sd - z) \mathbf{e}_z \quad (3.2)$$

beschrieben werden. Hierbei zählt  $s$  die  $\mathcal{N}$  Doppelschichten der Dicke  $d$  durch, und die Sprungfunktion  $\Theta(x)$  ist definiert als

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0, \\ 0 & \text{für } x < 0. \end{cases} \quad (3.3)$$

Intraband (Drude)-Absorption, d.h. Beschleunigung der Elektronen mit anschließender Relaxation, wird nicht betrachtet.

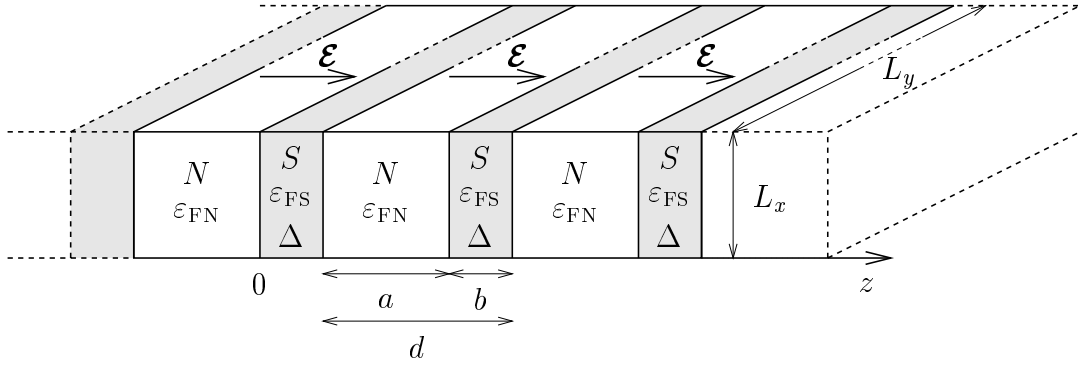


Abbildung 3.1: Multilage aus abwechselnd supraleitenden und normalleitenden Schichten mit elektrischem Wechselfeld  $\mathcal{E}(t)$ .

## 3.2 Methodische Grundlagen

Zur Berechnung der Energieabsorption durch die supraleitende Multilage aus Abb. 3.1 wird die zeitabhängige Störungstheorie [59] für die Bogoliubov–de Gennes Gleichungen (BdGG) verwendet.

### 3.2.1 Zeitabhängige Bogoliubov–de Gennes Gleichungen

Die zeitabhängigen BdGG für die zweikomponentige QT–Wellenfunktion in Spinor–Notation

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}, t) \\ v(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

lauten [60]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \quad (3.5)$$

Der Operator  $\hat{H}(\mathbf{r}, t)$  ist durch die  $2 \times 2$ –Matrix

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} H(\mathbf{r}, t) & \Delta(\mathbf{r}, t) \\ \Delta^*(\mathbf{r}, t) & -H^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

gegeben. In Kapitel 1 und Abschnitt 2.1 wurde für die hier betrachteten Multilagengezeigt, daß das Paarpotential  $\Delta(\mathbf{r}, t) = \Delta(z)$  näherungsweise durch einen stufenförmigen Verlauf,

$$\Delta(z) = \begin{cases} 0 & \text{in } N, \\ \Delta & \text{in } S, \end{cases} \quad (3.7)$$

beschrieben werden kann [40]. In der verwendeten Eichung kann es außerdem reell gewählt werden. In dem Einteilchen-Hamiltonian

$$H(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + U(\mathbf{r}) - \mu \quad (3.8)$$

beschreibt das Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  aus Gl. (3.2) das externe Wechselfeld. Ansonsten werden die gleichen Annahmen wie in Kapitel 2 gemacht: Das Skalarpotential  $U(\mathbf{r}, t)$  definiert zusammen mit dem chemischen Potential  $\mu$  die im allgemeinen verschiedenen Fermienergien  $\varepsilon_{\text{FS}}$  und  $\varepsilon_{\text{FN}}$  in den supraleitenden und normalleitenden Schichten:

$$\mu - U(\mathbf{r}) \equiv \varepsilon_{\text{F}}(z) \equiv \begin{cases} \varepsilon_{\text{FN}} = \hbar^2 k_{\text{FN}}^2 / 2m & \text{in } N, \\ \varepsilon_{\text{FS}} = \hbar^2 k_{\text{FS}}^2 / 2m & \text{in } S. \end{cases} \quad (3.9)$$

Die Oberflächenpotentiale des Systems in  $x$ - und  $y$ -Richtung werden durch periodische Randbedingungen für die QT-Wellenfunktionen in  $x = 0, L_x$  und  $y = 0, L_y$  berücksichtigt. Es werden isotrope effektive Massen angenommen. Mögliche Abweichungen von der freien Elektronenmasse  $m$  werden in die verschiedenen Fermienergien hineingenommen. Streuung an Störstellen wird vernachlässigt.

Im stationären Gleichgewicht besteht der vollständige Satz  $\{N\} = \{n, \bar{n}\}$  von Lösungen der BdGG aus den Lösungen mit positiver Energie  $E_n$ ,

$$\hat{\psi}_n^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \hat{\psi}_n^{(0)}(\mathbf{r}) e^{-iE_n t / \hbar} = \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}) \\ v_n(\mathbf{r}) \end{pmatrix} e^{-iE_n t / \hbar}, \quad (3.10)$$

und aus denen mit negativer Energie  $E_{\bar{n}} = -E_n$ ,

$$\hat{\psi}_{\bar{n}}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \hat{\psi}_{\bar{n}}^{(0)}(\mathbf{r}) e^{+iE_n t / \hbar}, \quad (3.11)$$

wobei [57]

$$\hat{\psi}_{\bar{n}}^{(0)}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_{\bar{n}}(\mathbf{r}) \\ v_{\bar{n}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_n^*(\mathbf{r}) \\ -u_n^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Die Lösungen der BdGG mit negativer Energie beschreiben Zustände der Grundzustandskonfiguration, die bei  $T = 0 \text{ K}$  mit Sicherheit besetzt sind. Die Bandstruktur des Quasiteilchenspektrums der Multilagengezeigt, die in Abschnitt 2.2 diskutiert wurden, spiegelt sich

somit in der Bandstruktur des Grundzustands wider. Die Vollständigkeitsrelation für die Lösungen der BdGG ist durch [49, 59]

$$\sum_L \hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_L^{(0)\dagger}(\mathbf{r}', t) = \hat{1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.13)$$

gegeben, wobei sich die Summation  $L = l, \bar{l}$  über die Lösungen sowohl positiver als auch negativer Energie erstreckt und  $\hat{1}$  die  $2 \times 2$ -Einheitsmatrix bezeichnet. Die Orthonormalitätsrelation lautet

$$\int \hat{\psi}_L^{(0)\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_M^{(0)}(\mathbf{r}, t) d^3 r = \delta_{L,M}. \quad (3.14)$$

### 3.2.2 Zeitabhängige Störungstheorie

Formal geht man bei der Behandlung eines durch externe zeitabhängige Felder gestörten supraleitenden Systems in der gleichen Weise vor wie in der zeitabhängigen Störungstheorie für die Schrödingergleichung [59, 61, 62]. Wir schreiben zunächst den Hamilton-Operator (3.6) in der Eichung mit reellem Paarpotential  $\Delta$  in der Form

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(z, t) = \hat{H}^{(0)}(z) + \hat{H}^{(1)}(z, t), \quad (3.15)$$

wobei

$$\hat{H}^{(0)}(z) = \begin{pmatrix} h^{(0)}(z) & \Delta(z) \\ \Delta(z) & -h^{(0)*}(z) \end{pmatrix}, \quad (3.16a)$$

$$h^{(0)}(z) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \varepsilon_F(z) \quad (3.16b)$$

das ungestörte System ( $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$ ) beschreibt, und

$$\hat{H}^{(1)}(z, t) = \begin{pmatrix} h^{(1)}(z, t) & 0 \\ 0 & -h^{(1)*}(z, t) \end{pmatrix}, \quad (3.17a)$$

$$h^{(1)}(z, t) = -\frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) \quad (3.17b)$$

der zeitabhängige Störoperator in erster Ordnung ist. Terme der Größenordnung  $\sim \mathbf{A}^2$  wurden hier vernachlässigt. Das Vektorpotential aus Gl. (3.2) führt zu dem Störoperator

$$\hat{H}^{(1)}(z, t) \equiv g(t) h(z) \hat{1} \quad (3.18)$$

mit

$$g(t) \equiv \frac{\mathcal{E}_0}{\omega} \sin(\omega t) \quad (3.19)$$

und

$$h(z) \equiv -i \frac{\hbar e}{2m} \sum_{s=-N/2}^{N/2} \left[ 2\Theta(-sd + a + z)\Theta(sd - z) \frac{\partial}{\partial z} + \delta(-sd + a + z) - \delta(sd - z) \right]. \quad (3.20)$$

Die zweikomponentigen QT-Wellenfunktionen  $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$  des gestörten Systems können nach dem vollständigen Satz von Wellenfunktionen  $\hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r}, t)$  ( $L = l, \bar{l}$ ) des ungestörten Systems entwickelt werden:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_L \hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r}, t) a_L(t) \quad (3.21)$$

mit

$$a_L(t) \equiv \int \hat{\psi}_L^{(0)\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) d^3 r. \quad (3.22)$$

Setzt man Gl. (3.21) in die BdGG (3.5) ein, so erhält man unter Ausnutzung der Gl. (3.10), der Vollständigkeitsrelation (3.13) und der Orthonormalitätsrelation (3.14) die Bestimmungsgleichung für die Entwicklungskoeffizienten  $a_L(t)$ ,

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_M(t) = \sum_L a_L(t) e^{i\omega_{ML}t} H_{ML}^{(1)}(t), \quad (3.23)$$

mit

$$H_{ML}^{(1)}(t) \equiv \int \hat{\psi}_M^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) \hat{H}^{(1)}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r}) d^3 r \quad (3.24)$$

und

$$\omega_{ML} \equiv (E_M - E_L)/\hbar. \quad (3.25)$$

Das System befinde sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Anfangszustand  $\hat{\psi}_J^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ . Mit Gl. (3.21) folgt daraus  $a_L(0) = \delta_{L,J}$ . Bei einer kleinen Störung kann auch für  $t > 0$  in nullter Näherung  $a_L^{(0)}(t) = \delta_{L,J}$  in Gl. (3.23) angenommen werden. Nach Integration der Differentialgleichung (3.23) erhält man für die Übergangsamplitude vom Anfangszustand  $J$  in den Endzustand  $F$  in erster Ordnung

$$a_F^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{FJ}t'} H_{FJ}^{(1)}(t') dt'. \quad (3.26)$$

Aus der Normierungsbedingung

$$\int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) d^3 r = 1 \quad (3.27)$$

folgt mit Gl. (3.21)

$$\sum_L |a_L(t)|^2 = 1. \quad (3.28)$$

Also ist  $|a_L(t)|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das System zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $L$  befindet. Unter der Voraussetzung, daß sich das System zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Zustand  $J$  befand, gibt  $|a_F(t)|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß das System im Zeitraum von  $t = 0$  bis  $t > 0$  unter dem Einfluß der äußeren Störung vom Anfangszustand  $J$  in den Endzustand  $F$  übergegangen ist. Für diese Übergangswahrscheinlichkeit gilt nach Gl. (3.26) in erster störungstheoretischer Ordnung [59, 62]

$$T_{FJ}(t) = |a_F(t)|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{FJ}t'} H_{FJ}^{(1)}(t') dt' \right|^2. \quad (3.29)$$

## 3.3 Optische Übergänge zwischen Blochzuständen

### 3.3.1 Quasiteilchen (QT)–Zustände des ungestörten Systems

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten in erster Ordnung Störungstheorie nach Gl. (3.29) mit den Matrixelementen (3.24) werden die QT–Wellenfunktionen  $\hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r})$  des ungestörten Systems benötigt. Jeder Zustand  $L$  ist dabei gekennzeichnet durch die Energie  $E$  und den zweikomponentigen Wellenvektor  $\mathbf{k}_\rho = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ . In der stationären QT–Wellenfunktion

$$\hat{\psi}_L^{(0)}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_L^{(0)}(z) e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}} \quad (3.30)$$

beschreibt  $\mathbf{k}_\rho$  die Propagation parallel zu den  $SN$ –Phasengrenzen ( $\boldsymbol{\rho} = x \mathbf{e}_x + y \mathbf{e}_y$ ).

In den betrachteten Multilagenn handelt es sich bei den  $z$ –abhängigen Anteilen der QT–Wellenfunktionen,  $\hat{\psi}_L^{(0)}(z)$ , um Blochwellen mit der Blochwellenzahl  $\kappa$ . Zur Charakterisierung der Zustände ist es zweckmäßig, anstatt der Energie  $E$  den Index des Blochbandes  $\gamma$  und die Blochwellenzahl  $\kappa$  zu verwenden. Im folgenden wird ein Anfangszustand positiver Energie,  $J = j$ , durch

$$j \equiv \{(\gamma, \kappa), \mathbf{k}_\rho\} \quad (3.31)$$

und ein Endzustand positiver Energie,  $F = f$ , durch

$$f \equiv \{(\gamma', \kappa'), \mathbf{k}'_\rho\} \quad (3.32)$$

gekennzeichnet. Für Zustände negativer Energie, gekennzeichnet durch  $J = \bar{j}$  oder  $F = \bar{f}$ , trägt der Bandindex  $\gamma$  einen Strich ( $\bar{\gamma}$ ).

Es ist wichtig, den Unterschied in den Periodizitätsbedingungen für Zustände positiver und negativer Energie zu beachten: Für einen Blochzustand positiver Energie,  $L = l$ , gilt

$$\hat{\psi}_l^{(0)}(z + d) = e^{i\kappa d} \hat{\psi}_l^{(0)}(z). \quad (3.33)$$

Dagegen liefern die Gln. (3.12) und (3.33) für einen Blochzustand negativer Energie,  $L = \bar{l}$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{\bar{l}}^{(0)}(z + d) &= \begin{pmatrix} u_{\bar{l}}(z + d) \\ v_{\bar{l}}(z + d) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_l^*(z + d) \\ -u_l^*(z + d) \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\kappa d} \begin{pmatrix} v_l^*(z) \\ -u_l^*(z) \end{pmatrix} = e^{-i\kappa d} \hat{\psi}_{\bar{l}}^{(0)}(z). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Für eine kompaktere Schreibweise definieren wir allgemein für  $L = l, \bar{l}$

$$\hat{\psi}_L^{(0)}(z+d) = e^{\text{sgn}(E_L)ikd} \hat{\psi}_L^{(0)}(z) \equiv e^{i\bar{k}d} \hat{\psi}_L^{(0)}(z) \quad (3.35)$$

mit der Vorzeichenfunktion  $\text{sgn}$ .

Die QT–Wellenfunktionen des ungestörten Systems, d.h. der Multilage aus Abb. 3.1 ohne äußeres Feld  $\mathcal{E}$ , wurden im 2. Kapitel bereits bestimmt. Ihre  $z$ –Abhängigkeiten sind in Anhang C für den allgemeinen Fall verschiedener Fermienergien in  $S$  und  $N$  und in Anhang D in Andreev–Näherung für konventionelle Supraleiter mit  $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$  angegeben. Da Anfangs– und Endzustände zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten unterschieden werden müssen, werden die Energien und QT–Wellenfunktionen hier, anders als in den Anhängen, mit den Quantenzahlen indiziert.

### 3.3.2 Übergangswahrscheinlichkeit

Die Übergangswahrscheinlichkeit (3.29) läßt sich mit dem Störoperator (3.18) und den Matrixelementen (3.24) in der folgenden Form schreiben:

$$T_{FJ}(t) \equiv G(t) G_r, \quad (3.36)$$

$$G(t) \equiv \left| \int_0^t e^{i\omega_{FJ}t'} g(t') dt' \right|^2, \quad (3.37)$$

$$G_r \equiv \frac{1}{\hbar^2} \left| \int \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(\mathbf{r}) h(z) \hat{1} \hat{\psi}_J^{(0)}(\mathbf{r}) d^3r \right|^2. \quad (3.38)$$

Mit dem zeitabhängigen Anteil des Störoperators (3.19) findet man für  $G(t)$ , Gl. (3.37),

$$G(t) = \frac{\mathcal{E}_0^2}{\omega^2} \left\{ \left( \frac{\sin[(\omega_{FJ} - \omega)t/2]}{\omega_{FJ} - \omega} \right)^2 + \left( \frac{\sin[(\omega_{FJ} + \omega)t/2]}{\omega_{FJ} + \omega} \right)^2 - \frac{\sin[(\omega_{FJ} - \omega)t/2] \sin[(\omega_{FJ} + \omega)t/2]}{\omega_{FJ} - \omega \omega_{FJ} + \omega} 2 \cos(\omega t) \right\}. \quad (3.39)$$

Der Term proportional  $\cos(\omega t)$  in Gl. (3.39) hebt sich bei der Mittelung über mehrere Perioden von  $\mathcal{E}(t)$  weg. Für genügend große  $t$ , (für die die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit nicht mehr von der Zeit abhängt), gilt außerdem

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{\sin[(\omega_{FJ} \pm \omega)t/2]}{\omega_{FJ} \pm \omega} \right)^2 = \frac{\pi t}{2} \delta(\omega_{FJ} \pm \omega), \quad (3.40)$$

und wir finden mit Gl. (3.25) für den zeitabhängigen Teil der Übergangswahrscheinlichkeit

$$G(t) = \frac{\mathcal{E}_0^2}{\omega^2} \frac{\pi t \hbar}{2} [\delta(E_F - E_J - \hbar\omega) + \delta(E_F - E_J + \hbar\omega)]. \quad (3.41)$$

In den  $\delta$ -Funktionen spiegelt sich die Energieerhaltung bei der Absorption bzw. induzierten Emission eines Energiequants  $\hbar\omega$  wider. Da die induzierte Emission bei der Berechnung der absorbierten Leistung keine Rolle spielt, wird der zweite Term in Gl. (3.41) im folgenden weggelassen.

