

MIKROSKOPISCHE THEORIE
GEOMETRISCHER JOSEPHSON-KONTAKTE

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
Andreas Gumann
aus Tübingen



2009

Tag der mündlichen Prüfung: 13. Mai 2009

Dekan: Prof. Dr. Wolfgang Knapp

1. Berichterstatter: Prof. Dr. Nils Schopohl
2. Berichterstatter: Prof. Dr. Thomas Dahm
3. Berichterstatter: Prof. Dr. Manfred Sigrist

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Geometrische Josephson-Kontakte	9
2.1	Der Josephson-Effekt	9
2.2	Weak links und geometrische Josephson-Kontakte	11
2.3	Theoretische Modelle für Geometrische Josephson-Kontakte	16
2.3.1	Zum Vergleich: Tunnelkontakt nach Ambegaokar und Baratoff	16
2.3.2	Punktkontakt nach Aslamazov und Larkin	17
2.3.3	Mikrobrücke nach Kulik und Omelyanchouk	19
2.3.4	Ballistische Mikrobrücke nach Zareyan, Kolesnichenko u. Omelyanchouk	20
2.4	π -Josephson-Kontakte	22
3	Mikroskopische Theorie geometrischer Josephson-Kontakte	25
3.1	Modellgeometrie	25
3.2	Mikroskopische Eilenberger-Theorie	26
3.2.1	Gap- und Stromgleichung	26
3.2.2	Maxwell-Gleichungen und Vektorpotential	28
3.2.3	Riccati-Parametrisierung	28
3.2.4	Lokale Zustandsdichte	31
3.3	Lösungsverfahren	31
3.3.1	Iteratives Lösungsschema	31
3.3.2	Auswertung von Gap- und Stromgleichung	33
3.3.3	Berechnung des Vektorpotentials	33
3.3.4	Periodische Fortsetzung	34
3.4	Selbstkonsistente Lösungen	36
3.5	Freie Energie eines Josephson-Kontaktes	38
3.6	Numerische Methoden	39
3.6.1	Diskretisierung der Geometrie	40
3.6.2	Integration der Riccati-Gleichungen	40
3.6.3	Numerische Auswertung von Gap- und Stromgleichung	42
3.6.4	Berechnung des Vektorpotentials und des Magnetfeldes	45
3.6.5	Parallelisierung	46
3.6.6	Einheiten	47
3.7	Implementierung	49
3.8	Vergleich mit bekannten Resultaten	50
4	s-Wellen-Supraleiter: Mikrobrücke	53
4.1	Der Josephson-Effekt an Engstellen-Kontakten	53
4.2	Temperaturabhängigkeit	64
4.3	Einfluss geometrischer Parameter	71
4.4	Abschirmungseffekte	75
4.5	Einfluss eines externen Magnetfeldes	78

5	<i>d</i>-Wellen-Supraleiter: Mikrobrücke	87
5.1	Exemplarische selbstkonsistente Ergebnisse	88
5.2	Einfluss der Temperatur	92
5.3	Lokale Zustandsdichte und intrinsische Phasendifferenz	97
5.4	Einfluss der Breite der Mikrobrücke	102
5.5	Einfluss der Länge der Mikrobrücke	106
5.6	Einfluss der Orientierung der <i>d</i> -Welle	110
5.7	0- π -Phasendiagramme	112
6	<i>d</i>-Wellen-Supraleiter: Geometrischer π-Josephson-Kontakt	119
6.1	Konzept des geometrischen π -Josephson-Kontaktes	120
6.2	Repräsentative selbstkonsistente Ergebnisse	121
6.3	Geometrie und Temperatur: selbstkonsistente Ergebnisse	124
6.4	Geometrie und Temperatur: Stufen-Modell	127
6.5	0- π -Phasendiagramme	136
6.6	Realisierbarkeit und mögliche Anwendungen	139
7	Zusammenfassung und Ausblick	143
A	Selbstkonsistente Lösungen und Stromerhaltung	147
B	Divergenzfreiheit des Vektorpotentials	149
C	Freie Energie eines Josephson-Kontaktes	151
D	Lösung der Riccati-Gleichungen mit konstanten Koeffizienten	159
	Literaturverzeichnis	161

Kapitel 1

Einleitung

Seit seiner Vorhersage durch Brian D. Josephson im Jahr 1962 [1] stellt der Josephson-Effekt einen zentralen Aspekt bei der Untersuchung des supraleitenden Zustandes dar. Der Josephson-Effekt ist einerseits von grundlegendem Interesse, da sich in diesem Effekt wichtige Eigenschaften makroskopischer quantenmechanischer Systeme manifestieren und das Studium des Josephson-Effektes wesentlich zum Verständnis der Supraleitung beiträgt. Gleichzeitig besitzt der Josephson-Effekt große technische Bedeutung, da viele Anwendungen der Supraleitung auf der gezielten Ausnutzung dieses Effektes beruhen.

Der Josephson-Effekt tritt immer dann auf, wenn zwei Supraleiter über einen Kontaktbereich gekoppelt sind, in dem schwache Supraleitung vorliegt (P. W. Anderson 1964 [2]). Als schwache Supraleitung wird hierbei bezeichnet, wenn in einem räumlich begrenzten Gebiet einer oder mehrere kritische Parameter wesentlich kleiner sind als in einem ausgedehnten Supraleiter. Die kritischen Parameter können dabei durch die kritischen Ströme bzw. Stromdichten gegeben sein sowie durch das kritische Magnetfeld, das zur Unterdrückung der Supraleitung führt. Auch die Sprungtemperatur, oberhalb derer die Supraleitung verschwindet, kann einen kritischen Parameter im Sinne schwacher Supraleitung darstellen.

Ein reduzierter kritischer Strom bzw. eine reduzierte kritische Stromdichte können auf verschiedenste Arten erzielt werden. Das klassische System, für das Brian D. Josephson den nach ihm benannten Effekt vorhergesagt hat, besteht aus einer Tunnelbarriere, die zwei ausgedehnte Supraleiter verbindet. In ähnlicher Art und Weise führt eine normalleitende Barriere oder eine halbleitende Barriere zu einer lokal verringerten kritischen Stromdichte. Auch an Korngrenzen eines supraleitenden Materials ist die kritische Stromdichte unter Umständen stark reduziert. Eine Engstelle des Supraleiters bedingt durch die starke Konzentration der Ströme lokal hohe Stromdichten und damit einen reduzierten kritischen Strom.

Engstellen, die zu reduzierten kritischen Strömen führen, können in Form eines Punktkontaktes realisiert werden, der klassisch durch das Aufpressen einer supraleitenden Spitze auf einen ausgedehnten Supraleiter entsteht. Eine andere Art der Engstelle wird durch die Strukturierung eines supraleitenden Films in der Form einer Mikrobrücke oder Dayem-Brücke erzeugt (P. W. Anderson und A. H. Dayem 1964 [3]), bei der die Breite des Films lokal verringert ist. Ist zusätzlich im Bereich der Mikrobrücke die Dicke des Films verringert, so spricht man von einer Brücke mit variabler Dicke.

Mikrobrücken weisen einen schwachen elektrischen Kontakt zwischen den Elektroden auf, da sie aus einem durchgehenden supraleitenden Material bestehen. Josephson-Kontakte, bei denen ein schwacher elektrischer Kontakt zwischen den beiden Elektroden besteht, werden oft als *weak links* bezeichnet (K. K. Likharev 1979 [4]). Diese Charakterisierung grenzt *weak links* von Tunnelkontakten ab, bei denen die beiden supraleitenden Elektroden durch eine dünne isolierende Schicht getrennt sind. Typischerweise sind die Widerstände von *weak links* im Normalzustand wesentlich geringer als die von Tunnelkontakten.

Mikrobrücken stellen eine besondere Art des Josephson-Kontaktes dar, da bei derartigen Systemen keine Übergänge zwischen verschiedenen Materialien involviert sind. Der Josephson-Effekt wird bei Mikrobrücken einzig durch die Geometrie eines durchgehenden supraleitenden Materials hervorgerufen. Die Kopplung der beiden ausgedehnten Bereiche des supraleitenden Materials wird dabei durch die genaue Geometrie der Mikrobrücke bestimmt. Die Stärke der Kopplung ihrerseits bedingt die Amplitude des kritischen Stromes, also des maximalen Suprastromes, der über die Mikrobrücke fließen kann. Ist die laterale Ausdehnung der Mikrobrücke klein bzw. die Länge groß im Vergleich zur Kohärenzlänge des Materials, so sind die beiden Elektroden schwach gekoppelt und der kritische Strom ist unter Umständen sehr klein. Mit zunehmender lateraler Ausdehnung bzw. abnehmender Länge der Mikrobrücke nimmt die Kopplung zu. Für Mikrobrücken, deren Breite deutlich größer ist als die Kohärenzlänge des Materials, findet ein Übergang zu normaler Supraleitung statt. Dabei wächst mit zunehmender Kopplung der Elektroden der kritische Strom an und geht kontinuierlich in den kritischen Strom eines ausgedehnten Supraleiters über.

Neben ihrer Bedeutung für die Untersuchung der grundlegenden Eigenschaften makroskopischer quantenmechanischer Systeme sind geometrische Josephson-Kontakte in Form von Mikrobrücken von Bedeutung für verschiedenste Bereiche der Supraleitungselektronik. Dieses Interesse resultiert aus der Möglichkeit, dass derartige Kontakte durch die Strukturierung eines supraleitenden Filmes erzeugt werden können und folglich eine nahezu beliebige Platzierung sowie eine dichte Anordnung einer großen Anzahl von Kontakten auf einem einzigen Substrat denkbar sind. Des Weiteren weisen geometrische Josephson-Kontakte charakteristische Eigenschaften auf, die sie für bestimmte Anwendungen besonders interessant machen. Zunächst sind die sehr kleinen Widerstände im Normalzustand sowie die kleinen intrinsischen Kapazitäten zu nennen, die zusammen zu überdämpften Kontakten führen. Darüber hinaus bieten die nicht-sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehungen bei tiefen Temperaturen Vorteile für hochempfindliche supraleitende Magnetometer (V. I. Shnyrkov und S. I. Melnik 2007 [20]). Auch weisen geometrische Josephson-Kontakte aufgrund der kleinen Widerstände im Normalzustand sowie aufgrund der Abwesenheit von Grenzflächen und Tunnelbarrieren günstige Rauscheigenschaften auf (siehe z. B. L. Hao *et al.* 2008 [25]).

Fortschritte bei der Strukturierung von supraleitenden Dünnschichten ermöglichen es, definierte geometrische Josephson-Kontakte zu erzeugen. Hierbei kommen sowohl lithographische als auch rasternde Verfahren zum Einsatz. Supraleitende Elektronik, die auf geometrischen Josephson-Kontakten basiert, eignet sich in besonderem Maße für eine starke Miniaturisierung, da die verwendeten Josephson-Kontakte, die die Grundelemente der Supraleitungselektronik darstellen, keine Größenbeschränkungen bedingen. Die Miniaturisierung ist folglich nur durch die Strukturierungsmethoden und die gewünschte Anwendung limitiert. Aufgrund der Miniaturisierbarkeit geometrischer Josephson-Kontakte werden bereits heute supraleitende Quanteninterferometer, die auf geometrischen Josephson-Kontakten basieren, für hochempfindliche Messungen schwacher lokalisierter magnetischer Momente verwendet (siehe u. a. A. G. P. Troeman *et al.* 2007 [21] und 2008 [22]).