Für den zeitunabhängigen Anteil der Übergangswahrscheinlichkeit (3.38) findet man mit Gl. (3.30)

$$\begin{aligned} G_r &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int e^{-i\mathbf{k}'_e \cdot \mathbf{e}} e^{i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{e}} d^2 \varrho \right|^2 \left| \int_{-\mathcal{L}/2}^{\mathcal{L}/2} \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_J^{(0)}(z) dz \right|^2 \\ &= \frac{\mathcal{A}^2}{\hbar^2} \delta_{\mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_e} \left| \int_{-\mathcal{L}/2}^{\mathcal{L}/2} \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_J^{(0)}(z) dz \right|^2, \end{aligned} \quad (3.42)$$

wobei  $\mathcal{A}$  die Kontaktfläche zwischen den Schichten bezeichnet. Das Integral über die gesamte Länge  $\mathcal{L} = \mathcal{N}d$  des Systems in  $z$ -Richtung kann unter Vernachlässigung von Randeffekten, d.h. für  $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ , mit  $h(z+s'd) = h(z)$  (siehe Gl. (3.20)) und mit Gl. (3.35) in ein Integral von  $z = -a$  bis  $z = b$  und eine Summe über alle Perioden  $\mathcal{N}$  umgewandelt werden:

$$G_r = \frac{\mathcal{A}^2}{\hbar^2} \delta_{\mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_e} \left| \sum_{m=-\mathcal{N}/2}^{\mathcal{N}/2} e^{im(\tilde{\kappa}-\tilde{\kappa}')d} \int_{-a}^b \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_J^{(0)}(z) dz \right|^2. \quad (3.43)$$

Da die Blochwellenzahlen  $\tilde{\kappa}$  auf die erste Brillouin-Zone beschränkt sind, ergibt die Summe über  $m$  gerade  $\mathcal{N} \delta_{\tilde{\kappa}', \tilde{\kappa}}$ , und man erhält mit den Gln. (3.20) und (3.41) für die Übergangswahrscheinlichkeit (3.36)

$$T_{FJ}(t) = \frac{\mathcal{E}_0^2 \pi t \hbar}{2\omega^2} \delta(E_F - E_J - \hbar\omega) \delta_{\mathbf{k}'_e, \mathbf{k}_e} \delta_{\tilde{\kappa}', \tilde{\kappa}} \left( \frac{e}{2m} \right)^2 M_{FJ} \quad (3.44)$$

mit

$$\begin{aligned} M_{FJ} &\equiv (\mathcal{A}\mathcal{N})^2 \left| \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(-a) \hat{\psi}_J^{(0)}(-a) - \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(0) \hat{\psi}_J^{(0)}(0) \right. \\ &\quad \left. + 2 \int_{-a}^0 \hat{\psi}_F^{(0)\dagger}(z) \frac{d}{dz} \hat{\psi}_J^{(0)}(z) dz \right|^2. \end{aligned} \quad (3.45)$$

### 3.3.3 Absorbierte Leistung

Um die vom gesamten System absorbierte Leistung  $P(\omega)$  zu erhalten, muß man aus Gl. (3.44) die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit,  $\frac{d}{dt} T_{FJ}(t)$ , berechnen, mit dem Energiequant  $\hbar\omega$  multiplizieren und über alle besetzten Anfangszustände  $J$  und alle unbesetzten Endzustände  $F$  summieren:

$$P(\omega) = \hbar\omega \frac{d}{dt} \sum_J f(E_J) \sum_F T_{FJ}(t) [1 - f(E_F)]. \quad (3.46)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten sind bei gegebener Temperatur  $T$  durch die Fermi-Verteilungsfunktion

$$f(E_J) = \frac{1}{e^{E_J/k_B T} + 1} \quad (3.47)$$

und  $1 - f(E_F)$  gegeben. Setzt man  $T_{FJ}$ , Gl. (3.44), in Gl. (3.46) ein und spezifiziert die Summen über  $J$  und  $F$  als Summen über  $\kappa, \mathbf{k}_\rho, \Gamma = (\gamma, \bar{\gamma})$  und  $\kappa', \mathbf{k}'_\rho, \Gamma'$ , so erhält man

$$P(\omega) = \left( \frac{\mathcal{E}_0 \hbar e}{2m} \right)^2 \frac{\pi}{2\omega} \sum_{\Gamma} \sum_{\mathbf{k}_\rho} \sum_{\kappa} f(E_J) \sum_{\Gamma'} \sum_{\mathbf{k}'_\rho} \sum_{\kappa'} [1 - f(E_F)] \times \quad (3.48)$$

$$\times \delta_{\mathbf{k}'_\rho, \mathbf{k}_\rho} \delta_{\bar{\kappa}', \bar{\kappa}} M_{FJ} \delta(E_{\Gamma', \bar{\kappa}'}(k'_\rho) - E_{\Gamma, \bar{\kappa}}(k_\rho) - \hbar\omega).$$

Die Summen über  $\mathbf{k}'_\rho$  und  $\kappa'$  können direkt ausgeführt werden, wobei die unterschiedlichen Periodizitätsbedingungen für Zustände positiver und negativer Energie, Gln. (3.33) und (3.34), wegen  $E_{\Gamma, \kappa}(k_\rho) = E_{\Gamma, -\kappa}(k_\rho)$  nur in den Funktionen  $M_{FJ}$  beachtet werden müssen. Die verbleibende Summe über den quasikontinuierlichen Impuls  $k_\rho$  parallel zu den  $SN$ -Phasengrenzen wird gemäß  $\sum_{\mathbf{k}_\rho} \rightarrow \frac{\mathcal{A}}{\pi} \int dk_\rho k_\rho$  in ein Integral umgewandelt. Man erhält

$$P(\omega) = \left( \frac{\mathcal{E}_0 \hbar e}{2m} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \sum_{\Gamma, \Gamma', \kappa} \int dk_\rho k_\rho [1 - f(E_{\Gamma', \kappa}(k_\rho))] \times \quad (3.49)$$

$$\times f(E_{\Gamma, \kappa}(k_\rho)) M_{FJ} \delta(E_{\Gamma', \kappa}(k_\rho) - E_{\Gamma, \kappa}(k_\rho) - \hbar\omega).$$

### Interband-Zustandsdichte

Im Unterschied zu Kapitel 2, wo die Blochwellenzahl  $\kappa$  quasikontinuierlich angenommen wurde, beschränken wir uns bei der Berechnung der absorbierten Mikrowellenleistung aus numerischen Gründen auf eine endliche Zahl  $\mathcal{N}$  von Perioden, so daß  $\kappa$  nur die diskreten Werte  $\kappa = n\pi/\mathcal{L}$ ,  $n = -\mathcal{N}, \dots, \mathcal{N}$ , annehmen kann. Die Anzahl der Perioden wird dabei so groß gewählt, daß die globalen Zustandsdichten, die mit quasikontinuierlichem bzw. mit diskretem  $\kappa$  berechnet wurden, näherungsweise übereinstimmen, siehe Abb. 3.2. Da die Energieeigenwerte dann nur Funktionen einer quasikontinuierlichen Variablen,  $k_\rho$ , sind, kann das Integral über  $k_\rho$  in Gl. (3.49) wegen der  $\delta$ -Funktion ausgeführt werden und liefert<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Für quasikontinuierliche  $\kappa$  sind die Energieeigenwerte Funktionen der beiden quasikontinuierlichen Variablen  $k_\rho$  und  $\kappa$ . Die zwei Integrale über diese Variablen würden zusammen mit der  $\delta$ -Funktion ein Linienintegral im  $\kappa$ - $k_\rho$ -Raum ergeben. Der Integrationsweg entlang  $E_{\Gamma'}(\kappa, k_\rho) - E_{\Gamma}(\kappa, k_\rho) = \hbar\omega$  ließe sich mit vertretbarem numerischen Aufwand nicht bestimmen. Für diskrete  $\kappa$  hingegen reduziert sich das Linienintegral in eine Doppelsumme über  $\kappa$  und  $k_\rho^\alpha$ . Dabei ist  $k_\rho^\alpha$  durch Gl. (3.51) definiert.

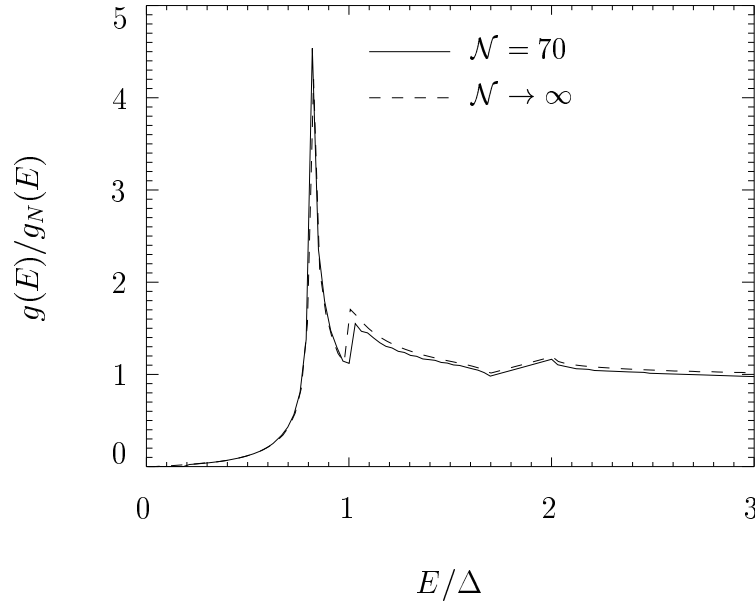


Abbildung 3.2: Vergleich der globalen Zustandsdichte eines Gesamtsystems mit  $\mathcal{N} = 70$  Perioden mit der eines Systems mit  $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ ;  $a = 1.0 \xi_0$ ,  $b = 5.0 \xi_0$ ,  $T \ll T_C$ ,  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  und  $\varepsilon_{FS} \gg \Delta$ .

$$\begin{aligned}
 P(\omega) &= \left( \frac{\mathcal{E}_0 \hbar e}{2m} \right)^2 \frac{1}{2} \frac{\mathcal{A}}{\omega} \sum_{\Gamma, \Gamma', \kappa} \sum_{k_\varrho^\alpha} \left[ 1 - f(E_{\Gamma', \kappa}(k_\varrho^\alpha)) \right] \times \\
 &\times f(E_{\Gamma, \kappa}(k_\varrho^\alpha)) M_{FJ} \frac{k_\varrho^\alpha}{\left| \frac{d(E_{\Gamma', \kappa}(k_\varrho) - E_{\Gamma, \kappa}(k_\varrho))}{dk_\varrho} \right|_{k_\varrho^\alpha}}, \quad (3.50)
 \end{aligned}$$

wobei  $\sum_{k_\varrho^\alpha}$  alle Beiträge von Übergängen zwischen Zuständen mit Wellenzahlen  $k_\varrho^\alpha$  aufsummiert, für die die Bedingung des Übergangs zwischen Blochzuständen in den mit  $\Gamma'$  und  $\Gamma$  induzierten Bändern

$$E_{\Gamma', \kappa}(k_\varrho^\alpha) - E_{\Gamma, \kappa}(k_\varrho^\alpha) = \hbar\omega \quad (3.51)$$

erfüllt ist. Bei der Behandlung von optischen Interband-Übergängen in normalleitenden Metallen oder Halbleitern spricht man im Zusammenhang mit der Ableitung der Energiedifferenzen nach den Wellenvektoren von “joint” [63] oder “interband density of states” [64].

## Mögliche Übergänge

Zur weiteren Auswertung von Gl. (3.50) ist es zweckmäßig, die Summen über alle Blochbänder  $\Gamma, \Gamma'$  in Summen über Bänder zu positiven ( $\gamma, \gamma'$ ) und negativen ( $\bar{\gamma}, \bar{\gamma}'$ ) Energien aufzuspalten. Negative Energien und die dazugehörigen QT-Wellenfunktionen werden mit  $E_{\bar{\gamma}, \kappa}(k_\rho) = -E_{\gamma, \kappa}(k_\rho)$  und Gl. (3.12) formal durch positive Energien und Wellenfunktionen ersetzt. Die absorbierte Leistung

$$\begin{aligned}
 P(\omega) &= \left( \frac{\mathcal{E}_0 \hbar e}{2m} \right)^2 \frac{1}{2} \frac{\mathcal{A}}{\omega} \sum_{\gamma, \gamma', \kappa} & (3.52) \\
 &\times \left\{ \sum_{k_\rho^\alpha} f(-E_{\gamma, \kappa}(k_\rho^\alpha)) \left[ 1 - f(E_{\gamma', \kappa}(k_\rho^\alpha)) \right] M_{f\bar{j}} \frac{k_\rho^\alpha}{\left| \frac{d(E_{\gamma', \kappa}(k_\rho) + E_{\gamma, \kappa}(k_\rho))}{dk_\rho} \right|_{k_\rho^\alpha}} \right. \\
 &+ \sum_{k_\rho^\alpha} f(-E_{\gamma, \kappa}(k_\rho^\alpha)) \left[ 1 - f(-E_{\bar{\gamma}', \kappa}(k_\rho^\alpha)) \right] M_{\bar{f}j} \frac{k_\rho^\alpha}{\left| \frac{d(-E_{\bar{\gamma}', \kappa}(k_\rho) + E_{\gamma, \kappa}(k_\rho))}{dk_\rho} \right|_{k_\rho^\alpha}} \\
 &+ \sum_{k_\rho^\alpha} f(E_{\gamma, \kappa}(k_\rho^\alpha)) \left[ 1 - f(E_{\gamma', \kappa}(k_\rho^\alpha)) \right] M_{fj} \frac{k_\rho^\alpha}{\left| \frac{d(E_{\gamma', \kappa}(k_\rho) - E_{\gamma, \kappa}(k_\rho))}{dk_\rho} \right|_{k_\rho^\alpha}} \\
 &+ \left. \sum_{k_\rho^\alpha} f(E_{\gamma, \kappa}(k_\rho^\alpha)) \left[ 1 - f(-E_{\bar{\gamma}', \kappa}(k_\rho^\alpha)) \right] M_{\bar{f}j} \frac{k_\rho^\alpha}{\left| \frac{d(-E_{\bar{\gamma}', \kappa}(k_\rho) - E_{\gamma, \kappa}(k_\rho))}{dk_\rho} \right|_{k_\rho^\alpha}} \right\}
 \end{aligned}$$

enthält dann nur noch die Summen  $\gamma, \gamma'$  über die Blochbänder zu positiven Energien. Für  $T \rightarrow 0$  liefert aufgrund der Fermifunktionen nur der erste Term in Gl. (3.52), der formal Übergänge von besetzten Zuständen negativer Energie in unbesetzte Zustände positiver Energie beschreibt, einen Beitrag zur absorbierten Leistung. Physikalisch handelt es sich dabei um Anregungen aus dem Grundzustand, siehe Abb. 3.10. Für  $T > 0$  sind auch Übergänge von besetzten Zuständen negativer Energie in thermisch entleerte Zustände negativer Energie (zweiter Term) und von thermisch angeregten Zuständen positiver Energie in unbesetzte Zustände positiver Energie (dritter Term) möglich. Da induzierte Emission nicht berücksichtigt wird, trägt der vierte Term in Gl. (3.52) nicht zur absorbierten Leistung bei.

## Konventionelle Supraleiter, $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$

Für  $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}} \equiv \varepsilon_{\text{F}}$  wird der QT-Impuls, der für die meisten QT von der Größenordnung des Fermiimpulses ist, in sehr guter Näherung durch räumliche Variationen des kleinen Ordnungsparameters  $\Delta \ll \varepsilon_{\text{F}}$  nicht geändert. Die beiden verschiedenen

Linearkombinationen von einer elektron- und einer lochartigen Lösung mit annähernd gleicher Impulskomponente in  $z$ -Richtung,  $\hat{\psi}_L^+(z)$ , bzw. entgegen der  $z$ -Richtung,  $\hat{\psi}_L^-(z)$ , sind zueinander entartet. Die entsprechenden Energieeigenwertgleichungen und Eigenfunktionen sind in Anhang D angegeben. Das Matrixelement  $M_{f\bar{j}}$ , das für  $T \rightarrow 0$  den Hauptbeitrag zur absorbierten Leistung liefert, ist gegeben durch

$$M_{f\bar{j}} = \left( \frac{2m\mathcal{A}\mathcal{N}}{\hbar e} \right)^2 \left\{ \left| \int_{-a}^0 dz \hat{\psi}_f^{+\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_j^+(z) \right|^2 + \left| \int_{-a}^0 dz \hat{\psi}_f^{+\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_j^-(z) \right|^2 + \left| \int_{-a}^0 dz \hat{\psi}_f^{-\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_j^+(z) \right|^2 + \left| \int_{-a}^0 dz \hat{\psi}_f^{-\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_j^-(z) \right|^2 \right\}. \quad (3.53)$$

Die Anfangszustände negativer Energie werden gemäß Gl. (3.12) durch Lösungen positiver Energie, siehe Gl. (D.4), ausgedrückt:

$$\hat{\psi}_j^+(z) \xrightarrow{E_j \rightarrow -E_j} D_4^{j*} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_{zF}z + iq_j z} - D_3^{j*} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ik_{zF}z - iq_j z}, \quad (3.54a)$$

$$\hat{\psi}_j^-(z) \xrightarrow{E_j \rightarrow -E_j} D_8^{j*} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_{zF}z - iq_j z} - D_7^{j*} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_{zF}z + iq_j z} \quad (3.54b)$$

mit

$$q_j \equiv \frac{mE_j}{\hbar^2 k_{zF}}. \quad (3.55)$$

Beachte, daß wegen der Periodizitätsbedingung (3.34) bei der Berechnung der Koeffizienten  $D_3^j$ ,  $D_4^j$ ,  $D_7^j$  und  $D_8^j$  in Gl. (D.9) und der dazu konjugiert komplexen Größen  $\kappa$  durch  $-\kappa$  ersetzt werden muß. Setzt man die Gleichungen (3.54) und (D.4) in Gl. (3.53) ein, erhält man

$$M_{f\bar{j}} = (\mathcal{A}\mathcal{N})^2 \left\{ \left| \frac{D_3^{f*} D_4^{j*} q_+}{2k_{zF} + q_-} \left( e^{2ik_{zF}a + iq_- a} - 1 \right) + \frac{D_4^{f*} D_3^{j*} q_+}{2k_{zF} - q_-} \left( e^{2ik_{zF}a - iq_- a} - 1 \right) \right|^2 + \left| \frac{D_3^{f*} D_8^{j*} (2k_{zF} + q_-)}{q_+} (e^{iq_+ a} - 1) + \frac{D_4^{f*} D_7^{j*} (2k_{zF} - q_-)}{q_+} (e^{-iq_+ a} - 1) \right|^2 + \left| \frac{D_7^{f*} D_4^{j*} (2k_{zF} + q_-)}{q_+} (e^{-iq_+ a} - 1) + \frac{D_8^{f*} D_3^{j*} (2k_{zF} - q_-)}{q_+} (e^{iq_+ a} - 1) \right|^2 + \left| \frac{D_7^{f*} D_8^{j*} q_+}{2k_{zF} + q_-} \left( e^{-2ik_{zF}a - iq_- a} - 1 \right) + \frac{D_8^{f*} D_7^{j*} q_+}{2k_{zF} - q_-} \left( e^{-2ik_{zF}a + iq_- a} - 1 \right) \right|^2 \right\} \quad (3.56)$$

mit

$$q_{\pm} \equiv q_f \pm q_j. \quad (3.57)$$

Für die anderen Matrixelemente  $M_{f\bar{j}}$ ,  $M_{\bar{f}j}$  und  $M_{fj}$  findet man nach analoger Rechnung

$$\begin{aligned}
 M_{\bar{f}j} = (\mathcal{AN})^2 & \left\{ \left| \frac{D_4^f D_3^j q_+}{2k_{zF} - q_-} \left( e^{-2ik_{zF}a+iq_-a} - 1 \right) + \frac{D_3^f D_4^j q_+}{2k_{zF} + q_-} \left( e^{-2ik_{zF}a-iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \right. \\
 & + \left| \frac{D_4^f D_7^j (2k_{zF} - q_-)}{q_+} \left( e^{iq_+a} - 1 \right) + \frac{D_3^f D_8^j (2k_{zF} + q_-)}{q_+} \left( e^{-iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & + \left| \frac{D_8^f D_3^j (2k_{zF} - q_-)}{q_+} \left( e^{-iq_+a} - 1 \right) + \frac{D_7^f D_4^j (2k_{zF} + q_-)}{q_+} \left( e^{iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & \left. + \left| \frac{D_8^f D_7^j q_+}{2k_{zF} - q_-} \left( e^{2ik_{zF}a-iq_-a} - 1 \right) + \frac{D_7^f D_8^j q_+}{2k_{zF} + q_-} \left( e^{2ik_{zF}a+iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \right\}, \quad (3.58)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_{f\bar{j}} = (\mathcal{AN})^2 & \left\{ \left| \frac{D_4^f D_8^{j*} q_-}{2k_{zF} - q_+} \left( e^{-2ik_{zF}a+iq_+a} - 1 \right) - \frac{D_3^f D_7^{j*} q_-}{2k_{zF} + q_+} \left( e^{-2ik_{zF}a-iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \right. \\
 & + \left| \frac{D_4^f D_4^{j*} (2k_{zF} - q_+)}{q_-} \left( e^{iq_-a} - 1 \right) - \frac{D_3^f D_3^{j*} (2k_{zF} + q_+)}{q_-} \left( e^{-iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & + \left| \frac{D_8^f D_8^{j*} (2k_{zF} - q_+)}{q_-} \left( e^{-iq_-a} - 1 \right) - \frac{D_7^f D_7^{j*} (2k_{zF} + q_+)}{q_-} \left( e^{iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & \left. + \left| \frac{D_8^f D_4^{j*} q_-}{2k_{zF} - q_+} \left( e^{2ik_{zF}a-iq_+a} - 1 \right) - \frac{D_7^f D_3^{j*} q_-}{2k_{zF} + q_+} \left( e^{2ik_{zF}a+iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \right\} \quad (3.59)
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 M_{fj} = (\mathcal{AN})^2 & \left\{ \left| \frac{D_3^{f*} D_7^j q_-}{2k_{zF} + q_+} \left( e^{2ik_{zF}a+iq_+a} - 1 \right) - \frac{D_4^{f*} D_8^j q_-}{2k_{zF} - q_+} \left( e^{2ik_{zF}a-iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \right. \\
 & + \left| \frac{D_3^{f*} D_3^j (2k_{zF} + q_+)}{q_-} \left( e^{iq_-a} - 1 \right) - \frac{D_4^{f*} D_4^j (2k_{zF} - q_+)}{q_-} \left( e^{-iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & + \left| \frac{D_7^{f*} D_7^j (2k_{zF} + q_+)}{q_-} \left( e^{-iq_-a} - 1 \right) - \frac{D_8^{f*} D_8^j (2k_{zF} - q_+)}{q_-} \left( e^{iq_-a} - 1 \right) \right|^2 \\
 & \left. + \left| \frac{D_7^{f*} D_3^j q_-}{2k_{zF} + q_+} \left( e^{-2ik_{zF}a-iq_+a} - 1 \right) - \frac{D_8^{f*} D_4^j q_-}{2k_{zF} - q_+} \left( e^{-2ik_{zF}a+iq_+a} - 1 \right) \right|^2 \right\}. \quad (3.60)
 \end{aligned}$$

Die ersten und vierten Terme in den Gleichungen (3.56)–(3.60) kommen von Übergängen zwischen Zuständen mit entgegengesetzter  $z$ -Impulskomponente. Sie sind proportional  $q/k_{zF} \approx \Delta/\varepsilon_F \ll 1$  und müssen in Andreev-Näherung aus Konsistenzgründen weggelassen werden. Die nichtverschwindenden Beiträge der zweiten und dritten Terme sind wegen der Entartung der Wellenfunktionen mit  $z$ -Impulskomponente in bzw. entgegen der  $z$ -Richtung jeweils gleich. Die Übergangsamplituden für Absorption ( $\bar{j} \rightarrow$

$f$ ) und induzierte Emission ( $j \rightarrow \bar{j}$ ) eines Energiequants sind zueinander konjugiert komplex, so daß die Matrixelemente in den Gleichungen (3.56) und (3.58) (und damit die Übergangswahrscheinlichkeiten) identisch sind. Für  $T \rightarrow 0$  findet man unter Berücksichtigung der Entartung durch einen Faktor 2 für die absorbierte Leistung  $P(\omega)$  das Ergebnis aus Ref. [55], siehe Eq. (10). Im Grenzfall  $b \rightarrow \infty$  geht das Matrixelement (3.56) in das für  $SNS$ -Kontakte berechnete Ergebnis [65] über.

### Unkonventionelle Supraleiter, $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}}, \varepsilon_{\text{FN}}$

Für den allgemeinen Fall verschiedener Fermienergien in  $S$  und  $N$  und beliebiger Verhältnisse  $\varepsilon_{\text{FS}}/\Delta$  und  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}}$  werden die QT-Wellenfunktionen des ungestörten Systems in Anhang C bestimmt. Die Matrixelemente (3.45), die in Gl. (3.52) eingehen, werden in Anhang E berechnet. Für das Matrixelement eines Übergangs aus dem Grundzustand in einen angeregten Zustand erhält man

$$\begin{aligned}
 M_{f\bar{j}} = & (\mathcal{AN})^2 \left| \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^{-*}}{k_f^{+*} + k_j^{-*}} \cos \left[ \left( k_f^{+*} + k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_7^{j*} + A_6^{f*} A_8^{j*} \right\} \right. \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^{-*}}{k_f^{+*} - k_j^{-*}} \cos \left[ \left( k_f^{+*} - k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ A_5^{f*} A_7^{j*} + A_6^{f*} A_8^{j*} \right\} \\
 & - \frac{1}{(k_f^{+*} + k_j^{-*})(k_f^{+*} - k_j^{-*})} \left\{ \left( k_f^{+*2} + k_j^{-*2} \right) A_6^{f*} A_8^{j*} + 2k_f^{+*} k_j^{-*} A_5^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^{-*}}{k_f^{+*} + k_j^{-*}} \sin \left[ \left( k_f^{+*} + k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_8^{j*} - A_6^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^{-*}}{k_f^{+*} - k_j^{-*}} \sin \left[ \left( k_f^{+*} - k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_8^{j*} + A_6^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^{+*}}{k_f^{-*} + k_j^{+*}} \cos \left[ \left( k_f^{-*} + k_j^{+*} \right) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_5^{j*} + A_8^{f*} A_6^{j*} \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^{+*}}{k_f^{-*} - k_j^{+*}} \cos \left[ \left( k_f^{-*} - k_j^{+*} \right) a \right] \left\{ A_7^{f*} A_5^{j*} + A_8^{f*} A_6^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{(k_f^{-*} + k_j^{+*})(k_f^{-*} - k_j^{+*})} \left\{ \left( k_f^{-*2} + k_j^{+*2} \right) A_8^{f*} A_6^{j*} + 2k_f^{-*} k_j^{+*} A_7^{f*} A_5^{j*} \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^{+*}}{k_f^{-*} + k_j^{+*}} \sin \left[ \left( k_f^{-*} + k_j^{+*} \right) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_6^{j*} - A_8^{f*} A_5^{j*} \right\} \\
 & \left. - \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^{+*}}{k_f^{-*} - k_j^{+*}} \sin \left[ \left( k_f^{-*} - k_j^{+*} \right) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_6^{j*} + A_8^{f*} A_5^{j*} \right\} \right|^2. \tag{3.61}
 \end{aligned}$$

Die Matrixelemente  $M_{f\bar{j}}$ ,  $M_{\bar{f}j}$  und  $M_{fj}$  haben eine ähnliche Struktur und sind in den Gln. (E.6)–(E.8) des Anhangs E angegeben.

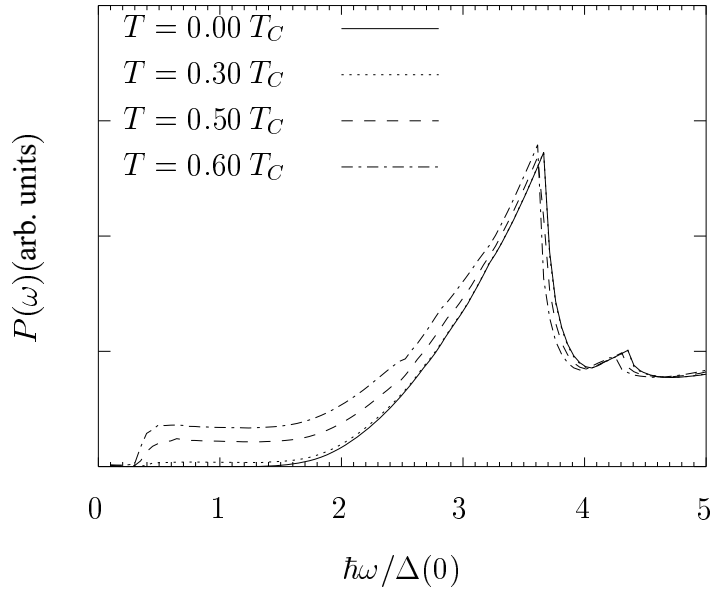


Abbildung 3.3: Von einer Multilage mit  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN} = 5000 \Delta$ ,  $a = 1 \xi_0$  und  $b = 5 \xi_0$  absorbierte Leistung  $P(\omega)$  als Funktion der eingestrahlten Frequenz  $\omega$  für verschiedene Temperaturen  $T$ .  $\Delta(0) = 1.76 k_B T_C$  ist das Paarpotential in den  $S$ -Schichten bei  $T = 0 K$ . Für  $\Delta(T)$  wird die BCS-Temperaturabhängigkeit angenommen. Das Blochspektrum dieser Multilage ist für  $T = 0 K$  in Abb. 3.5 dargestellt.

## 3.4 Ergebnisse

Die numerische Auswertung der Gl. (3.52) mit den Matrixelementen  $M_{FJ}$ , Gln. (3.56)–(3.59) für  $\Delta \ll \varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  und Gl. (3.61) für  $\varepsilon_{FS} \neq \varepsilon_{FN}$ , liefert die Absorptionsspektren in den Abbildungen 3.3, 3.4 und 3.6–3.8. Einige der zugrundeliegenden Blochspektren sind in den Abbildungen 3.5, 3.9 und 2.7 gezeigt.

Die grundlegende Physik optischer Absorption durch supraleitende Multilagen ist in Abb. 3.10 für den Fall gleicher Fermienergien in  $S$  und  $N$  schematisch dargestellt. Für  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  ist jeder QT-Zustand mit Energie  $E_{\gamma,\kappa}(k_\varrho)$  im wesentlichen eine Linearkombination eines Elektrons und eines Loches mit nahezu gleichem Impuls aber entgegengesetzten Gruppengeschwindigkeiten. QT-Zustände mit entgegengesetzten Impulsen sind zueinander entartet. Für verschiedene Fermienergien wird diese Entartung zwar durch die Konkurrenz von konventioneller Streuung an den  $SN$ -Phasengrenzen zur Andreev-Streuung aufgehoben, die in Abb. 3.10 illustrierte physikalische Interpretation der optischen Absorption bleibt jedoch grundsätzlich die gleiche. Wie in Abb. 3.5 an-

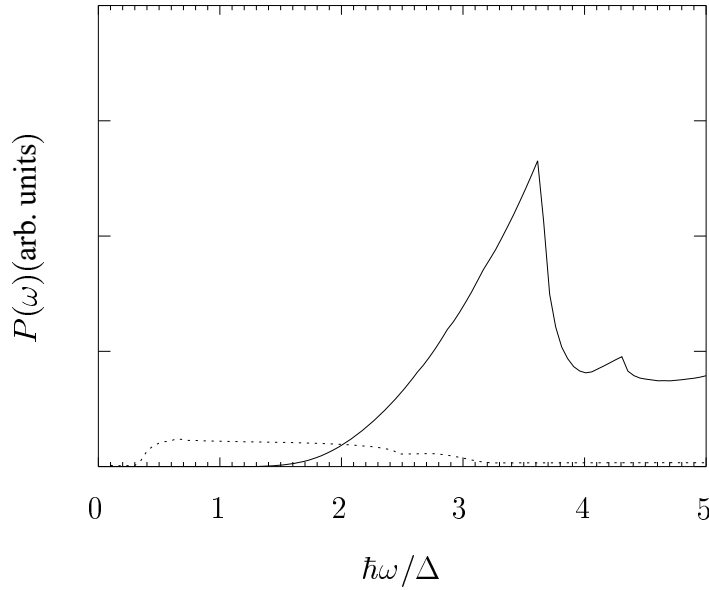


Abbildung 3.4: Beitrag von Übergängen aus dem Grundzustand (durchgezogene Linie) und von Übergängen zwischen angeregten Zuständen (gestrichelte Linie) zur für  $T = 0.5 T_C$  absorbierten Leistung in Abb. 3.3.

gedeutet stellt sich die Erzeugung zweier QT-Anregungen aus dem Grundzustand in der zeitabhängigen Störungstheorie formal als Übergang zwischen einem QT-Eigenzustand negativer Energie  $E_{\bar{\gamma},\kappa}(k_\rho) = -E_{\gamma,\kappa}(k_\rho) < 0$  und einem QT-Eigenzustand positiver Energie  $E_{\gamma',\kappa}(k_\rho) > 0$  dar. In diesem Fall ist das Matrixelement  $M_{FJ}$  in Gl. (3.52) durch die Gln. (3.56) bzw. (3.61) gegeben. Für endliche Temperaturen tragen auch Übergänge zwischen angeregten Zuständen, für die die Matrixelemente  $M_{FJ}$  für  $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$  in den Gln. (3.59) und (3.60) und für  $\varepsilon_{\text{FS}} \neq \varepsilon_{\text{FN}}$  in den Gln. (E.7) und (E.8) mit zwei Lösungen negativer bzw. positiver Energie berechnet wurden, zur absorbierten Leistung bei.

Ausgehend von diesen Überlegungen können die Absorptionsspektren von Multilagen mit  $\Delta \ll \varepsilon_{\text{FS}}, \varepsilon_{\text{FN}}$  in den Abbildungen 3.3, 3.4 und 3.6 folgendermaßen verstanden werden: Der dominierende Absorptionspeak resultiert aus der Anregung zweier Quasiteilchen aus dem Grundzustand in die beiden untersten Energiebänder mit hoher Interband-Zustandsdichte bei  $k_{z\text{FN}} \lesssim k_{\text{FN}}$ . Formal entspricht dieser Vorgang Übergängen vom ersten Blochband negativer Energie  $\bar{\gamma} = -1$  in das zweite Blochband positiver Energie  $\gamma = 2$  (und von  $\bar{\gamma} = -2$  nach  $\gamma = 1$ ), siehe Abb. 3.5. Der Abfall in der absorbierten Leistung oberhalb des Peaks ist in Abb. 3.6 steiler als in Abb. 3.3, da für  $a = 8 \xi_0$

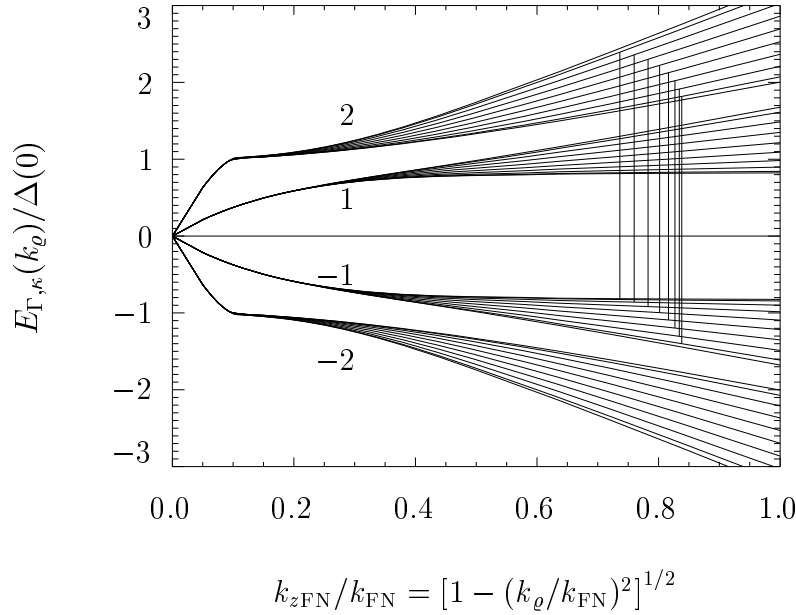


Abbildung 3.5: Spektrum der Zustände positiver und negativer Energie der Multilage mit den Parametern aus Abb. 3.3 für  $T \ll T_C$ . Zur Übersichtlichkeit sind nur wenige der Blochzustände in den Bändern  $\Gamma = \bar{\gamma} = -2$ ,  $\Gamma = \bar{\gamma} = -1$ ,  $\Gamma = \gamma = 1$  und  $\Gamma = \gamma = 2$  gezeigt. Mögliche Übergänge zwischen negativen Energien  $E_{-1, \kappa}(k_\rho)$  und positiven Energien  $E_{2, \kappa}(k_\rho)$  für  $\hbar\omega = 3.2 \Delta(0)$  sind angedeutet. Die den gleichen Beitrag zur absorbierten Leistung liefernden Übergänge zwischen  $E_{-2, \kappa}(k_\rho)$  und  $E_{1, \kappa}(k_\rho)$  sind nicht eingezeichnet.

und  $b = 3 \xi_0$  Anregungen in die beiden untersten Subbänder bei  $k_{zFN} = k_{FN}$  für praktisch alle Blochwellenzahlen  $\kappa$  bei der gleichen Frequenz  $\omega$  abgeschnitten werden. Dagegen werden für die Parameter der Multilage mit dem Absorptionsspektrum in Abb. 3.3 Übergänge in die beiden untersten Subbänder bei  $k_{zFN} = k_{FN}$  für verschiedene Wellenzahlen  $\kappa$  bei verschiedenen Frequenzen  $\omega$  abgeschnitten. Die Absorption bei höheren Frequenzen kommt durch Übergänge in höhere Subbänder. Optische Absorption setzt in Abb. 3.3 für  $T = 0 \text{ K}$  erst bei höheren Frequenzen als in Abb. 3.6 ein, da in den dünnen  $N$ -Schichten der Abb. 3.3 die untersten Blochbänder in Abb. 3.5 energetisch höher liegen als in den dickeren  $N$ -Schichten der Abb. 3.6 mit den Blochbändern in Abb. 2.7.