Die laterale Ausdehnung einer Engstelle, die einen geometrischen Josephson-Kontakt ergibt, muss in der Größenordnung der Kohärenzlänge des supraleitenden Materials oder darunter liegen. Entsprechend ist die Realisierung geometrischer Josephson-Kontakte basierend auf konventionellen Supraleitern aufgrund der vergleichsweise großen Kohärenzlänge dieser Materialien bereits 1964 durch verschiedene Forschergruppen gelungen (P. W. Anderson und A. H. Dayem [3], J. Lambe *et al.* [5], R. D. Parks *et al.* [6]). An einer Verbesserung der Verfahren zur verlässlichen Herstellung von Mikrobrücken basierend auf konventionellen Supraleitern wird aber auch heute noch intensiv gearbeitet (siehe u. a. [15–19, 21, 22, 25] sowie Abschnitt 2.2 für Details zu diesen Arbeiten). Hochtemperatur-Supraleiter aus der Klasse der Kuprate sind aufgrund der hohen Sprungtemperaturen für Anwendungen von großem Interesse. Da aber die Kohärenzlänge dieser Materialien in der Größenordnung einiger Nanometer liegt, stellt die Strukturierung geometrischer Josephson-Kontakte eine technische Herausforderung dar. In jüngster Zeit wurden trotz dieser hohen technischen Anforderungen von verschiedenen Gruppen geometrische Josephson-Kontakte basierend auf Hochtemperatur-

Supraleitern aus der Klasse der Kuprate realisiert (siehe z. B. U. Büttner *et al.* 2007 [23], A. A. O. Elkaseh *et al.* 2007 [24], K. Kajino *et al.* 2008 [26]).

Die Hochtemperatur-Supraleiter aus der Klasse der Kuprate unterscheiden sich von den konventionellen Supraleitern nicht nur durch die höhere Sprungtemperatur und die kleinere Kohärenzlänge, sondern auch durch die unkonventionelle Symmetrie der Paarwechselwirkung (D. J. Van Harlingen 1995 [48], C. C. Tsuei und J. R. Kirtley 2000 [49]). Inzwischen gilt als gesichert, dass die Paarwechselwirkung in den Kupraten d -Wellen-Symmetrie aufweist, während in den konventionellen Supraleitern eine isotrope oder s -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung vorliegt. Die Auswirkungen der d -Wellen-Symmetrie auf den Josephson-Effekt an Korngrenzen des Materials wurden von verschiedenen Gruppen sowohl theoretisch [50–54] als auch experimentell [55–58] im Detail untersucht. Auswirkungen auf den Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten wurden im Gegensatz dazu bislang nicht studiert. Dass die d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung auch die Eigenschaften geometrischer Josephson-Kontakte stark beeinflusst und insbesondere zum Auftreten negativer Kopplung, intrinsischer Phasendifferenzen sowie zu π -Josephson-Kontakten (L. N. Bulaevskiĭ *et al.* 1977 [9]) und φ -Josephson-Kontakten (R. G. Mints 1998 [10], A. Buzdin *et al.* 2003 [11], E. Goldobin *et al.* 2007 [12]) führen kann, blieb bislang unbemerkt.

Da geometrische Josephson-Kontakte aus einem durchgehenden supraleitenden Material bestehen, stellen sie ein klar definiertes Modellsystem dar, an dem der Josephson-Effekt untersucht werden kann. Hierbei kann insbesondere der Übergang von schwacher Supraleitung zu normaler Supraleitung untersucht werden. Die Abschwächung des kritischen Stromes gegenüber dem eines ausgedehnten Supraleiters variiert mit der Geometrie, und damit auch die Stärke der Kopplung der beiden Elektroden. Eine theoretische Beschreibung kann diesen Übergang von schwacher Supraleitung und schwacher Kopplung zu normaler Supraleitung und starker Kopplung allerdings nur dann erfassen, wenn die tatsächliche Geometrie einer ausgedehnten Engstelle berücksichtigt wird.

Von A. G. Aslamazov und A. I. Larkin wurde 1969 erstmals theoretisch beschrieben, dass ein Punktkontakt das Verhalten eines Tunnel-Josephson-Kontaktes zeigen kann [29]. Von theoretischer Seite wurden geometrische Josephson-Kontakte jedoch bislang zumeist im Rahmen von einfachen Modellen für die Geometrie der Engstelle sowie für die Ortsabhängigkeit des Paarpotentials betrachtet. Dabei wurden punktförmige Kontakte im gesamten Temperaturbereich von $T = 0$ bis zur kritischen Temperatur T_c untersucht (I. O. Kulik und A. N. Omelyanchouk 1977 [34, 35]) und es wurden Lösungen für eine eindimensionale Mikrobrücke im Temperaturbereich nahe T_c berechnet (M. Zareyan *et al.* 1999 [36]).

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird der Gleichstrom-Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten erstmals anhand einer realistischen zweidimensionalen Modellgeometrie für eine Mikrobrücke untersucht. Für diese Modellgeometrie werden die Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie der Supraleitung selbstkonsistent berechnet. Mit den selbstkonsistenten Lösungen für die Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie werden alle relevanten und experimentell zugänglichen Größen im gesamten Temperaturbereich von $T = 0$ bis T_c bestimmt. Dabei werden erstmals auch Magnetfelder selbstkonsistent berücksichtigt, und zwar sowohl äußere Magnetfelder als auch die, die durch die in der Geometrie fließenden Ströme selbst hervorgerufen werden.