Die für  $\hbar\omega \ll \Delta$  in  $SNS$ -Kontakten [65] berechneten Strukturen sind klein gegen die Peaks in den Abbildungen 3.3 und 3.6. Durch die in Ref. [65] verwendete Linearisierung des Energiespektrums wird außerdem die Höhe der Sprünge bei ungeraden Vielfachen der Lücke im Andreev-Spektrum vergrößert.

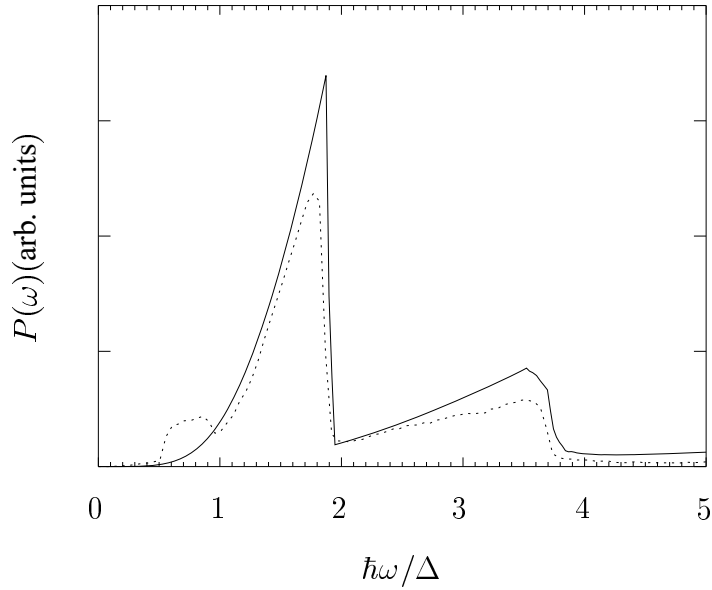


Abbildung 3.6: Absorptionsspektren von Multilagen mit  $a = 8 \xi$ ,  $b = 3 \xi_0$  bei  $T \ll T_C$  für  $\varepsilon_{FN} = \varepsilon_{FS}$  (durchgezogene Linie) und  $\varepsilon_{FN} = 0.98 \varepsilon_{FS}$  (gestrichelte Linie).

Bei endlichen Temperaturen sind auch Übergänge zwischen angeregten Zuständen möglich. Sie erhöhen die absorbierte Leistung im Energiebereich unterhalb  $2\Delta$ , siehe Abbildung 3.3 und 3.4. Die energetische Position des dominierenden Absorptionspeaks verschiebt sich nur wenig mit steigender Temperatur. Für Temperaturen nahe  $T_C$  muß das Eindringen des elektrischen Feldes in die  $S$ -Schichten, das im Vektorpotential (3.2) vernachlässigt wurde, berücksichtigt werden. Für  $\Delta \rightarrow 0$  und  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  wurde die absorbierte Leistung mit der Annahme eines überall konstanten Vektorpotentials gesondert berechnet. Die elektronische Struktur der betrachteten Systeme geht dann in die eines freien Elektronengases über, und die Interband-Absorption verschwindet wie erwartet.

Wird die Fermienergie in den  $N$ -Schichten,  $\varepsilon_{FN}$ , gegenüber der in den  $S$ -Schichten,  $\varepsilon_{FS}$ , verringert, reduziert sich wegen der sinkenden Elektronendichte für die meisten Photonenenergien auch die absorbierte Leistung, siehe Abb. 3.6. Im Energiebereich unterhalb  $\Delta(0)$ , wo sich die Absorption erhöht, ermöglicht die Brechung der diagonalen Translationssymmetrie durch das Skalarpotential  $U(z)$  Übergänge, die für  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  verboten sind.

Das Absorptionsspektrum in Abb. 3.7 wurde für geometrische und energetische Parameter berechnet, die für ein System angebracht sein könnten, das  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  als  $SN$ -Multilage modelliert. Die schnellen Oszillationen, d.h. Peaks im energetischen Abstand

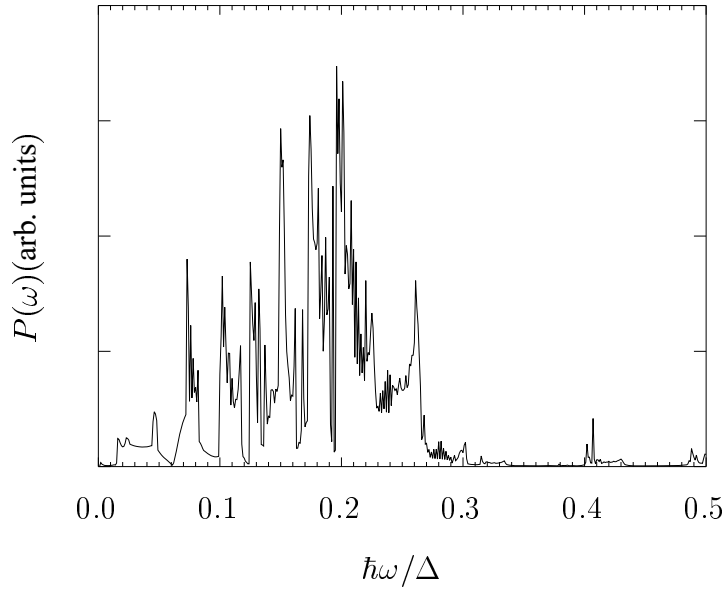


Abbildung 3.7: Absorbierte Leistung einer Multilage mit  $a = 4 \xi_0$ ,  $b = 1 \xi_0$ ,  $\varepsilon_{\text{FS}} = 100 \varepsilon_{\text{FN}}$ ,  $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{\text{FS}}$  bei  $T \ll T_C$ .

$\delta \hbar \omega \ll \Delta$ , sind mit numerischen Problemen im Zusammenhang mit der Diskretisierung der Blochwellenzahlen  $\kappa$  verbunden. Bei Erhöhung der Stützstellenzahl bleiben die physikalisch bedingten Maxima erhalten, siehe auch Abb. 3.8, während die dazwischenliegenden schnellen Oszillationen um die stabilen physikalischen Maxima herum sich jeweils umgruppieren. In Abb. 3.8 wurde  $P(\omega)$  deshalb über einen Energiebereich  $\hbar \omega = 0.01 \Delta$  gemittelt, um die Absorption anzugeben, wie sie in einem Experiment, das sowieso nur eine endliche Energieauflösung hat, gemessen werden würde. Die stark unterschiedlichen Fermienergien,  $\varepsilon_{\text{FS}} = 100 \varepsilon_{\text{FN}}$ , und das im Vergleich zu metallischen Supraleitern große Paarpotential  $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{\text{FS}}$  führen zu einer starken Konkurrenz von konventioneller Elektron–Elektron– und Loch–Loch–Streuung zur Andreev–Reflexion. Die entsprechenden Energiebänder und Zustandsdichten in den Abbildungen 2.19–2.22 wurden bereits im Abschnitt 2.1 diskutiert. Die Oszillationen in den Energiebändern in Abb. 2.20 sind in Abb. 3.9 für die untersten beiden Bänder und für  $\kappa = 0$  und  $\kappa = \pi/d$  vergrößert dargestellt. Sie liefern eine hohe Interband–Zustandsdichte in den Energiebereichen, die durch die sieben Kreise markiert sind. Für diese Energien gibt es viele Übergangskanäle aus dem Grundzustand in die beiden tiefsten Blochbänder. Dies führt zu den Peaks im Absorptionsspektrum in Abb. 3.8 bei den Photonenergien, die die Summen der entsprechenden Blochenergien bei  $\kappa \approx 0$  und  $\kappa \approx \pi/d$  sind.

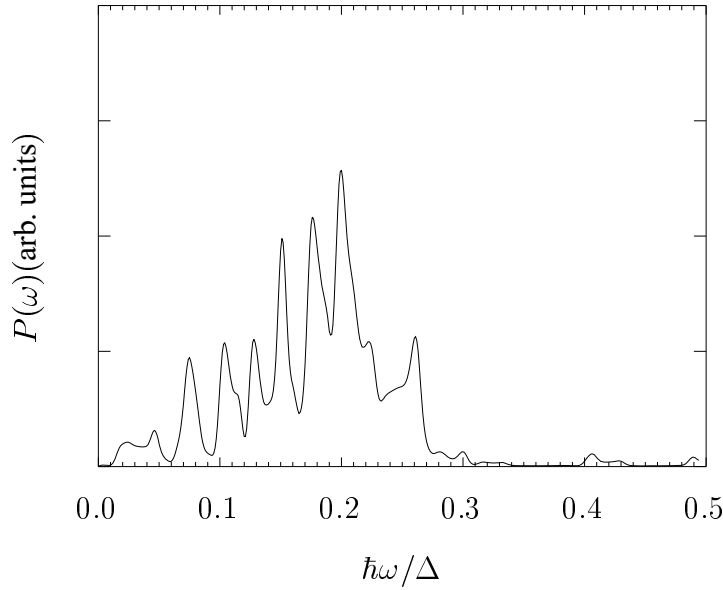


Abbildung 3.8: Absorbierte Leistung aus Abb. 3.7 über einen Bereich von  $0.01 \Delta$  gemittelt. Die Hauptpeaks kommen von Übergängen in die beiden tiefsten Blochbänder mit Extrema bei  $\kappa = 0$  und  $\kappa = \pi/d$  in den Energie- und  $k_{z\text{FN}}$ -Bereichen, die in Abb. 3.9 durch Kreise markiert sind. Die Mehrzahl der Peaks spaltet sich wegen der unterschiedlichen  $\kappa$ -Abhängigkeiten der beiden untersten oszillierenden Blochbänder in Doppelpeaks auf. Die Absorption in den  $N$ -Schichten ist wegen  $\epsilon_{\text{FN}} = \Delta$  auf Energien unterhalb  $\Delta$  beschränkt.

### 3.5 Diskussion und Vergleich mit Experimenten

In Multilagen bestehend aus metallischen Supraleitern und Halbleitern ergibt sich wegen der stark unterschiedlichen Fermienergien eine große Konkurrenz von konventioneller Elektron–Elektron– und Loch–Loch–Streuung zur Andreev–Reflexion. Die Oszillationen in den Blochbändern in Abb. 2.20 findet man deshalb in ähnlicher Form in den quantisierten Energieniveaus in Supraleiter–Halbleiter–Supraleiter–Kontakten [39], so daß das Absorptionsspektrum in Abb. 3.8 auch für diese Systeme relevant sein könnte. In einer Multilage bestehend aus supraleitenden Nb–Elektroden und InAs–Quantenwällen wurden “striking features” im Transmissionsspektrum bei Photonenenergien unterhalb der Energielücke  $2\Delta_{\text{Nb}}$  von Nb gefunden sowie Oszillationen, (die versuchsweise auf Fabry–Perot–Interferenzen zurückgeführt wurden) [66]. Obwohl die Experimente mit unpolari- sierter Strahlung durchgeführt wurden, könnte die Theorie mit  $\mathcal{E}$  senkrecht zu den Pha-

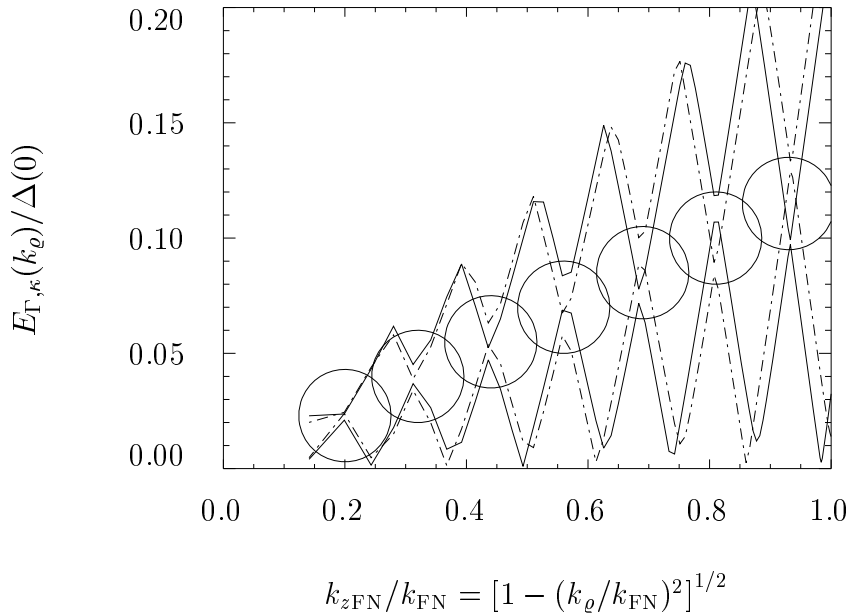


Abbildung 3.9: Die beiden tiefsten, oszillierenden Blochbänder einer Multilage mit den Parametern aus Abb. 3.7 für  $\kappa = 0$  (durchgezogene Linie) und für  $\kappa = \pi/d$  (gestrichelte Linie). Die sieben Kreise markieren Regionen hoher Zustandsdichte, die zu einer hohen Absorption in Abb. 3.8 führen. Das vollständige Spektrum ist in Abb. 2.20 dargestellt.

sengrenzen trotzdem anwendbar sein, da das Nb-Gitter selbst als Polarisator wirkt, der die parallel zu den Phasengrenzen polarisierten Strahlungsanteile stark reflektiert und nur die senkrecht zu den Phasengrenzen polarisierte Strahlung durchläßt [67]. Es muß jedoch noch genauer untersucht werden, ob die “striking features” tatsächlich auf Übergänge zwischen Blochbändern zurückzuführen sind.

In der optischen Antwort von supraleitenden  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Kristallen mit  $\mathcal{E}$  parallel zur  $c$ -Achse wird ein vollständig metallisches Verhalten im fernen Infrarotbereich gefunden, wobei sich die endliche Absorption bis zu niedrigen Frequenzen erstreckt [34]. Bei gleicher Polarisation des  $\mathcal{E}$ -Feldes ist der supraleitende Zustand in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ -Kristallen durch tief liegende Zustände gekennzeichnet. Hier zeigt der elektronische Anteil der optischen Leitfähigkeit Strukturen und steigt bei kleinen Frequenzen mit der Temperatur an [35]. Obwohl diese experimentellen Ergebnisse, vor allem die endliche Absorption bei niedrigen Frequenzen und  $T \ll T_C$ , auch in den theoretischen Absorptionsspektren zu finden sind, muß in kommenden Arbeiten noch genauer untersucht werden, ob YBCO bei der Behandlung seiner optischen Eigenschaften durch ein einfaches  $SN$ -Multilagenmodell mit stark unterschiedlichen Fermienergien und großem Paarpo-

tential in  $S$  beschrieben werden kann. Die in Abschnitt 2.2.4 diskutierte qualitative Übereinstimmung der für ein solches Modell berechneten lokalen Zustandsdichte mit Tunnelleitfähigkeitsspektren von  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Einkristallen [24] legt einen solchen Versuch jedoch nahe. Je größer der Unterschied in den Fermienergien ist, desto stärker unterdrückt die Normal-Streuung die Andreev-Reflexion, und die Blochbänder werden mehr durch das Übergitter aus normalen Quantentrögen aufgrund der verschiedenen Fermienergien als durch das Paarpotential-Übergitter bestimmt. Dies führt dazu, daß Absorptionseigenschaften, die auf die Blochband-Struktur zurückzuführen sind, auch bei Temperaturen oberhalb  $T_C$  erhalten bleiben sollten. Ein solches Verhalten wird tatsächlich in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.70}$  bei niedrigen Frequenzen gefunden [35].

Das Vektorpotential aus Gl. (3.2) stellt eine Näherung für die prinzipiell selbstkonsistent zu bestimmenden elektromagnetischen Potentiale in einem inhomogenen Supraleiter, auf den ein elektrisches Wechselfeld eingestrahlt wird, dar. Für hinreichend tiefe Temperaturen und entsprechend starke Paarpotentiale sollte diese Näherung akzeptabel sein. Sowohl räumliche Variationen des Feldes in den  $N$ -Schichten als auch ein Eindringen in die Supraleiter an den  $NS$ -Grenzflächen und an der Probenoberfläche werden vernachlässigt. Letzteres ist streng genommen nur für extreme Typ-I Supraleiter gültig. Die explizite Form des Vektorpotentials geht jedoch nur in die Übergangsmatrixelemente ein und beeinflußt die absorbierte Leistung daher mehr quantitativ als qualitativ. Die Absorptionspeaks in den Abbildungen 3.3, 3.4, 3.6 und 3.8 sind in erster Linie auf die Blochband-Struktur der Energiespektren der ungestörten Zustände zurückzuführen und sollten für andere Vektorpotential-Modelle erhalten bleiben, solange das elektrische Feld in  $z$ -Richtung polarisiert ist.

In dieser Arbeit wurden die zeitabhängigen BdGG in ihrer konventionellen Form, wie sie zur Behandlung von BCS-artigen Supraleitern hergeleitet wurden, verwendet. Eine theoretisch konsistente Beschreibung der stark korrelierten HTSL liefern streng genommen nur die stationären [68] und die zeitabhängigen [69] Dichtefunktional-BdGG, welche Austausch-Korrelations-Effekte beinhalten. Deren formale Struktur ist jedoch die gleiche wie die der konventionellen BdGG, so daß zu erwarten ist, daß Austausch-Korrelations-Effekte die Absorptionsspektren eher quantitativ als qualitativ beeinflussen.

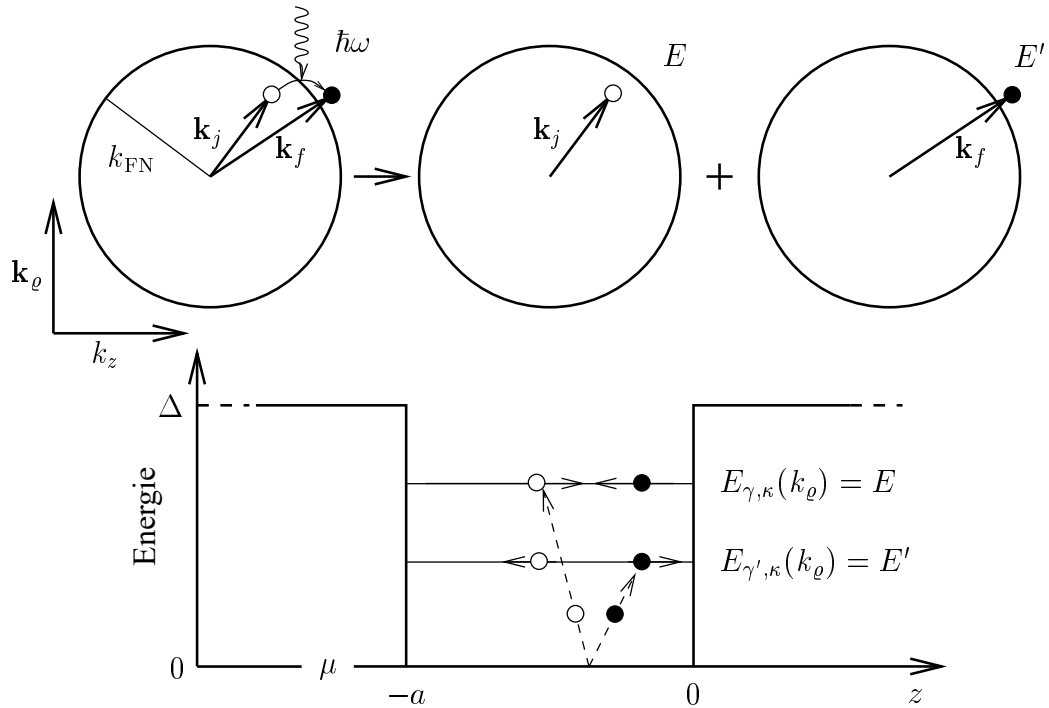


Abbildung 3.10: Illustration der paarweisen Quasiteilchen–Anregung durch optische Absorption in einer  $SNS$ –Multilage mit  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  bei  $T = 0\text{ K}$ . Der Einfachheit halber wird angenommen, daß die Dicke der  $N$ –Schichten  $a$  so groß ist, daß ihr Grundzustand näherungsweise durch eine Fermikugel beschrieben werden kann. Oben: Absorption eines Photons mit Energie  $\hbar\omega$  hebt ein Elektron mit Impuls  $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}_\rho + k_j\mathbf{e}_z$  unterhalb der Fermioberfläche (mit Radius  $k_{FN}$ ) in einen Zustand  $\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_\rho + k_f\mathbf{e}_z$  oberhalb der Fermioberfläche. Dies erzeugt kurzfristig die beiden Vielteilchenanregungen “Loch” mit Energie  $E$  und Impuls  $\mathbf{k}_j$  sowie “Elektron” mit Energie  $E'$  und Impuls  $\mathbf{k}_f$ . Unten: Nach einer Zeit  $t > t_0 = am/\hbar k_{zFN}$  seit der Absorption des Photons haben Andreev–Reflexionen Linearkombinationen von Elektronen und Löchern aus jeder der beiden anfänglichen Vielteilchenanregungen “Elektron” und “Loch” erzeugt.  $\delta$  ist dabei die Zeit, nach der die “Elektron”– und “Loch”–Anregungen mit Sicherheit die  $N$ –Schicht durchquert haben und an der  $SN$ –Phasengrenze Andreev–reflektiert wurden. Die Energieerhaltung erfordert, daß die Photonenenergie  $\hbar\omega$  gleich der Summe  $E_{\gamma,\kappa}(k_\rho) + E_{\gamma',\kappa}(k_\rho)$  der Energien der zwei angeregten Multilagenzustände ist, in die die Übergänge aus dem Grundzustand erfolgt sind.

# Zusammenfassung

---

In der vorliegenden Arbeit wird das selbstkonsistente Paarpotential, die elektronische Struktur und die optische Absorption in supraleitenden Multilagen berechnet. Die normalleitenden ( $N$ ) Schichten der Dicke  $a$  und die supraleitenden ( $S$ ) Schichten der Dicke  $b$  haben im allgemeinen unterschiedliche Fermienergien  $\varepsilon_{\text{FN}}$  bzw.  $\varepsilon_{\text{FS}}$ . Die Brechung der nebendiagonalen Translationssymmetrie durch räumliche Variationen des Paarpotentials  $\Delta(z)$  und der diagonalen Translationssymmetrie durch das Skalarpotential, das die verschiedenen Fermienergien beschreibt, führt zu Elektron  $\leftrightarrow$  Loch (Andreev)–Streuung und Normalreflexion in den  $SN$ –Grenzschichten. Die beiden miteinander konkurrierenden Streuprozesse führen zur Ausbildung von Blochbändern in dem periodischen Multilagensystem.

Das selbstkonsistente Paarpotential  $\Delta(z)$  wird mit Hilfe der quasiklassischen Greenschen Funktionen in einem iterativen Verfahren berechnet. Der Gültigkeitsbereich der quasiklassischen Näherung ist dabei auf Systeme beschränkt, in denen der Maximalwert  $\Delta$  des Paarpotentials sehr viel kleiner als  $\varepsilon_{\text{FS}}$  und damit die Kohärenzlänge groß gegen die Fermiwellenlänge ist. Die endliche Wahrscheinlichkeit  $R$  für Normalreflexion an den Phasengrenzen geht als phänomenologischer Parameter für Systeme mit verschiedenen Fermienergien in  $S$  und  $N$  und endlichem Kontaktflächenpotential  $V_S$  in die nichtlineare Randbedingung für die Greenschen Funktionen ein. Für ideale, saubere Grenzflächen ( $V_S = 0$  und  $\varepsilon_{\text{FN}} = \varepsilon_{\text{FS}}$ ) findet man einen stark ausgeprägten “Proximity Effect”, d.h. eine große Abweichung des selbstkonsistenten Paarpotentials von der Stufenform. Für endliches  $R$  ist der “Proximity Effect” wie in Isolator–Normalleiter–Supraleiter–Kontakten stark reduziert und in Abhängigkeit des Verhältnisses  $\varepsilon_{\text{FN}}/\varepsilon_{\text{FS}}$  “asymmetrisch”: Aufgrund der Erhaltung des Impulses parallel zu den Phasengrenzen sind z.B. für  $\varepsilon_{\text{FS}} > \varepsilon_{\text{FN}}$  Quasiteilchen mit Impulsen größer als der  $N$ –Fermiimpuls in  $S$  lokalisiert und schwächen dort den “Proximity Effect”, da sie sich wie Quasiteilchen in einem supraleitenden Film der Dicke  $b$  verhalten. In Systemen mit  $\varepsilon_{\text{FS}} > \varepsilon_{\text{FN}}$  (und mit verschwindender oder allen-

falls kleiner BCS–Wechselwirkungskonstante in  $N$ ) stellt die Stufenpotentialform deshalb eine sehr gute Näherung für das selbstkonsistente Paarpotential dar.

Für Systeme mit  $\varepsilon_{\text{FS}} = \varepsilon_{\text{FN}}$ , in denen das selbstkonsistente Paarpotential am stärksten vom Stufenpotentialverlauf abweicht, wird mit Hilfe der WKBJ–Näherung für die stationären Bogoliubov–de Gennes Gleichungen (BdGG) gezeigt, daß zur Berechnung der elektronischen Struktur die Stufenpotentialnäherung dennoch ausreicht, wenn der Einfluß des “Proximity Effects” durch effektive  $S$ – und  $N$ –Schichtdicken berücksichtigt wird.

Auch außerhalb des Gültigkeitsbereichs quasiklassischer Näherungen können mit Hilfe der BdGG die Quasiteilchenzustände derjenigen Systeme exakt berechnet werden, in denen ein periodisches Stufenpotential eine gültige Näherung für das selbstkonsistente Paarpotential darstellt. Die Wahrscheinlichkeiten für Normalreflexion aufgrund des Skalarpotentials  $U(z)$ , das die verschiedenen Fermienergien beschreibt, und für Andreev–Streuung ergeben sich dabei direkt aus den Anschlußbedingungen für die Quasiteilchenwellenfunktionen und müssen nicht durch einen phänomenologischen Parameter  $R$  berücksichtigt werden. Die resultierenden Energiebänder und Zustandsdichten zeigen in Systemen mit  $S$ –Schichten mehrerer Kohärenzlängen Dicke den Subgap–Peak (neben dem BCS–Peak) und die Tomasch–McMillan–Anderson–Oszillationen wie in  $SN$ –Kontakten. Diese Eigenschaften, die auf Andreev–Streuung zurückzuführen sind, nehmen mit wachsendem Verhältnis  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}}$  aufgrund der Konkurrenz durch die Normalreflexion ab. Die Temperaturabhängigkeit der energetischen Position des Subgap–Peaks ist schwächer als die des BCS–Peaks.

Für ein System mit energetischen und geometrischen Parametern, die zur Beschreibung der intrinsischen Schichtstruktur von  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  durch ein  $SN$ –Multilagenmodell angebracht sein könnten, d.h. ein System mit einem, im Vergleich zu konventionellen Supraleitern, großen Paarpotential  $\Delta = 10^{-2} \varepsilon_{\text{FS}}$ , mit stark unterschiedlichen Fermienergien,  $\varepsilon_{\text{FS}}/\varepsilon_{\text{FN}} = 100$ , und mit  $S$ – bzw.  $N$ –Schichtdicken von einer bzw. vier Kohärenzlängen, findet man eine BCS–artige lokale Zustandsdichte in den  $S$ –Schichten und eine metallartige in den  $N$ –Schichten. In  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ –Einkristallen wurden tatsächlich periodisch mit der Gitterkonstanten in  $c$ –Richtung abwechselnd BCS–artige und metallartige Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen. Dies scheint ein Indiz dafür zu sein, daß das einfache Multilagenmodell, basierend auf Fermiflüssigkeitstheorie und Gorkov–Paarwechselwirkung, auch einige Relevanz für das Verständnis der elektronischen Struktur der Hochtemperatursupraleiter haben könnte.

Die Energiebänder und Quasiteilchenwellenfunktionen bilden die Grundlage für die Berechnung der optischen Absorption durch Multilagen in Mikrowellen– oder Ferninfrarot–Feldern mit dem elektrischen Feldvektor senkrecht zu den  $SN$ –Phasen–

grenzen. Die Absorptionsspektren ergeben sich aus optischen Anregungen in die Quasiteilchen–Blochbänder und haben folgenden Eigenschaften:

- Für nicht zu unterschiedliche Fermienergien gibt es ein dominierendes Absorptionsmaximum, dessen energetische Position sich relativ zum Paarpotential in Abhängigkeit von der Temperatur nur wenig verschiebt aber abhängig von den Schichtdicken ist.
- Für die oben im Zusammenhang mit  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  diskutierten Parameter findet man dagegen mehrere scharfe Absorptionspeaks bei niedrigen Frequenzen.
- Die optische Absorption setzt schon bei Photonenenergien unterhalb  $2\Delta$  ein. Dies ist bedingt durch Übergänge aus dem Grundzustand in Blochzustände mit  $E < \Delta$ .
- Mit steigender Temperatur steigt die absorbierte Leistung für  $\hbar\omega < 2\Delta$  aufgrund von Übergängen zwischen angeregten Zuständen.

Eine mögliche Methode, diese durch die Blochbänder bedingten Eigenschaften experimentell nachzuweisen, besteht darin, die Absorptionsspektren sowohl mit Polarisation parallel als auch senkrecht zu den  $SN$ –Phasengrenzen zu messen. Die Differenz in den elektronischen Anteilen der Absorptionsspektren ist auf die Blochband–Struktur der Quasiteilchenspektren zurückzuführen.

# A

## Lösung des Selbstkonsistenzproblems

---

Für praktische Rechnungen werden wie bei Bruder [44] die quasiklassischen Greenschen Funktionen, die der Gl. (1.1) genügen, und alle auftretenden  $2 \times 2$ -Matrizen nach Pauli-Matrizen entwickelt:

$$\hat{g} = \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\tau} = g_1 \hat{\tau}_1 + g_2 \hat{\tau}_2 + g_3 \hat{\tau}_3, \quad \mathbf{g} = (g_1, g_2, g_3), \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{s} = \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\tau} = s_1 \hat{\tau}_1 + s_2 \hat{\tau}_2 + s_3 \hat{\tau}_3, \quad \mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3), \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{d} = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\tau} = d_1 \hat{\tau}_1 + d_2 \hat{\tau}_2 + d_3 \hat{\tau}_3, \quad \mathbf{d} = (d_1, d_2, d_3). \quad (\text{A.3})$$

Außerdem wird hier zur Vereinfachung der Schreibweise die Matsubara-Energie  $\epsilon_n$  im Argument der Greenschen Funktionen  $\mathbf{g}(\hat{\mathbf{k}}, z) \equiv \mathbf{g}(\hat{\mathbf{k}}, z; \epsilon_n)$  weggelassen. Die quasiklassischen Gleichungen (1.1) lassen sich dann für ein reelles Paarpotential  $\Delta(z)$  in der Form

$$\frac{d}{dz} \mathbf{g}(\hat{\mathbf{k}}, z) = i \frac{2m}{\hbar^2 k_{zF}} \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_n & \Delta(z) \\ -\epsilon_n & 0 & 0 \\ -\Delta(z) & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{g}(\hat{\mathbf{k}}, z) \quad (\text{A.4})$$

schreiben, und die Anschlußbedingung (1.10) wird zu

$$\mathbf{d}_S = \mathbf{d}_N, \quad (\text{A.5a})$$

$$-\mathbf{d}_S (\mathbf{s}_S)^2 = \alpha [2\pi \mathbf{s}_N \times \mathbf{s}_S - \mathbf{d}_S (\mathbf{s}_N \cdot \mathbf{s}_S)] \quad (\text{A.5b})$$

mit

$$\alpha = \frac{1 - R}{1 + R}. \quad (\text{A.6})$$

Bei der iterativen Lösung des Selbstkonsistenzproblems wird in nullter Ordnung von einem stückweise konstanten Paarpotential, das in  $z = 0$  von  $\Delta(z) = \Delta_N$  in  $N$  auf

$\Delta(z) = \Delta_S = 1.76 k_B T_{CS}$  in  $S$  springt, ausgegangen. In den Bereichen konstanten Paarpotentials findet man aus Gl. (A.4) die räumlich konstante Lösung

$$\mathbf{g}_{S,N}^c(\hat{\mathbf{k}}, z) = \frac{-i\pi}{E_{S,N}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\Delta_{S,N} \\ \epsilon_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

und die exponentiell ansteigenden und abfallenden Lösungen

$$\mathbf{g}_{S,N}^i(\hat{\mathbf{k}}, z) = \begin{pmatrix} -\Delta_{S,N} E_{S,N} \\ i\Delta_{S,N} \epsilon_n \\ i\Delta_{S,N}^2 \end{pmatrix} \exp(2q_{S,N}z), \quad (\text{A.8a})$$

$$\mathbf{g}_{S,N}^d(\hat{\mathbf{k}}, z) = \begin{pmatrix} \Delta_{S,N} E_{S,N} \\ i\Delta_{S,N} \epsilon_n \\ i\Delta_{S,N}^2 \end{pmatrix} \exp(-2q_{S,N}z) \quad (\text{A.8b})$$

mit

$$E_{S,N} = \sqrt{\epsilon_n^2 + \Delta_{S,N}^2} \quad (\text{A.9})$$

und

$$q_{S,N} = \frac{mE_{S,N}}{\hbar^2 k_{z\text{FS},N}}. \quad (\text{A.10})$$

Die Linearkombination von (A.7) und (A.8) und die Symmetrierelation [41]

$$\mathbf{g}(\hat{\mathbf{k}}, z) = -\mathbf{g}^*(-\hat{\mathbf{k}}, z) = -\mathbf{g}^*(\hat{\mathbf{k}}, z) \quad (\text{A.11})$$

liefern die allgemeine Lösung

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{S,N}(\pm\hat{\mathbf{k}}, z) = & \frac{-i\pi}{E_{S,N}} \left[ A_1^{S,N} \begin{pmatrix} 0 \\ -\Delta_{S,N} \\ \epsilon_n \end{pmatrix} \right. \\ & \left. + A_2^{S,N} \begin{pmatrix} \mp iE_{S,N} \\ \epsilon_n \\ \Delta_{S,N} \end{pmatrix} e^{-2q_{S,N}z} + A_3^{S,N} \begin{pmatrix} \pm iE_{S,N} \\ \epsilon_n \\ \Delta_{S,N} \end{pmatrix} e^{2q_{S,N}z} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

in  $S$  und  $N$ . Das obere Vorzeichen vor  $iE_{S,N}$  bezieht sich dabei auf die Lösung  $\mathbf{g}(+\hat{\mathbf{k}}, z)$  das untere auf die Lösung  $\mathbf{g}(-\hat{\mathbf{k}}, z)$ . Für die hier betrachteten Systeme mit endlichen  $S$ -Schichtdicken wird auch die exponentiell in  $S$  ansteigende Lösung mitgenommen. Aus der Bedingung für spiegelnde Reflexion in  $z = -a/2$  und  $z = b/2$ ,

$$\mathbf{g}_N(+\hat{\mathbf{k}}, -a/2) = \mathbf{g}_N(-\hat{\mathbf{k}}, -a/2), \quad (\text{A.13a})$$

$$\mathbf{g}_S(+\hat{\mathbf{k}}, +b/2) = \mathbf{g}_S(-\hat{\mathbf{k}}, +b/2), \quad (\text{A.13b})$$

folgt für die Propagatoren

$$\mathbf{g}_N(\pm\hat{\mathbf{k}}, z) = \frac{-i\pi}{E_N} \left[ b_1 \begin{pmatrix} 0 \\ -\Delta_N \\ \epsilon_n \end{pmatrix} + 2b_N \begin{pmatrix} \pm iE_N \sinh[2q_N(z + a/2)] \\ \epsilon_n \cosh[2q_N(z + a/2)] \\ \Delta_N \cosh[2q_N(z + a/2)] \end{pmatrix} \right] \quad (\text{A.14})$$

und

$$\mathbf{g}_S(\pm\hat{\mathbf{k}}, z) = \frac{-i\pi}{E_S} \left[ a_1 \begin{pmatrix} 0 \\ -\Delta_S \\ \epsilon_n \end{pmatrix} + 2a_S \begin{pmatrix} \mp iE_S \sinh[2q_S(b/2 - z)] \\ \epsilon_n \cosh[2q_S(b/2 - z)] \\ \Delta_S \cosh[2q_S(b/2 - z)] \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{A.15})$$