Die selbstkonsistenten Lösungen für die Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie für zweidimensionale Geometrien von Mikrobrücken erlauben die detaillierte Untersuchung der Eigenschaften derartiger Josephson-Kontakte. Dabei können aufgrund der selbstkonsistenten Berücksichtigung der lokalen Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials auch quantitative Aussagen gemacht werden. Die Berücksichtigung der tatsächlichen Geometrie der Mikrobrücken ermöglicht die Untersuchung des Überganges von schwacher Kopplung der Elektroden bei punktförmigen Engstellen zu starker Kopplung bei ausgedehnten Mikrobrücken. Gleichzeitig können mit den erarbeiteten Methoden die Auswirkungen unkonventioneller Symmetrie der Paarwechselwirkung auf den Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten im Detail untersucht werden.

In Kapitel 2 dieser Arbeit wird der Josephson-Effekt beschrieben und es wird ein Überblick über die zuvor genannten theoretischen Modelle und experimentellen Arbeiten zu geometrischen Josephson-Kontakten gegeben. Des Weiteren werden bislang existierende Realisierungen von π -Josephson-Kontakten rekapituliert sowie Eigenschaften und Anwendungen derartiger Josephson-Kontakte skizziert.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methoden zur Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der mikroskopischen Eilenberger-Theorie werden in Kapitel 3 vorgestellt. Dazu werden die Eilenberger-Gleichungen eingeführt, es wird das entwickelte Lösungsverfahren beschrieben und es werden die verwendeten numerischen Methoden dargestellt.

Diese Methoden werden in Kapitel 4 zunächst verwendet, um geometrische Josephson-Kontakte bestehend aus konventionellen Supraleitern mit s -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung zu untersuchen. Mit Hilfe der beschriebenen Methoden werden Strom-Phasen-Beziehungen von Mikrobrücken berechnet und aus diesen die kritischen Ströme extrahiert. Um die Relevanz der selbstkonsistenten Berechnungen nachzuweisen, werden diese mit einem nicht-selbstkonsistenten Modell für die Ortsabhängigkeit des Paarpotentials verglichen. Die selbstkonsistent berechneten Werte für die kritischen Ströme werden durch den Vergleich mit experimentellen Daten bestätigt. Des Weiteren werden die Mechanismen, die zum Auftreten des Josephson-Effektes an geometrischen Josephson-Kontakten führen, durch die Betrachtung der Amplitude und der Phase des Paarpotentials, der Stromdichte sowie der lokalen Zustandsdichte identifiziert. Schließlich werden Abschirmungseffekte sowie der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes untersucht.

In Kapitel 5 werden in dieser Arbeit erstmals die Auswirkungen der d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung auf den Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten untersucht und Unterschiede zum Fall der s -Wellen-Symmetrie herausgearbeitet. Es zeigt sich dabei, dass die Unterschiede zwischen geometrischen Josephson-Kontakten aus Supraleitern mit s - und d -Wellen-Symmetrie spektakulär sind: im Fall der d -Wellen-Symmetrie sind negative Kopplung, endliche intrinsische Phasendifferenzen im Grundzustand und damit π -Josephson-Kontakte sowie φ -Josephson-Kontakte möglich. Die Mechanismen, die zum Auftreten von gebundenen Andreev-Zuständen führen, die rückfließende Quasiteilchenströme tragen und damit für die intrinsischen Phasendifferenzen verantwortlich sind, werden anhand der Ergebnisse für die lokale Zustandsdichte nachgewiesen.

In Kapitel 6 wird eine spezielle Geometrie für einen Engstellen-Josephson-Kontakt in einem d -Wellen-Supraleiter vorgeschlagen, bei der intrinsische Phasendifferenzen bei vergleichsweise großen Abmessungen der Engstelle in besonders robuster Art und Weise auftreten. Dieser sogenannte geometrische π -Josephson-Kontakt eröffnet eine neue Möglichkeit zur Erzeugung von π -Josephson-Kontakten. Die Eigenschaften dieser neuen Art des π -Josephson-Kontaktes werden anhand selbstkonsistenter Lösungen für die Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie sowie anhand eines nicht-selbstkonsistenten Stufenmodells für das Paarpotential im Detail untersucht und es werden der experimentelle Nachweis sowie mögliche Anwendungen für supraleitende Quanteninterferometer diskutiert.

In Kapitel 7 werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und es wird ein Ausblick auf weiterführende physikalische Fragestellungen sowie technische Anwendungen gegeben.

Kapitel 2

Geometrische Josephson-Kontakte

2.1 Der Josephson-Effekt

Sind zwei Supraleiter gekoppelt, so besitzt der Strom I über die Kontaktstelle eine Komponente, die nicht von der Spannung über den Kontakt abhängt, sondern von der eichinvarianten Differenz der Phasen der makroskopischen quantenmechanischen Wellenfunktionen der beiden Supraleiter γ :

$$I = I(\gamma)$$

Die eichinvariante Phasendifferenz γ ist dabei gegeben durch die Differenz der Phasen der makroskopischen quantenmechanischen Wellenfunktionen der beiden Supraleiter $\phi_2 - \phi_1$, verringert um das von Supraleiter 1 nach Supraleiter 2 integrierte magnetische Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$:

$$\gamma = \phi_2 - \phi_1 - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_1^2 d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

Hierbei bezeichnet $\Phi_0 = \frac{hc}{2e}$ das magnetische Flussquant.

Im einfachsten Fall ist die Beziehung zwischen Strom und eichinvarianter Phasendifferenz, kurz Strom-Phasen-Beziehung genannt, durch eine sinusförmige Abhängigkeit gegeben:

$$I = I_c \sin \gamma \quad (2.2)$$

Die Größe I_c bezeichnet dabei den maximalen Suprastrom, der über die Kontaktstelle fließen kann und wird deshalb oft kritischer Strom des Kontaktes genannt.

Die zeitliche Änderung der eichinvarianten Phasendifferenz γ ist proportional zur Spannung V über den Kontakt:

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{2e}{\hbar} V \quad (2.3)$$

Dies ist die Josephson-Gleichung, die zusammen mit der Strom-Phasen-Beziehung den Josephson-Effekt beschreibt. Dieser Effekt wurde 1962 von Brian D. Josephson für zwei Supraleiter, die über eine Tunnelbarriere verbunden sind, theoretisch vorhergesagt. In der Originalarbeit [1] wird das resultierende Verhalten bei verschwindender bzw. endlicher Spannung über den Kontakt beschrieben:

1. Bei verschwindender Spannung kann ein Supra-Gleichstrom bis zu einer Stärke I_c über den Kontakt fließen.
2. Bei einer endlichen Spannung über den Kontakt gibt es den üblichen Gleichstrom, aber auch einen Supra-Wechselstrom mit der Frequenz $\nu = \frac{2e}{\hbar} V$.

Diese beiden Phänomene werden oft als Gleichstrom- bzw. Wechselstrom-Josephson-Effekt bezeichnet.

Für seine theoretische Vorhersage der Eigenschaften eines Suprastromes durch eine Tunnelbarriere und insbesondere des Josephson-Effektes erhielt Brian D. Josephson 1973 den Nobelpreis für Physik [7]. Der Josephson-Effekt hat aber eine wesentlich allgemeinere Bedeutung und ist nicht auf einen Tunnelkontakt zwischen zwei Supraleitern beschränkt, sondern tritt immer auf, wenn eine Kopplung zweier makroskopischer quantenmechanischer Wellenfunktionen vorliegt.

Zwischen Gleichung (2.2) und Gleichung (2.3), die zusammen den Josephson-Effekt beschreiben, gibt es allerdings einen grundlegenden Unterschied. Die Strom-Phasen-Beziehung gilt in ihrer einfachsten Form (2.2) nur in bestimmten Grenzfällen. Sowohl der kritische Strom I_c als auch die genaue funktionale Abhängigkeit des Stromes von der eichinvarianten Phasendifferenz γ hängen stark von der Art der Kopplung, von den genauen Eigenschaften des Kontaktes und anderen Faktoren wie beispielsweise der Temperatur T ab. Gleichung (2.3) hingegen folgt einzig aus den grundlegenden Gleichungen der Quantenmechanik und hängt nur von den Naturkonstanten e (Elementarladung) und $\hbar = 2\pi\hbar$ (Plancksches Wirkungsquantum) ab. Diese Gleichung stellt eine exakte Verknüpfung mit weitem Gültigkeitsbereich dar zwischen einer quantenmechanischen Größe, der eichinvarianten Phasendifferenz γ , und einer makroskopischen Größe, der über dem Kontakt abfallenden Spannung V .

Trotz der Abhängigkeit von den Details des speziellen Kontaktes können für die Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ einige allgemein gültige Eigenschaften angegeben werden (siehe dazu z. B. die Überblicksartikel [4, 8]):

1. Eine Veränderung der Phase der makroskopischen quantenmechanischen Wellenfunktion um 2π in einer der beiden Elektroden darf den physikalischen Zustand des Systems nicht ändern:

$$\Delta(\mathbf{r}) = |\Delta| e^{i\phi} = |\Delta| e^{i(\phi+2\pi)}$$

Deshalb muss die Strom-Phasen-Beziehung immer 2π -periodisch sein:

$$I(\gamma + 2\pi) = I(\gamma) \quad (2.4)$$

2. Eine Umkehr der Phasendifferenz führt zu einem entgegengesetzt fließenden Strom:

$$I(-\gamma) = -I(\gamma) \quad (2.5)$$

Hierbei ist zu beachten, dass diese Eigenschaft nur für Systeme gilt, bei denen die Zeitumkehrinvarianz nicht gebrochen ist. Da Systeme mit gebrochener Zeitumkehrinvarianz in der vorliegenden Arbeit nicht betrachtet werden, spielt diese Einschränkung im Folgenden keine Rolle.

3. Nach 1. und 2. ist die Strom-Phasen-Beziehung eine ungerade, 2π -periodische Funktion. Folglich enthält ihre Entwicklung in eine Fourier-Reihe nur Sinus-Terme

$$I(\gamma) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n \sin(n\gamma) \quad (2.6)$$

und die Strom-Phasen-Beziehung schneidet bei $\gamma = n\pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$ die γ -Achse:

$$I(n\pi) = 0 \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.7)$$

Aus diesen Eigenschaften folgt, dass eine Bestimmung der Strom-Phasen-Beziehung im Intervall $\gamma \in [0, \pi]$ ausreicht, um $I(\gamma)$ vollständig festzulegen.

Die Änderung der Freien Energie $\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0)$ eines Josephson-Kontaktes, die durch eine Variation der Phasendifferenz γ hervorgerufen wird, kann durch die Integration der Strom-Phasen-Beziehung bestimmt werden:

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma') \quad (2.8)$$

Eine mikroskopische Herleitung dieser Formel für die Änderung der Freien Energie aus dem Eilenberger-Funktional wird in der vorliegenden Arbeit präsentiert. Im Fall einer sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehung kann das Integral ausgeführt werden. Mit einer geeigneten Integrationskonstanten folgt:

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} I_c (1 - \cos \gamma) \quad (2.9)$$

Bei einer sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehung ist die Freie Energie des Josephson-Kontaktes folglich für eine Phasendifferenz von $\gamma = 0$ minimal.