Mit Hilfe der Normierungsbedingung (1.9) können zwei der vier Koeffizienten  $a_1$ ,  $a_S$ ,  $b_1$  und  $b_N$  eliminiert werden:

$$a_1 = \sqrt{1 - 4a_S^2}, \quad (\text{A.16a})$$

$$b_1 = \sqrt{1 - 4b_N^2}. \quad (\text{A.16b})$$

Die verbleibenden zwei Unbekannten in Gl. (A.14) und (A.15) werden aus der Anschlußbedingung an der Phasengrenze bestimmt. Gl. (A.5a) liefert unmittelbar

$$b_N = -a_S \frac{\sinh(q_S b)}{\sinh(q_N a)}, \quad (\text{A.17})$$

und aus Gl. (A.5b) ergibt sich nach kurzer Rechnung

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha}{E_S E_N} \{ \epsilon_n (\Delta_S - \Delta_N) [a_1 b_1 + 4a_S b_N c_1 c_2 + 2a_S s_2 (b_1 2a_S c_2 - a_1 2b_N c_1)] \\ & \quad + (\epsilon_n^2 + \Delta_S \Delta_N) [a_1 2b_N c_1 - b_1 2a_S c_2 + 2a_S s_2 (4b_N a_S c_1 c_2 + a_1 b_1)] \} \\ & + 2a_S s_2 [a_1^2 + 4a_S^2 c_2^2] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

mit

$$s_1 = \sinh(q_N a), \quad (\text{A.19a})$$

$$c_1 = \cosh(q_N a), \quad (\text{A.19b})$$

$$s_2 = \sinh(q_S b), \quad (\text{A.19c})$$

$$c_2 = \cosh(q_S b). \quad (\text{A.19d})$$

Im Unterschied zum  $SN$ -Kontakt mit halbumendlich ausgedehnten Schichten, wo man ein Polynom dritten Grades als Bestimmungsgleichung für  $a_S$  erhält [44], und zum  $INS$ -“Proximity“-Kontakt, wo die Koeffizienten analytisch bestimmt werden können [41],

müssen für Multilagenn die vier Koeffizienten  $a_1$ ,  $a_S$ ,  $b_1$  und  $b_N$  aus den Gln. (A.16)-(A.18) numerisch berechnet werden. Im Grenzfall  $b \rightarrow \infty$  erhält man mit  $D \equiv 2a_S c_2 \approx 2a_S s_2$  (d.h.  $a_S \rightarrow 0$ ) und  $A_2 + A_3 \equiv 2b_N c_1$  aus Gl. (A.16)-(A.18) Kieselmann's Ergebnis für *INS*-“Proximity“-Kontakte, siehe Eqs. (2.12)-(2.14) in Ref. [41].

Bei der Berechnung der höheren Iterationen werden die durch ihr asymptotisches Verhalten für  $z \rightarrow -a/2$  und  $z \rightarrow b/2$  als konstant bzw. exponentiell ansteigend und abfallend charakterisierbaren Lösungen für  $g(z)$  durch numerische Integration von Gl. (A.4) (mit  $\Delta(z) \neq \text{const.}$ ) bestimmt. Als Randbedingungen werden dabei die Lösungen aus den Gln. (A.7) und (A.8) verwendet, die jeweils in der Mitte der *N*- und *S*-Schichten mit  $\Delta_N = \Delta(-a/2)$  bzw.  $\Delta_S = \Delta(b/2)$  näherungsweise gültig sind. Die Koeffizienten der Linearkombinationen der numerisch bestimmten Lösungen werden wie zuvor aus den Normierungs-, Rand- und Anschlußbedingungen,<sup>1</sup> Gln. (1.9), (A.13) und (A.5), ermittelt.

Die numerische Integration von Gl. (A.4) wurde wie bei Bruder [44] mit einem Runge–Kutta–Algorithmus durchgeführt. Zur Berechnung der durch konstantes asymptotisches Verhalten charakterisierten Lösung wurde der “Multiplikationstrick” [44] von Thuneberg, Kurkijärvi und Rainer [70] verwendet. Hierbei wird ausgenutzt, daß sich die “konstante” Lösung aus dem Produkt der exponentiell ansteigenden und abfallenden Lösungen in Matrixschreibweise ergibt. Die numerische Integration über die Einfallrichtungen  $\hat{\mathbf{k}}$  in der Selbstkonsistenzgleichung (1.8) wurde mit einem Gauss–Legendre–Algorithmus durchgeführt. Die Anzahl der Stützstellen betrug 10 für  $\varepsilon_{FS} = \varepsilon_{FN}$  und wurde mit steigender Fehlanpassung der Fermienergien auf bis zu 40 erhöht. Der Selbstkonsistenzzyklus wurde abgebrochen, wenn sich  $\Delta(z)$  für alle  $z$  von einem Iterationsschritt zum nächsten um weniger als 1 % änderte.

---

<sup>1</sup>Es ist dabei zu beachten, daß in Fällen, in denen  $\hbar k_\rho$  den Fermiimpuls eines der beiden Materialien überschreitet, die Anschlußbedingung für spiegelnde Reflexion statt Gl. (A.5b) in  $z = 0$  verwendet werden muß.

# B

## Eigenwertgleichung und Quasiteilchenwellenfunktion in WKBJ–Näherung

---

Zur Berechnung der Eigenwertgleichung in WKBJ–Näherung ist es am günstigsten, den Ursprung des Koordinatensystems in die Mitte eines Normalleiters zu legen. Da der Ordnungsparameter  $\Delta(z)$  dann eine gerade Funktion von  $z$  ist, genügen die Funktionen  $\eta_{1/2}(z)$  und  $\xi_{1/2}(z)$  nach Gl. (2.8) den Symmetrierelationen

$$\eta_{1,2}(-z) = -\eta_{1,2}(z), \quad (\text{B.1a})$$

$$\xi_{1,2}(-z) = \xi_{1,2}(z). \quad (\text{B.1b})$$

Die QT–Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix}^{\pm} = \left[ D_1^{\pm} \begin{pmatrix} e^{i\eta_1(z)/2} \\ e^{-i\eta_1(z)/2} \end{pmatrix} e^{i\xi_1(z)} + D_2^{\pm} \begin{pmatrix} e^{i\eta_2(z)/2} \\ e^{-i\eta_2(z)/2} \end{pmatrix} e^{i\xi_2(z)} \right] e^{ik_z F z} \quad (\text{B.2})$$

mit den Koeffizienten  $D_{1,2}^-$  in  $-d/2 < z < 0$  und  $D_{1,2}^+$  in  $0 < z < d/2$ . Aus der Periodizitätsbedingung (2.5) und aus der Bedingung der Stetigkeit der Wellenfunktion in  $z = 0$  und  $z = d/2$ ,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \Big|_{z=0-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \Big|_{z=0+\epsilon}, \quad (\text{B.3})$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \Big|_{z=d/2-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \Big|_{z=d/2+\epsilon} = e^{ik_d d} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} \Big|_{z=-d/2+\epsilon}, \quad (\text{B.4})$$

folgt das lineare homogene Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\eta_1(0)+i\xi_1(0)} & e^{\frac{i}{2}\eta_2(0)+i\xi_2(0)} & -e^{-\frac{i}{2}\eta_1(0)+i\xi_1(0)} & -e^{-\frac{i}{2}\eta_2(0)+i\xi_2(0)} \\ e^{-\frac{i}{2}\eta_1(0)+i\xi_1(0)} & e^{-\frac{i}{2}\eta_2(0)+i\xi_2(0)} & -e^{\frac{i}{2}\eta_1(0)+i\xi_1(0)} & -e^{\frac{i}{2}\eta_2(0)+i\xi_2(0)} \\ e^{\frac{i}{2}\eta_S+i\xi_S} & e^{-\frac{i}{2}\eta_S-i\xi_S} & -\theta e^{-\frac{i}{2}\eta_S+i\xi_S} & -\theta e^{\frac{i}{2}\eta_S-i\xi_S} \\ e^{-\frac{i}{2}\eta_S+i\xi_S} & e^{\frac{i}{2}\eta_S-i\xi_S} & -\theta e^{\frac{i}{2}\eta_S+i\xi_S} & -\theta e^{-\frac{i}{2}\eta_S-i\xi_S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1^+ \\ D_2^+ \\ D_1^- \\ D_2^- \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.5})$$

Hier wurden bereits die Symmetrierelationen (B.1) sowie die Abkürzungen  $\theta = e^{i(\kappa-k_{zF})d}$  und

$$\eta_1(d/2) = -\eta_2(d/2) = \arccos(E/\Delta_0) \equiv \eta_S, \quad (\text{B.6a})$$

$$\xi_1(d/2) = -\xi_2(d/2) = i \frac{m}{\hbar^2 k_{zF}} (\Delta_0^2 - E^2)^{1/2} d/2 \equiv \xi_S \quad (\text{B.6b})$$

benutzt. Nichttriviale Lösungen des Gleichungssystems (B.5) existieren nur für eine verschwindende Koeffizientendeterminante. Diese Bedingung liefert die Eigenwertgleichung des Systems

$$\begin{aligned} 0 &= 2 \sin \{ [\eta_2(0) - \eta_1(0)] / 2 \} \cos [(\kappa - k_{zF}) d] \\ &+ \exp \{ -i [\xi_2(0) - \xi_1(0) + 2\xi_S] \} \sin [\eta_1(0)] \\ &- \exp \{ i [\xi_2(0) - \xi_1(0) + 2\xi_S] \} \sin [\eta_2(0)]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Beim Wechsel zum ursprünglichen Koordinatensystem mit  $z = 0$  an einer *SN*-Phasengrenze ( $z \rightarrow z - a/2$ ) erhält man die Eigenwertgleichung (2.9).

# C

## Eigenwertgleichung und Quasiteilchenwellenfunktion im Fall unterschiedlicher Fermienergien

---

Die Anpaßbedingungen (2.28) und Periodizitätsbedingung (2.5) liefern das lineare, homogene Gleichungssystem

$$\check{M} \cdot \vec{A} = \vec{0} \quad (\text{C.1})$$

für den Vektor  $\vec{A}$  der Koeffizienten  $A_1 \dots A_8$  mit der  $8 \times 8$ -Matrix

$$\check{M} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma^+ & 0 & \Gamma^- & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma^- & 0 & \Gamma^+ & 0 & 0 & 0 & 1 \\ k_S^+ \Gamma^+ & 0 & k_S^- \Gamma^- & 0 & k_N^+ & 0 & 0 & 0 \\ k_S^+ \Gamma^- & 0 & k_S^- \Gamma^+ & 0 & 0 & 0 & k_N^- & 0 \\ \Gamma^+ s_3 & \Gamma^+ c_3 & \Gamma^- s_4 & \Gamma^- c_4 & -\theta s_1 & \theta c_1 & 0 & 0 \\ \Gamma^- s_3 & \Gamma^- c_3 & \Gamma^+ s_4 & \Gamma^+ c_4 & 0 & 0 & -\theta s_2 & \theta c_2 \\ k_S^+ \Gamma^+ c_3 & -k_S^+ \Gamma^+ s_3 & k_S^- \Gamma^- c_4 & -k_S^- \Gamma^- s_4 & \theta k_N^+ c_1 & \theta k_N^+ s_1 & 0 & 0 \\ k_S^+ \Gamma^- c_3 & -k_S^+ \Gamma^- s_3 & k_S^- \Gamma^+ c_4 & -k_S^- \Gamma^+ s_4 & 0 & 0 & \theta k_N^- c_2 & \theta k_N^- s_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Hier wurden die Abkürzungen  $\theta = e^{ikd}$  und

$$\begin{aligned} s_1 &\equiv \sin(k_N^+ a), & c_1 &\equiv \cos(k_N^+ a), \\ s_2 &\equiv \sin(k_N^- a), & c_2 &\equiv \cos(k_N^- a), \\ s_3 &\equiv \sin(k_S^+ b), & c_3 &\equiv \cos(k_S^+ b), \\ s_4 &\equiv \sin(k_S^- b), & c_4 &\equiv \cos(k_S^- b) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

verwendet. Die Bedingung  $\text{Det}\tilde{M} = 0$  liefert die Eigenwertgleichung (2.30) mit den Funktionen

$$D_0 = 4\delta^2 k_N^+ k_N^- k_S^+ k_S^-, \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} D_1 = & -4\delta k_N^+ k_N^- k_S^+ k_S^- \{c_1 [c_4(\delta - 1) + c_3(\delta + 1)] + c_2 [c_3(\delta - 1) + c_4(\delta + 1)]\} \\ & + 2\delta k_N^- k_S^+ k_S^- s_1 [k_S^+ s_3(\delta + 1) + k_S^- s_4(\delta - 1)] \\ & + 2\delta k_N^+ k_S^+ k_S^- s_2 [k_S^+ s_3(\delta - 1) + k_S^- s_4(\delta + 1)] \\ & + 2\delta k_N^{+2} k_N^- s_1 [k_S^+ s_4(\delta - 1) + k_S^- s_3(\delta + 1)] \\ & + 2\delta k_N^+ k_N^{-2} s_2 [k_S^+ s_4(\delta + 1) + k_S^- s_3(\delta - 1)], \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} D_2 = & 4\delta^2 s_1 s_2 s_3 s_4 (k_N^{+2} k_N^{-2} + k_S^{+2} k_S^{-2}) \\ & - 4\delta k_N^- k_S^+ k_S^- s_1 c_2 [k_S^+ s_3 c_4(\delta + 1) + k_S^- c_3 s_4(\delta - 1)] \\ & - 4\delta k_N^+ k_S^+ k_S^- c_1 s_2 [k_S^+ s_3 c_4(\delta - 1) + k_S^- c_3 s_4(\delta + 1)] \\ & - 4\delta k_N^{+2} k_N^- s_1 c_2 [k_S^- s_3 c_4(\delta + 1) + k_S^+ c_3 s_4(\delta - 1)] \\ & - 4\delta k_N^+ k_N^{-2} c_1 s_2 [k_S^- s_3 c_4(\delta - 1) + k_S^+ c_3 s_4(\delta + 1)] \\ & + k_N^+ k_N^- c_1 c_2 \{4k_S^+ k_S^- [(\delta^2 - 1) + c_3 c_4(3\delta^2 + 1)] + 2s_3 s_4(1 - \delta^2)(k_S^{+2} + k_S^{-2})\} \\ & + k_N^{+2} s_1 s_2 \{2k_S^+ k_S^- [(\delta^2 - 1) + c_3 c_4(1 - \delta^2)] + s_3 s_4 [k_S^{+2}(1 - \delta)^2 + k_S^{-2}(1 + \delta)^2]\} \\ & + k_N^{-2} s_1 s_2 \{2k_S^+ k_S^- [(\delta^2 - 1) + c_3 c_4(1 - \delta^2)] + s_3 s_4 [k_S^{+2}(1 + \delta)^2 + k_S^{-2}(1 - \delta)^2]\} \\ & + k_N^+ k_N^- \{4k_S^+ k_S^- [(\delta^2 + 1) + c_3 c_4(\delta^2 - 1)] + 2s_3 s_4(\delta^2 - 1)(k_S^{+2} + k_S^{-2})\}. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Die  $D_i$ ,  $i = 0, 1, 2$ , hängen von den Quasiteilchenenergien und dem Betrag des Wellenvektors  $\hbar\mathbf{k}_\varrho$  parallel zu den Grenzflächen ab. Sie wurden von Wacker mit Hilfe des Computeralgebraprogrammes MATHEMATICA bestimmt [40, 51]. Die trigonometrischen Funktionen in Gl. (C.3) haben im allgemeinen komplexe Argumente.

Wenn die Lösbarkeitsbedingung  $\text{Det}\tilde{M} = 0$  erfüllt ist, können die Verhältnisse  $A_1/A_8 \dots A_7/A_8$  aus dem inhomogenen Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 0 & \Gamma^+ & 0 & \Gamma^- & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma^- & 0 & \Gamma^+ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_S^+ \Gamma^+ & 0 & k_S^- \Gamma^- & 0 & k_N^+ & 0 & 0 & 0 \\ k_S^+ \Gamma^- & 0 & k_S^- \Gamma^+ & 0 & 0 & 0 & k_N^- & 0 \\ \Gamma^+ s_3 & \Gamma^+ c_3 & \Gamma^- s_4 & \Gamma^- c_4 & -\theta s_1 & \theta c_1 & 0 & 0 \\ \Gamma^- s_3 & \Gamma^- c_3 & \Gamma^+ s_4 & \Gamma^+ c_4 & 0 & 0 & -\theta s_2 & 0 \\ k_S^+ \Gamma^+ c_3 & -k_S^+ \Gamma^+ s_3 & k_S^- \Gamma^- c_4 & -k_S^- \Gamma^- s_4 & \theta k_N^+ c_1 & \theta k_N^+ s_1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \theta c_2 \\ 0 \end{pmatrix} A_8, \quad (\text{C.7})$$

das direkt aus dem überbestimmten homogenen Gleichungssystem (C.1) folgt, numerisch berechnet werden. Der verbleibende Koeffizient  $A_8$  wird aus der Normierungsbedingung

(2.44) bestimmt. Mit der Kontaktfläche  $\mathcal{A}$  der Schichten und der Anzahl  $\mathcal{N}$  der Perioden folgt

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_V [|u(\mathbf{r})|^2 + |v(\mathbf{r})|^2] d^3r = 2\mathcal{N}\mathcal{A} \int_{-a/2}^{b/2} [|u(z)|^2 + |v(z)|^2] dz \quad (\text{C.8}) \\
 &= 2\mathcal{N}\mathcal{A} \left\{ \underbrace{\int_{-a/2}^0 [|u(z)|^2 + |v(z)|^2] dz}_{= I_1} + \underbrace{\int_0^{b/2} [|u(z)|^2 + |v(z)|^2] dz}_{= I_2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Die Integrale  $I_1$  und  $I_2$  ergeben