Bei bestimmten Realisierungen von Josephson-Kontakten liegt aufgrund der Form der Strom-Phasen-Beziehungen das energetische Minimum nicht bei $\gamma = 0$, sondern bei einer Phasendifferenz von $\gamma = \varphi$. Man bezeichnet diese Eigenschaft als das Auftreten einer intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \varphi$, da diese im Grundzustand ohne Bias-Strom spontan realisiert wird.

Für den speziellen Wert der intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$ folgt im einfachsten Fall einer sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehung

$$I = I_c \sin(\gamma + \gamma_0) = I_c \sin(\gamma + \pi) \quad (2.10)$$

beziehungsweise für die Änderung der Freien Energie

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} I_c (1 - \cos(\gamma + \pi)) = \frac{\hbar}{2e} I_c (1 + \cos \gamma) \quad (2.11)$$

Formal entspricht dies einem negativen kritischen Strom:

$$I = -I_c \sin \gamma \quad (2.12)$$

Aufgrund der intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$ werden derartige Josephson-Kontakte als π -Josephson-Kontakte bezeichnet [9]. Werden sie mit Josephson-Kontakten kombiniert, deren energetisches Minimum bei $\gamma_0 = 0$ liegt, so lassen sich die unterschiedlichen Grundzustandseigenschaften für den Nachweis physikalischer Eigenschaften der Kontakte sowie für technische Anwendungen ausnutzen.

Intrinsische Phasendifferenzen von $\gamma_0 = \varphi$ im Zwischenbereich $0 < \varphi < \pi$ treten zumeist in der Umgebung des Überganges zwischen den beiden Fällen $\gamma_0 = 0$ und $\gamma_0 = \pi$ auf. Derartige Josephson-Kontakte werden üblicherweise φ -Josephson-Kontakte genannt [10–12].

2.2 Weak links und geometrische Josephson-Kontakte

Als *weak links* werden Josephson-Kontakte bezeichnet, bei denen ein schwacher elektrischer Kontakt zwischen den beiden supraleitenden Elektroden besteht. Der Kontakt kann dabei durch einen Normalleiter oder durch einen Supraleiter gegeben sein, wobei der Supraleiter unter Umständen eine andere (niedrigere) kritische Temperatur als die Elektroden haben kann. Diese Charakterisierung unterscheidet *weak links* von Tunnelkontakten, bei denen die beiden supraleitenden Elektroden durch eine dünne isolierende Schicht elektrisch getrennt sind. Ist der Abstand der beiden Elektroden bzw. der Querschnitt des *weak link* ausreichend klein, so tritt der Josephson-Effekt auf.

Es gibt mehrere Gründe, die *weak links* sowohl für grundlegende physikalische Untersuchungen als auch für Anwendungen interessant machen. Mit wachsendem Abstand der Elektroden wird der *weak link*, je nach Wahl des Materials, aus dem dieser besteht, entweder zu einem Normalleiter oder zu einem „normalen“ Supraleiter und der Josephson-Effekt verschwindet. Dies macht einen *weak link* aus physikalischer Sicht zu einem interessanten System. Im Fall einer normalleitenden Barriere kann der Übergang vom Josephson-Effekt zu Ohmschem Verhalten untersucht werden, im Fall einer supraleitenden Barriere hingegen der Übergang zu „normaler“ Supraleitung. Somit können an *weak links* interessante Erkenntnisse über makroskopische Quanteneffekte gewonnen werden.

Aus Sicht der Anwendung sind *weak links* von Interesse, da sie charakteristische Eigenschaften aufweisen, die sie von Tunnelkontakten deutlich unterscheiden. Die wichtigsten Aspekte sind hier die sehr kleine Kapazität C sowie der sehr kleine Widerstand im Normalzustand R_N . Diese beiden Eigenschaften sind insbesondere für Anwendungen wichtig, bei denen überdämpfte Josephson-Kontakte mit nicht-hysteretischer Strom-Spannungs-Kennlinie benötigt werden. Die Kapazität des Kontaktes C definiert, zusammen mit dem Widerstand im Normalzustand R_N , den dimensionslosen Stewart-McCumber-Parameter β_C [13, 14]:

$$\beta_C = \omega_c R_N C = \frac{2\pi}{\Phi_0} I_c R_N^2 C \quad (2.13)$$

Hierbei ist ω_c die charakteristische Frequenz des Kontaktes, die über die charakteristische Spannung $V_c = I_c R_N$ definiert ist:

$$\omega_c = \frac{2\pi}{\Phi_0} V_c = \frac{2\pi}{\Phi_0} I_c R_N \quad (2.14)$$

Der Stewart-McCumber-Parameter β_C bestimmt das Verhalten des Josephson-Kontaktes und gibt an, ob ein Josephson-Kontakt überdämpft ($\beta_C < 1$) oder unterdämpft ($\beta_C > 1$) ist. Aufgrund der kleinen Abmessungen und aufgrund des schwachen elektrischen Kontaktes weisen *weak links* im Allgemeinen eine kleine Kapazität auf. Der schwache elektrische Kontakt zwischen den supraleitenden Elektroden führt gleichzeitig im Vergleich zu Tunnelkontakten zu einem kleinen Widerstand im Normalzustand R_N .

Ein spezieller Typ von *weak link* wird durch Systeme gebildet, bei denen die teilweise Entkopplung der Elektroden durch eine laterale Einschnürung eines Supraleiters hervorgerufen wird. Derartige Systeme werden gelegentlich als Dayem-Brücken [3], als Mikrobrücken oder als *superconductor-constriction-superconductor* (ScS) Josephson-Kontakte bezeichnet. Im Bereich der Engstelle wird der Querschnitt des Supraleiters in einer räumlichen Richtung verringert und der Strom dadurch konzentriert, was lokal zu einer stark erhöhten Stromdichte führt. Da der Kontakt und die Elektroden aus dem gleichen durchgehenden Material bestehen, wird der Josephson-Effekt hier verblüffenderweise einzig und allein durch die Geometrie des Supraleiters hervorgerufen.