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{-a/2}^0 \{ |A_5|^2 \sin(k_N^+ z) \sin(k_N^{+*} z) + |A_6|^2 \cos(k_N^+ z) \cos(k_N^{+*} z) \\
 &\quad + |A_7|^2 \sin(k_N^- z) \sin(k_N^{-*} z) + |A_8|^2 \cos(k_N^- z) \cos(k_N^{-*} z) \\
 &\quad + 2\text{Re} [A_5 A_6^* \sin(k_N^+ z) \cos(k_N^{+*} z)] + 2\text{Re} [A_7 A_8^* \sin(k_N^- z) \cos(k_N^{-*} z)] \} dz \quad (\text{C.9}) \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ |A_5|^2 \left[ \frac{\sin \left[ (k_N^+ - k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ - k_N^{+*}} - \frac{\sin \left[ (k_N^+ + k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ + k_N^{+*}} \right] \right. \\
 &\quad + |A_6|^2 \left[ \frac{\sin \left[ (k_N^+ - k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ - k_N^{+*}} + \frac{\sin \left[ (k_N^+ + k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ + k_N^{+*}} \right] \\
 &\quad + |A_7|^2 \left[ \frac{\sin \left[ (k_N^- - k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- - k_N^{-*}} - \frac{\sin \left[ (k_N^- + k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- + k_N^{-*}} \right] \\
 &\quad + |A_8|^2 \left[ \frac{\sin \left[ (k_N^- - k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- - k_N^{-*}} + \frac{\sin \left[ (k_N^- + k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- + k_N^{-*}} \right] \\
 &\quad - 2\text{Re} \left[ A_5 A_6^* \left( \frac{1 - \cos \left[ (k_N^+ + k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ + k_N^{+*}} + \frac{1 - \cos \left[ (k_N^+ - k_N^{+*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^+ - k_N^{+*}} \right) \right] \\
 &\quad \left. - 2\text{Re} \left[ A_7 A_8^* \left( \frac{1 - \cos \left[ (k_N^- + k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- + k_N^{-*}} + \frac{1 - \cos \left[ (k_N^- - k_N^{-*}) \frac{a}{2} \right]}{k_N^- - k_N^{-*}} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 I_2 = & \frac{1}{2} \left\{ |A_1|^2 (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left[ \frac{\sin [(k_S^+ - k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{+*}} - \frac{\sin [(k_S^+ + k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{+*}} \right] \right. & (C.10) \\
 & + |A_2|^2 (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left[ \frac{\sin [(k_S^+ - k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{+*}} + \frac{\sin [(k_S^+ + k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{+*}} \right] \\
 & + |A_3|^2 (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left[ \frac{\sin [(k_S^- - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- - k_S^{-*}} - \frac{\sin [(k_S^- + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- + k_S^{-*}} \right] \\
 & + |A_4|^2 (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left[ \frac{\sin [(k_S^- - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- - k_S^{-*}} + \frac{\sin [(k_S^- + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- + k_S^{-*}} \right] \\
 & + 2\text{Re} \left[ A_1 A_2^* (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left( \frac{1 - \cos [(k_S^+ - k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{+*}} + \frac{1 - \cos [(k_S^+ + k_S^{+*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{+*}} \right) \right] \\
 & + 2\text{Re} \left[ A_3 A_4^* (|\Gamma^+|^2 + |\Gamma^-|^2) \left( \frac{1 - \cos [(k_S^- - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- - k_S^{-*}} + \frac{1 - \cos [(k_S^- + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^- + k_S^{-*}} \right) \right] \\
 & + 2\text{Re} \left[ A_1 A_3^* (\Gamma^+ \Gamma^{-*} + \Gamma^- \Gamma^{+*}) \left( \frac{\sin [(k_S^+ - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{-*}} - \frac{\sin [(k_S^+ + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{-*}} \right) \right] \\
 & + 2\text{Re} \left[ A_1 A_4^* (\Gamma^+ \Gamma^{-*} + \Gamma^- \Gamma^{+*}) \left( \frac{1 - \cos [(k_S^+ - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{-*}} + \frac{1 - \cos [(k_S^+ + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{-*}} \right) \right] \\
 & - 2\text{Re} \left[ A_2 A_3^* (\Gamma^+ \Gamma^{-*} + \Gamma^- \Gamma^{+*}) \left( \frac{1 - \cos [(k_S^+ - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{-*}} - \frac{1 - \cos [(k_S^+ + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{-*}} \right) \right] \\
 & \left. + 2\text{Re} \left[ A_2 A_4^* (\Gamma^+ \Gamma^{-*} + \Gamma^- \Gamma^{+*}) \left( \frac{\sin [(k_S^+ - k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ - k_S^{-*}} + \frac{\sin [(k_S^+ + k_S^{-*}) \frac{b}{2}]}{k_S^+ + k_S^{-*}} \right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Aus den sieben Gleichungen des Gleichungssystems (C.7), das numerisch mit Hilfe einer *LU*-Dekomposition und anschließender iterativer Verfeinerung gelöst wird [71], und aus der Normierungsbedingung (C.8) mit den Integralen (C.9) und (C.10) werden die acht Koeffizienten  $A_1 \dots A_8$  bestimmt.

# D

## Eigenwertgleichung und Quasiteilchenwellenfunktion in Andreev–Naherung

---

Im Fall  $\varepsilon_{\text{FN}} = \varepsilon_{\text{FS}} \gg \Delta$  sind die QT–Wellenfunktionen in sehr guter Naherung Linearkombinationen von elektron– und lochartigen Losungen mit nahezu gleichem Impuls, da die Andreev–Reflexion an raumlichen Variationen des Paarpotentials  $\Delta(z)$  den QT–Impuls von der Groenordnung des Fermiimpulses nur wenig andert. Die QT–Wellenfunktionen mit  $z$ –Impulskomponente in positiver,  $\hat{\psi}^+(z)$ , bzw. negativer,  $\hat{\psi}^-(z)$ ,  $z$ –Richtung sind zueinander entartet. Mit den Entwicklungen

$$k_S^\pm = \sqrt{k_{z\text{F}}^2 \pm \frac{2mE}{\hbar^2} \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{E^2}}} \approx k_{z\text{F}} \pm \frac{mE}{\hbar^2 k_{z\text{F}}} \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{E^2}} \equiv k_{z\text{F}} \pm q\delta, \quad (\text{D.1a})$$

$$k_N^\pm = \sqrt{k_{z\text{F}}^2 \pm \frac{2mE}{\hbar^2}} \approx k_{z\text{F}} \pm \frac{mE}{\hbar^2 k_{z\text{F}}} \equiv k_{z\text{F}} \pm q \quad (\text{D.1b})$$

lassen sie sich im Supraleiter schreiben als

$$\hat{\psi}^\pm(z) = D_{1/5} \begin{pmatrix} \Gamma^+ \\ \Gamma^- \end{pmatrix} e^{\pm ik_{z\text{F}}z \pm iq\delta z} + D_{2/6} \begin{pmatrix} \Gamma^- \\ \Gamma^+ \end{pmatrix} e^{\pm ik_{z\text{F}}z \mp iq\delta z} \quad (\text{D.2})$$

mit

$$\Gamma^\pm = \sqrt{1 \pm \delta} \quad (\text{D.3})$$

Das obere Vorzeichen bezieht sich auf die Koeffizienten  $D_1$  und  $D_2$  fur QT–Zustande mit Impuls in  $z$ –Richtung, das untere auf  $D_5$  und  $D_6$  fur QT–Zustande mit Impuls entgegen der  $z$ –Richtung. Die Wellenfunktion im Normalleiter ist

$$\hat{\psi}^\pm(z) = D_{3/7} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\pm i k_{zF} z \pm i q z} + D_{4/8} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\pm i k_{zF} z \mp i q z}. \quad (\text{D.4})$$

Da in Andreev–Naherung kleine Impulsanderungen aufgrund von Andreev–Streuung in den Amplituden der Wellenfunktionen wegen  $q \ll k_{zF}$  und  $q\delta \ll k_{zF}$  vernachlassigt werden, ist es ausreichend, die Stetigkeit (und nicht auch die stetige Differenzierbarkeit) der QT–Wellenfunktionen an den Phasengrenzen zu fordern. Die Anpabedingung

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^\pm(z) \Big|_{0-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^\pm(z) \Big|_{0+\epsilon}, \quad (\text{D.5})$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^\pm(z) \Big|_{b-\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{\psi}^\pm(z) \Big|_{b+\epsilon} \quad (\text{D.6})$$

und die Periodizitatsbedingung (2.5) liefern das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \Gamma^+ & \Gamma^- & -1 & 0 \\ \Gamma^- & \Gamma^+ & 0 & -1 \\ \Gamma^+ e^{\pm i k_{zF} b \pm i q \delta b} & \Gamma^- e^{\pm i k_{zF} b \mp i q \delta b} & -e^{i \kappa d} e^{\mp i k_{zF} a \mp i q a} & 0 \\ \Gamma^- e^{\pm i k_{zF} b \pm i q \delta b} & \Gamma^+ e^{\pm i k_{zF} b \mp i q \delta b} & 0 & -e^{i \kappa d} e^{\mp i k_{zF} a \pm i q a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{1/5} \\ D_{2/6} \\ D_{3/7} \\ D_{4/8} \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{D.7})$$

Aus der Losbarkeitsbedingung dieses Gleichungssystems, d.h. dem Verschwinden der Determinante der  $4 \times 4$ –Matrix, folgen die Eigenwertgleichungen

$$\cos[(\kappa \mp k_{zF}) d] = \cos(qa) \cos(q\delta b) - \frac{1}{\delta} \sin(qa) \sin(q\delta b) \quad (\text{D.8})$$

fur QT–Zustande mit Impuls in bzw. entgegen der  $z$ –Richtung. Die Koeffizienten  $D_1 \dots D_3$  bzw.  $D_5 \dots D_7$  berechnen sich zu

$$D_{1/5} = -\frac{e^{\mp i q \delta b} - e^{i(\kappa \mp k_{zF}) d \pm i q a}}{\Gamma^- (e^{\pm i q \delta b} - e^{\mp i q \delta b})} D_{4/8}, \quad (\text{D.9a})$$

$$D_{2/6} = \frac{e^{\pm i q \delta b} - e^{i(\kappa \mp k_{zF}) d \pm i q a}}{\Gamma^+ (e^{\pm i q \delta b} - e^{\mp i q \delta b})} D_{4/8}, \quad (\text{D.9b})$$

$$D_{3/7} = \Gamma^+ D_{1/5} + \Gamma^- D_{2/6}. \quad (\text{D.9c})$$

Den verbleibenden Koeffizienten  $D_4$  bzw.  $D_8$  erhalt man aus der Normierungsbedingung (2.44). Fur  $E > \Delta$  ergibt sich

$$D_{4/8} = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{N}\mathcal{A}}} \left\{ \frac{a}{2} \left( 1 + \frac{|D_{3/7}|^2}{|D_{4/8}|^2} \right) + b \left( \frac{|D_{1/5}|^2}{|D_{4/8}|^2} + \frac{|D_{2/6}|^2}{|D_{4/8}|^2} \right) \mp \frac{\Delta}{q\alpha E} 2\text{Im} \left[ \frac{D_{1/5} D_{2/6}^*}{|D_{4/8}|^2} \left( 1 - e^{\pm i q \alpha b} \right) \right] \right\}^{-1/2} \quad (\text{D.10})$$

und für  $E < \Delta$  mit  $\alpha = i\delta = \sqrt{\frac{\Delta^2}{E^2} - 1}$

$$\begin{aligned}
 D_{4/8} &= \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{N}\mathcal{A}}} \left\{ \frac{a}{2} \left( 1 + \frac{|D_{3/7}|^2}{|D_{4/8}|^2} \right) + 2b\text{Re} \left( \frac{D_{1/5}D_{2/6}^*}{|D_{4/8}|^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. \pm \frac{|D_{1/5}|^2}{|D_{4/8}|^2} \frac{\Delta}{q\alpha E} \left( 1 - e^{\mp q\alpha b} \right) \mp \frac{|D_{2/6}|^2}{|D_{4/8}|^2} \frac{\Delta}{q\alpha E} \left( 1 - e^{\pm q\alpha b} \right) \right\}^{-1/2}.
 \end{aligned} \tag{D.11}$$

Hier bezeichnet  $\mathcal{A}$  die Kontaktfläche und  $\mathcal{N}$  die Anzahl der Perioden der Multilage.

# E

## Matrixelemente im Fall unterschiedlicher Fermienergien

---

Die QT-Wellenfunktionen des ungestörten Systems sind nach Abschnitt 2.2.1 gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_l^{(0)}(z) &= A_5^l \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \sin(k_l^+ z) + A_6^l \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(k_l^+ z) \\ &+ A_7^l \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin(k_l^- z) + A_8^l \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(k_l^- z),\end{aligned}\quad (\text{E.1})$$

wobei zur Unterscheidung von Anfangs- und Endzustand der Index  $l = \bar{j}$ ,  $f$  verwendet wird. Die Wellenvektoren im Normalleiter  $k_l^\pm \equiv k_{N,l}^\pm$  sind definiert durch

$$k_l^\pm \equiv \sqrt{k_{z\text{FN}}^2 \pm 2mE_l/\hbar^2}, \quad (\text{E.2})$$

$$k_{z\text{FN}} \equiv \sqrt{k_{\text{FN}}^2 - k_Q^2}. \quad (\text{E.3})$$

Die Wellenfunktionen mit negativen Energien  $E_{\bar{j}}$  werden nach Gl. (3.12) durch die Wellenfunktionen mit positiven Energien ausgedrückt:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{\bar{j}}^{(0)}(z) &\xrightarrow{E_{\bar{j}} \rightarrow -E_j} A_7^{j*} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \sin(k_j^- z) + A_8^{j*} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos(k_j^- z) \\ &- A_5^{j*} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin(k_j^+ z) - A_6^{j*} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(k_j^+ z).\end{aligned}\quad (\text{E.4})$$

Bei der Berechnung der Koeffizienten  $A_{1\dots 8}^j$  muß wegen der Periodizitätsbedingung (3.34) in Gl. (C.7)  $\kappa$  durch  $-\kappa$  ersetzt werden. Für das Matricelement  $M_{f\bar{j}}$  findet man nach Gl. (3.45)

$$\begin{aligned}
 M_{f\bar{j}} &= \left( \frac{2m\mathcal{AN}}{\hbar e} \right)^2 \left| \int_{-a}^0 dz \hat{\psi}_f^{(0)\dagger}(z) h(z) \hat{\psi}_{\bar{j}}^{(0)}(z) \right|^2 = \left( \frac{2m\mathcal{AN}}{\hbar e} \right)^2 \left| \int_{-a}^0 dz \times \right. \\
 &\times \left[ A_5^{f*} \sin(k_f^{+*} z) h(z) A_7^{j*} \sin(k_j^{-*} z) + A_5^{f*} \sin(k_f^{+*} z) h(z) A_8^{j*} \cos(k_j^{-*} z) \right. \\
 &+ A_6^{f*} \cos(k_f^{+*} z) h(z) A_7^{j*} \sin(k_j^{-*} z) + A_6^{f*} \cos(k_f^{+*} z) h(z) A_8^{j*} \cos(k_j^{-*} z) \\
 &- A_7^{f*} \sin(k_f^{-*} z) h(z) A_5^{j*} \sin(k_j^{+*} z) - A_7^{f*} \sin(k_f^{-*} z) h(z) A_6^{j*} \cos(k_j^{+*} z) \\
 &- A_8^{f*} \cos(k_f^{-*} z) h(z) A_5^{j*} \sin(k_j^{+*} z) - A_8^{f*} \cos(k_f^{-*} z) h(z) A_6^{j*} \cos(k_j^{+*} z) \left. \right] \Big|^2 \\
 &= (\mathcal{AN})^2 \left| \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^{-*}}{k_f^{+*} + k_j^{-*}} \cos \left[ (k_f^{+*} + k_j^{-*}) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_7^{j*} + A_6^{f*} A_8^{j*} \right\} \right. \\
 &+ \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^{-*}}{k_f^{+*} - k_j^{-*}} \cos \left[ (k_f^{+*} - k_j^{-*}) a \right] \left\{ A_5^{f*} A_7^{j*} + A_6^{f*} A_8^{j*} \right\} \\
 &- \frac{1}{(k_f^{+*} + k_j^{-*})(k_f^{+*} - k_j^{-*})} \left\{ (k_f^{+*2} + k_j^{-*2}) A_6^{f*} A_8^{j*} + 2k_f^{+*} k_j^{-*} A_5^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 &+ \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^{-*}}{k_f^{+*} + k_j^{-*}} \sin \left[ (k_f^{+*} + k_j^{-*}) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_8^{j*} - A_6^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 &+ \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^{-*}}{k_f^{+*} - k_j^{-*}} \sin \left[ (k_f^{+*} - k_j^{-*}) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_8^{j*} + A_6^{f*} A_7^{j*} \right\} \\
 &- \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^{+*}}{k_f^{-*} + k_j^{+*}} \cos \left[ (k_f^{-*} + k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_5^{j*} + A_8^{f*} A_6^{j*} \right\} \\
 &- \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^{+*}}{k_f^{-*} - k_j^{+*}} \cos \left[ (k_f^{-*} - k_j^{+*}) a \right] \left\{ A_7^{f*} A_5^{j*} + A_8^{f*} A_6^{j*} \right\} \\
 &+ \frac{1}{(k_f^{-*} + k_j^{+*})(k_f^{-*} - k_j^{+*})} \left\{ (k_f^{-*2} + k_j^{+*2}) A_8^{f*} A_6^{j*} + 2k_f^{-*} k_j^{+*} A_7^{f*} A_5^{j*} \right\} \\
 &- \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^{+*}}{k_f^{-*} + k_j^{+*}} \sin \left[ (k_f^{-*} + k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_6^{j*} - A_8^{f*} A_5^{j*} \right\} \\
 &- \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^{+*}}{k_f^{-*} - k_j^{+*}} \sin \left[ (k_f^{-*} - k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_6^{j*} + A_8^{f*} A_5^{j*} \right\} \Big|^2.
 \end{aligned} \tag{E.5}$$

Für die anderen Matricelemente  $M_{\bar{f}j}$ ,  $M_{\bar{f}\bar{j}}$ , und  $M_{fj}$  erhält man nach analoger Rechnung

$$\begin{aligned}
 M_{\bar{f}j} = (\mathcal{AN})^2 & \left| \frac{1}{2} \frac{k_f^- - k_j^+}{k_f^- + k_j^+} \cos \left[ \left( k_f^- + k_j^+ \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_5^j + A_8^f A_6^j \right\} \right. \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- + k_j^+}{k_f^- - k_j^+} \cos \left[ \left( k_f^- - k_j^+ \right) a \right] \left\{ A_7^f A_5^j + A_8^f A_6^j \right\} \\
 & + \frac{1}{(k_f^- + k_j^+)(k_f^- - k_j^+)} \left\{ - \left( k_f^{-2} + k_j^{+2} \right) A_8^f A_6^j - 2k_f^- k_j^+ A_7^f A_5^j \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- - k_j^+}{k_f^- + k_j^+} \sin \left[ \left( k_f^- + k_j^+ \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_6^j - A_8^f A_5^j \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- + k_j^+}{k_f^- - k_j^+} \sin \left[ \left( k_f^- - k_j^+ \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_6^j + A_8^f A_5^j \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^+ - k_j^-}{k_f^+ + k_j^-} \cos \left[ \left( k_f^+ + k_j^- \right) a \right] \left\{ -A_5^f A_7^j + A_6^f A_8^j \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^+ + k_j^-}{k_f^+ - k_j^-} \cos \left[ \left( k_f^+ - k_j^- \right) a \right] \left\{ A_5^f A_7^j + A_6^f A_8^j \right\} \\
 & - \frac{1}{(k_f^+ + k_j^-)(k_f^+ - k_j^-)} \left\{ - \left( k_f^{+2} + k_j^{-2} \right) A_6^f A_8^j - 2k_f^+ k_j^- A_5^f A_7^j \right\} \\
 & - \frac{1}{2} \frac{k_f^+ - k_j^-}{k_f^+ + k_j^-} \sin \left[ \left( k_f^+ + k_j^- \right) a \right] \left\{ -A_5^f A_8^j - A_6^f A_7^j \right\} \\
 & \left. - \frac{1}{2} \frac{k_f^+ + k_j^-}{k_f^+ - k_j^-} \sin \left[ \left( k_f^+ - k_j^- \right) a \right] \left\{ -A_5^f A_8^j + A_6^f A_7^j \right\} \right|^2, \tag{E.6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_{\bar{f}\bar{j}} = (\mathcal{AN})^2 & \left| \frac{1}{2} \frac{k_f^- - k_j^{-*}}{k_f^- + k_j^{-*}} \cos \left[ \left( k_f^- + k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_7^{j*} + A_8^f A_8^{j*} \right\} \right. \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- + k_j^{-*}}{k_f^- - k_j^{-*}} \cos \left[ \left( k_f^- - k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ A_7^f A_7^{j*} + A_8^f A_8^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{(k_f^- + k_j^{-*})(k_f^- - k_j^{-*})} \left\{ - \left( k_f^{-2} + k_j^{-*2} \right) A_8^f A_8^{j*} - 2k_f^- k_j^{-*} A_7^f A_7^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- - k_j^{-*}}{k_f^- + k_j^{-*}} \sin \left[ \left( k_f^- + k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_8^{j*} - A_8^f A_7^{j*} \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{k_f^- + k_j^{-*}}{k_f^- - k_j^{-*}} \sin \left[ \left( k_f^- - k_j^{-*} \right) a \right] \left\{ -A_7^f A_8^{j*} + A_8^f A_7^{j*} \right\} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^+ - k_j^{+*}}{k_f^+ + k_j^{+*}} \cos \left[ (k_f^+ + k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_5^f A_5^{j*} + A_6^f A_6^{j*} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^+ + k_j^{+*}}{k_f^+ - k_j^{+*}} \cos \left[ (k_f^+ - k_j^{+*}) a \right] \left\{ A_5^f A_5^{j*} + A_6^f A_6^{j*} \right\} \\
& + \frac{1}{(k_f^+ + k_j^{+*})(k_f^+ - k_j^{+*})} \left\{ - (k_f^{+2} + k_j^{+*2}) A_6^f A_6^{j*} - 2k_f^+ k_j^{+*} A_5^f A_5^{j*} \right\} \quad (E.7) \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^+ - k_j^{+*}}{k_f^+ + k_j^{+*}} \sin \left[ (k_f^+ + k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_5^f A_6^{j*} - A_6^f A_5^{j*} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^+ + k_j^{+*}}{k_f^+ - k_j^{+*}} \sin \left[ (k_f^+ - k_j^{+*}) a \right] \left\{ -A_5^f A_6^{j*} + A_6^f A_5^{j*} \right\} \Big|^2
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
M_{fj} &= (\mathcal{AN})^2 \left| \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^+}{k_f^{+*} + k_j^+} \cos \left[ (k_f^{+*} + k_j^+) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_5^j + A_6^{f*} A_6^j \right\} \right. \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^+}{k_f^{+*} - k_j^+} \cos \left[ (k_f^{+*} - k_j^+) a \right] \left\{ A_5^{f*} A_5^j + A_6^{f*} A_6^j \right\} \\
& + \frac{1}{(k_f^{+*} + k_j^+)(k_f^{+*} - k_j^+)} \left\{ - (k_f^{+*2} + k_j^{+2}) A_6^{f*} A_6^j - 2k_f^{+*} k_j^+ A_5^{f*} A_5^j \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} - k_j^+}{k_f^{+*} + k_j^+} \sin \left[ (k_f^{+*} + k_j^+) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_6^j - A_6^{f*} A_5^j \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{+*} + k_j^+}{k_f^{+*} - k_j^+} \sin \left[ (k_f^{+*} - k_j^+) a \right] \left\{ -A_5^{f*} A_6^j + A_6^{f*} A_5^j \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^-}{k_f^{-*} + k_j^-} \cos \left[ (k_f^{-*} + k_j^-) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_7^j + A_8^{f*} A_8^j \right\} \quad (E.8) \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^-}{k_f^{-*} - k_j^-} \cos \left[ (k_f^{-*} - k_j^-) a \right] \left\{ A_7^{f*} A_7^j + A_8^{f*} A_8^j \right\} \\
& + \frac{1}{(k_f^{-*} + k_j^-)(k_f^{-*} - k_j^-)} \left\{ - (k_f^{-*2} + k_j^{-2}) A_8^{f*} A_8^j - 2k_f^{-*} k_j^- A_7^{f*} A_7^j \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} - k_j^-}{k_f^{-*} + k_j^-} \sin \left[ (k_f^{-*} + k_j^-) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_8^j - A_8^{f*} A_7^j \right\} \\
& + \frac{1}{2} \frac{k_f^{-*} + k_j^-}{k_f^{-*} - k_j^-} \sin \left[ (k_f^{-*} - k_j^-) a \right] \left\{ -A_7^{f*} A_8^j + A_8^{f*} A_7^j \right\} \Big|^2.
\end{aligned}$$

Die Koeffizienten  $A_1^L \dots A_8^L$ , die in die Gleichungen (E.5)–(E.8) eingehen, werden nach Anhang C bestimmt.

# Literaturverzeichnis

---

- [1] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823 (1964), [Sov. Phys.–JETP **19**, 1228 (1964)].
- [2] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 655 (1965), [Sov. Phys.–JETP **22**, 455 (1966)].
- [3] A. P. van Gelder, Phys. Rev. **181**, 787 (1969).
- [4] R. Kümmel, Phys. Rev. B **3**, 784 (1971).
- [5] A. Hahn, Physica B **165&166**, 1065 (1990).
- [6] Y. Tanaka und M. Tsukada, Phys. Rev. B **44**, 7578 (1991).
- [7] I. K. Schuller, Phys. Rev. Lett. **44**, 1597 (1980).
- [8] K. Kanoda, H. Mazaki, T. Yamada, N. Hosoi und T. Shinjo, Phys. Rev. B **33**, 2052 (1986).
- [9] H. C. Yang, C. H. Nien, H. H. Sung und C. H. Chen, J. Low Temp. Phys. **75**, 243 (1989).
- [10] S. T. Ruggiero, T. W. Barbee und M. R. Beasley, Phys. Rev. Lett. **45**, 1299 (1980).
- [11] S. N. Song, B. Y. Jin, F. L. Du und J. B. Ketterson, Superlattices and Microstructures **3**, 485 (1987).
- [12] W. Krech, P. Seidel und H.-G. Meyer (Hrsg.), *Superconductivity and Cryoelectronics – Proceedings of the 22nd International Symposium on Superconductivity and Cryoelectronics* (World Scientific, Singapore, 1991).
- [13] T. D. Clark, R. J. Prance und A. D. C. Grassie, J. Appl. Phys. **51**, 2736 (1980).
- [14] M. Ohta und T. Matsui, Physica C **185–189**, 2581 (1991).
- [15] K. Setsune, A. Odagawa, T. Satoh, H. Adachi und K. Wasa, in *Superconducting superlattices and multilayers*, Band 2157 von *SPIE–Proceedings series* (Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, Washington, 1994), S. 173–179.
- [16] H. Tabata, T. Kawai und S. Kawai, Appl. Phys. Lett. **58**, 1443 (1991).

- [17] T. Kawai, T. Matsumoto, M. Kanai, H. Tabata, K. Horiuchi und S. Kawai, *Physica C* **185–189**, 198 (1991).
- [18] H. Tabata, T. Kawai und S. Kawai, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2633 (1993).
- [19] R. Li, R. Feile, G. Jakob, T. Hahn und H. Adrian, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3804 (1993).
- [20] R. Kleiner, F. Steinmeyer, G. Kunkel und P. Müller, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2394 (1992).
- [21] B. D. Josephson, in *Superconductivity I*, Hrsg. R. D. Parks (M. Dekker, New York, 1969), S. 423–448.
- [22] R. Kleiner und P. Müller, *Phys. Rev. B* **49**, 1327 (1994).
- [23] P. Müller, *Festvortrag anlässlich der Verleihung des Walter–Schottky–Preises der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, *Phys. Bl.* **50**, 711 (1994).
- [24] M. Tanaka, S. Takebayashi, M. Hashimoto, S. Kashiwaya, F. Hirayama und M. Koyanagi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **32**, 35 (1993).
- [25] L. C. Brunel, S. G. Louie, G. Martinez, S. Labdi und H. Raffy, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1346 (1991).
- [26] M. Boekholt, M. Hoffmann und G. Güntherodt, *Physica C* **175**, 127 (1991).
- [27] L. Buschmann, M. Boekholt und G. Güntherodt, *Physica C* **203**, 68 (1992).
- [28] A. M. Rao, P. C. Eklund, G. W. Lehmann, D. W. Face, G. L. Doll, G. Dresselhaus und M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **42**, 193 (1990).
- [29] K. Kamarás, S. L. Herr, C. D. Porter, N. Tache, D. B. Tanner, S. Etemand, T. Venkatesan, E. Chase, A. Inam, X. D. Wu, M. S. Hedge und B. Dutta, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 84 (1990).
- [30] M. J. Sumner, J. T. Kim und T. R. Lemberger, *Phys. Rev. B* **47**, 12248 (1993).
- [31] J. T. Kim, T. R. Lemberger, S. R. Foltyn und X. Wu, *Phys. Rev. B* **49**, 15970 (1994).
- [32] Z. Schlesinger, R. T. Collins, F. Holtzberg, C. Feild, G. Koren und A. Gupta, *Phys. Rev. B* **41**, 11237 (1990).
- [33] M. Lippert, J. P. Ströbel, G. Saemann-Ischenko, S. Orbach, S. Hensen, G. Müller, H. Piel, J. Schützmann, K. F. Renk, B. Roas und W. Gieres, *Physica C* **185–189**, 1041 (1991).
- [34] J. Schützmann, S. Tajima, S. Miyamoto und S. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 174 (1994).
- [35] C. C. Homes, T. Timusk, R. Liang, D. A. Bonn und W. N. Hardy, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1645 (1993).

- [36] J. J. Chang und D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **40**, 4299 (1989).
- [37] Y. N. Gartstein, M. J. Rice und D. van der Marel, Phys. Rev. B **49**, 6360 (1994).
- [38] H. Chen, Phys. Rev. B **71**, 2304 (1993).
- [39] U. Schüssler und R. Kümmel, Phys. Rev. B **47**, 2754 (1993).
- [40] H. Plehn, O.-J. Wacker und R. Kümmel, Phys. Rev. B **49**, 12140 (1994).
- [41] G. Kieselmann, Phys. Rev. B **35**, 6762 (1987).
- [42] M. Ashida, S. Aoyama, J. Hara und K. Nagai, Phys. Rev. B **40**, 8673 (1989).
- [43] M. Ashida, J. Hara und K. Nagai, Phys. Rev. B **45**, 828 (1992).
- [44] C. Bruder, Phys. Rev. B **41**, 4017 (1990).
- [45] A. V. Zaitsev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **86**, 1742 (1984), [Sov. Phys.–JETP **59**, 1015 (1984)].
- [46] B. Ashauer, G. Kieselmann und D. Rainer, J. Low Temp. Phys. **63**, 349 (1986).
- [47] J. Hara und K. Nagai, J. Low Temp. Phys. **72**, 407 (1988).
- [48] A. Golubov, in *Superconducting superlattices and multilayers*, Band 2157 von *SPIE–Proceedings series* (Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, Washington, 1994).
- [49] J. Bardeen, R. Kümmel, A. E. Jacobs und L. Tewordt, Phys. Rev. **187**, 556 (1969).
- [50] H. Plehn, U. Gunsenheimer und R. Kümmel, J. Low Temp. Phys. **83**, 71 (1991).
- [51] O.-J. Wacker, Dissertation, Universität Würzburg, 1993.
- [52] R. Kümmel, U. Schüssler, U. Gunsenheimer und H. Plehn, Physica C **185-189**, 221 (1991).
- [53] J. D. Shore, M. Huang, A. T. Dorsey und J. P. Sethna, Phys. Rev. Lett. **62**, 3089 (1989).
- [54] J. Hara, M. Ashida und K. Nagai, Phys. Rev. B **47**, 11263 (1993).
- [55] R. Kümmel und H. Plehn, in *Weak Superconductivity*, Hrsg. Š. Beňačka, P. Seidel und V. Štrbík (Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, 1994), S. 255–266.
- [56] U. Gunsenheimer, U. Schüssler und R. Kümmel, Phys. Rev. B **49**, 6111 (1994).
- [57] P. G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys* (Benjamin, New York/Amsterdam, 1966).

- [58] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov und I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics* (Dover, New York, 1963).
- [59] V. Niño und R. Kümmel, Phys. Rev. B **29**, 3957 (1984).
- [60] R. Kümmel, Z. Phys. **218**, 472 (1969).
- [61] V. C. Niño, Dissertation, Universität Würzburg, 1982.
- [62] H. Aberle, Diplomarbeit, Universität Würzburg, 1985.
- [63] J. N. Hodgson, *Optical absorption and dispersion in solids* (Chapman and Hall, London, 1970).
- [64] J. C. Phillips, in *The fundamental optical spectra of solids*, Band 18 von *Solid State Physics* (Academic Press, New York, 1966), S. 56–164.
- [65] H. Aberle und R. Kümmel, Phys. Rev. Lett. **57**, 3206 (1986).
- [66] E. L. Yuh, J. G. E. Harris, E. G. Gwinn, K. C. Wong und H. Kroemer, *Far-infrared studies of InAs quantum wells with Nb electrodes*, Proceedings of the '95 conference on narrow gap semiconductors, Santa Fé, 1995.
- [67] H. Kroemer, Private Mitteilung, 1995.
- [68] L. N. Oliveira, E. K. U. Gross und W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **60**, 2430 (1988).
- [69] O.-J. Wacker, R. Kümmel und E. K. U. Gross, Phys. Rev. Lett. **73**, 2915 (1994).
- [70] E. V. Thuneberg, J. Kurkijärvi und D. Rainer, Phys. Rev. B **29**, 3913 (1984).
- [71] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).

# Dank

---

Ich danke Herrn Prof. Dr. R. Kümmel für die Themenstellung in einem Fachgebiet, das sich in jüngster Zeit, nicht zuletzt aufgrund der Entdeckung der Hochtemperatursupraleiter, eines rapide ansteigenden Interesses erfreut, und für eine optimale Betreuung des Promotionsprojektes.

Mein Dank gilt der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die zeitweise finanzielle Unterstützung und dem Rechenzentrum der Universität Würzburg für die Bereitstellung der Rechenanlagen und für meine berufliche Absicherung.

Für hilfreiche Diskussionen danke ich der gesamten Arbeitsgruppe, vor allem Dr. Uwe Gunzenheimer und Dr. Oliver Wacker für eine enge und fruchtbare Zusammenarbeit.

# Lebenslauf

---

Name und  
Anschrift: Hartmut Plehn  
Friedenstr. 19  
97072 Würzburg

Geboren: 30.04.64 in Karlstadt am Main

Familienstand: Verheiratet, 2 Kinder

Schulbildung: 1970–1974 Besuch der Grundschule Gössenheim  
1974–1983 Besuch des Johann–Schöner–Gymnasiums Karlstadt

Wehrdienst: 1983–1984 in Wildflecken

Physikstudium: 1984–1990 an der Universität Würzburg  
1987–1988 Gastaufenthalt an der State University of New York at Buffalo: Abschluß des MA  
27.04.90 Diplom; Titel der Diplomarbeit: *Quasiteilchenwellenfunktionen und selbstkonsistente Paarpotentiale in inhomogenen Supraleitern*

Wissenschaftliche  
Tätigkeit: 1989–1990 Wissenschaftliche Hilfskraft am Physikalischen Institut der Universität Würzburg  
1990–1991 Wissenschaftlicher Mitarbeiter (DFG) von Prof. Dr. Kümmel; Titel des Promotionsprojektes: *Zustandsdichten und Strom–Spannungs–Charakteristiken inhomogener Supraleiter*  
seit 1991 Wissenschaftlicher Angestellter im Rechenzentrum der Universität Würzburg

# Schriftenverzeichnis

---

1. H. Plehn und R. Kümmel, “Andreev scattering and density of states in weakly coupled superconductors”, *Physica B* **165&166**, 1617 (1990).
2. R. Kümmel, U. Gunsenheimer, H. Plehn und R. Nicolsky, “Density of states and charge transport in SNS junctions”, in *Transport Properties of Superconductors*, Hrsg. R. Nicolsky (World Scientific, Singapore, 1990), S. 344-356.
3. R. Kümmel, U. Schüssler, U. Gunsenheimer und H. Plehn, “Andreev scattering in weak links”, *Physica C* **185-189**, 221 (1991).
4. H. Plehn, U. Gunsenheimer und R. Kümmel, “Subgap peak and Tomasch–McMillan–Anderson oscillations in the density of states of SNS bridges”, *J. Low Temp. Phys.* **83**, 71 (1991).
5. U. Gunsenheimer, H. Plehn und R. Kümmel, “Multiple Andreev reflections, density of states and current voltage characteristics of Nb junctions”, in *Superconductivity and Cryoelectronics*, Hrsg. W. Krech, P. Seidel und H.-G. Meyer (World Scientific, Singapore, 1991), S. 160-164.
6. H. Plehn, O.-J. Wacker, und R. Kümmel, “Electronic structure of superconducting multilayers”, *Phys. Rev. B* **49**, 12140 (1994).
7. R. Kümmel und H. Plehn, “Off-diagonal scattering and superconducting multilayers”, in *Weak superconductivity*, Hrsg. Š. Beňačka, P. Seidel und V. Štrbík (Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, 1994), S. 255-266.