Eine sehr ähnliche Variante von *weak link* wird durch Systeme gebildet, bei denen der Querschnitt des Supraleiters in zwei räumlichen Richtungen verringert wird. Systeme diesen Typs werden zumeist als Brücken mit variabler Dicke (*variable thickness bridges*) bezeichnet.

Derartige geometrische Josephson-Kontakte stoßen in den letzten Jahren auf zunehmendes Interesse, da verbesserte Fertigungstechnologien eine präzisere Strukturierung supraleitender Filme erlauben. Im Folgenden werden einige relevante neuere Arbeiten in chronologischer Reihenfolge zusammengestellt.

B. Irmer *et al.* haben ein Rasterkraftmikroskop verwendet, um Mikrobrücken und SQUIDS (*Superconducting Quantum Interference Devices*) in einem Aluminium-Film zu strukturieren [15]. Dazu wurde eine ausreichend harte und länglich geformte Spitze am Rasterkraftmikroskop eingesetzt und im Kontaktmodus betrieben, so dass Furchen in den Film „gepflügt“ werden konnten. Es konnten Mikrobrücken mit typischen Abmessungen von $100 \times 100 \text{ nm}^2$ strukturiert werden, die auch zu SQUIDS kombiniert wurden. Die Mikrobrücken zeigten nicht-hysteretische Strom-Spannungs-Kennlinien und die Daten für den kritischen Strom in Abhängigkeit der Temperatur folgten sehr gut den Vorhersagen von Kulik

und Omelyanchouk für eine Mikrobrücke im sauberen Grenzfall (*clean limit*) mit kleinen Abmessungen im Vergleich zur Kohärenzlänge des Materials (siehe Abschnitt 2.3.3).

Ausgehend von ultradünnen Niob- und Niobnitrid-Filmen wurden von V. Bouchiat *et al.* [16] und M. Faucher *et al.* [17] SQUIDs bestehend aus zwei Mikrobrücken bzw. aus zwei Brücken mit variabler Dicke gefertigt. Zur Erzeugung der notwendigen Mikrostrukturen wurden die 3 – 6.5 nm dicken Filme mit einem Rasterkraftmikroskop mit Hilfe einer konstanten Spannung lokal anodisiert und damit Teilbereiche der Filme isolierend gemacht. Die Mikrobrücken wiesen Breiten von 30 bis 100 nm und Längen von 200 bis 1000 nm auf, die SQUIDs Abmessungen im Bereich von einigen Mikrometern („Mikro-SQUIDs“). Die Modulation des kritischen Stromes der SQUIDs durch ein äußeres Magnetfeld wich bei den untersuchten Strukturen stark von der idealen Form $|\cos(\pi \Phi / \Phi_0)|$ ab und zeigte stattdessen eine sägezahnförmige Abhängigkeit. Dieses Ergebnis wurde von den Autoren mit der kinetischen Induktivität der langen Mikrobrücken in Verbindung gebracht.

Von K. Hasselbach *et al.* wurden per Elektronenstrahlolithographie Mikro-SQUIDs basierend auf zwei Mikrobrücken als *weak links* aus Aluminium- und Niob-Dünnschichten gefertigt und charakterisiert [18]. Die Größe der SQUID-Löcher betrug bei den untersuchten Strukturen etwa $1 \mu\text{m}^2$. Die gemessenen Eigenschaften der Mikrobrücken und der Mikro-SQUIDs wurden von den Autoren mit Ergebnissen zweidimensionaler Ginzburg-Landau-Theorie in der Ebene der Mikro-SQUIDs verglichen. Dabei wurde die Länge der Mikrobrücken von 0.5 bis 2.9ξ variiert und der Einfluss von Temperatur und Magnetfeld untersucht. Als Resultat wurde gefunden, dass die Mikrobrücken im Allgemeinen stark nicht-sinusförmige Strom-Phasen-Beziehungen aufweisen und als Folge auch die Abhängigkeit des kritischen Stromes der SQUIDs vom äußeren Magnetfeld stark von der idealen $|\cos(\pi \Phi / \Phi_0)|$ -Abhängigkeit abweicht. Des Weiteren wurde festgestellt, dass Aufgrund der Variation des Ginzburg-Landau-Ordnungsparameters in der Umgebung der Mikrobrücken die gesamte SQUID-Fläche bei theoretischen Untersuchungen berücksichtigt werden muss.

S. K. H. Lam und D. L. Tilbrook haben ausgehend von Niob-Filmen mit Hilfe von Elektronenstrahlolithographie Mikrobrücken und Mikro-SQUIDs gefertigt [19]. Dazu wurden die Niob-Filme mit einer Goldschicht bedeckt, die Goldschicht wurde mit Elektronenstrahlolithographie strukturiert und die Strukturen mit Hilfe von reaktivem Ionenätzen auf den Niob-Film übertragen. Die Niob-Brücken hatten Breiten von etwa 50 nm und die SQUID-Löcher Flächen von etwa $200 \times 200 \text{ nm}^2$ („Nano-SQUIDs“, siehe Abb. 2.1). Die Goldschicht diente in dem verwendeten Prozess als Herstellungsmaske und als Schutzschicht für den Niob-Film sowie zugleich als Shuntwiderstand und als Wärmesenke für den Betrieb der SQUIDs. Um die Strom-Phasen-Beziehungen möglichst sinusförmig zu machen, wurden die Brücken sehr kurz dimensioniert. Ohne den Shuntwiderstand waren die Strom-Phasen-Beziehungen der SQUIDs hysteretisch, mit der Goldschicht als Shuntwiderstand konnten nicht-hysteretische Strom-Spannungs-Kennlinien erzeugt werden. Da die Modulation des kritischen Stromes der SQUIDs durch ein äußeres Magnetfeld vergleichsweise schwach ausfiel und nicht-sinusförmige Strom-Phasen-Beziehungen der Mikrobrücken als Ursache vermutet wurden, wurden die Brücken durch erneutes reaktives Ionenätzen weiter verschmälert. Die schmaleren Brücken sollten durch eine schwächere Kopplung eine bessere Annäherung an sinusförmige Strom-Phasen-Beziehungen liefern. Die Modulation des kritischen Stromes durch ein äußeres Magnetfeld konnte durch diese Nachbearbeitung tatsächlich verstärkt werden.

Von V. I. Shnyrkov und S. I. Melnik wurde vorgeschlagen, einen makroskopischen supraleitenden Ring mit einem ScS-Josephson-Kontakt als hochempfindliches Magnetometer zu verwenden [20]. Das Funktionsprinzip beruht dabei auf der nichtlinearen Modulation des Kreisstromes bei einem magnetischen Fluss durch den Ring nahe einem halben Flussquant. Im sauberen Grenzfall (*clean limit*) und bei tiefen Temperaturen hat der ScS-Josephson-Kontakt gegenüber einem Tunnelkontakt aufgrund der nicht-sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehung und des höheren kritischen Stromes Vorteile in Bezug auf den energetischen Abstand von Grundzustand zu erstem angeregtem Zustand, wenn die sonstigen Parameter in beiden Fällen als identisch angenommen werden. Dadurch kann im Fall des ScS-Josephson-Kontaktes der makroskopische supraleitende Ring eine geringere Induktivität aufweisen,

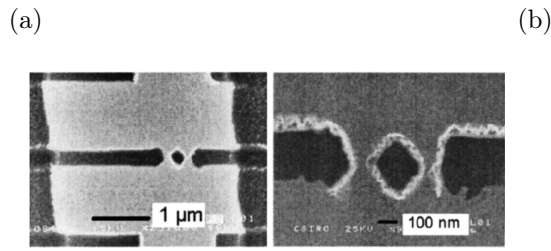


FIG. 1. The scanning electron micrographs of a Au-shunted Nb dc SQUID (left-hand side, scale bar=1 μm) and its nanojunctions and hole (right-hand side, scale bar=100 nm). The device has a top layer of Au and a bottom layer of Nb.

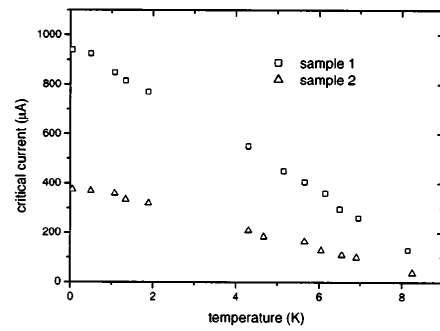


FIG. 3. The temperature dependence of the critical current of two nano-bridges.

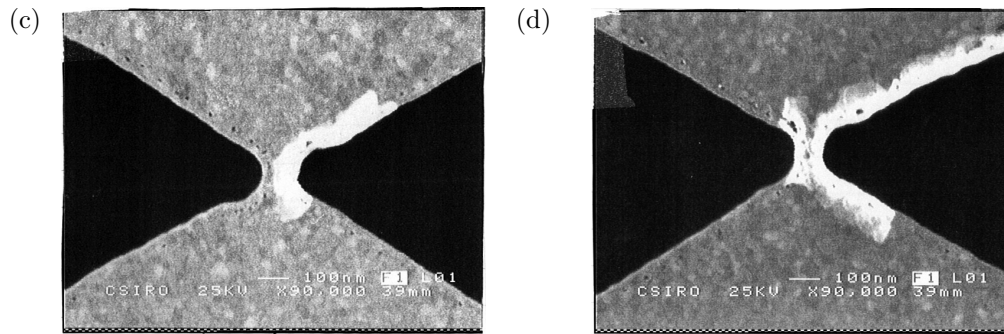


Abbildung 2.1: Raster-Elektronenmikroskopische Aufnahme eines der von Lam *et al.* hergestellten „Nano-SQUIDs“ in (a) sowie die kritischen Ströme zweier exemplarischer Mikrobrücken in Abhängigkeit der Temperatur in (b). Die beiden Mikrobrücken, deren kritische Ströme in (b) dargestellt sind (*sample 1* und *2*), sind in (c) und (d) abgebildet. Abbildungen (a) und (b) sind entnommen aus [19]; (c) und (d) wurden freundlicherweise von S. K. H. Lam (CSIRO, Australien) zur Verfügung gestellt.

ohne dass die Nichtlinearität der Modulation des Kreisstromes verloren geht.

A. G. P. Troeman *et al.* haben mit fokussierten Ionenstrahlen Nano-SQUIDs basierend auf Niob-Mikrobrücken hergestellt [21]. Bei einer Halbwertsbreite des Ionenstrahls von 50 nm konnten Mikrobrücken mit 80 nm Breite und 150 nm Länge in einem 50 nm dicken Niob-Film strukturiert werden, indem der Ionenstrahl überlappend auf beiden Seiten der Mikrobrücke eingesetzt wurde. Die hergestellten Nano-SQUIDs wiesen eine effektive Fläche von mindestens $3.6 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}^2$, kritische Ströme von 4 – 25 μA und Flussempfindlichkeiten von 40 – 200 $\mu\text{V}/\Phi_0$ auf. A. G. P. Troeman *et al.* haben die beschriebenen Nano-SQUIDs verwendet, um direkt die Temperaturabhängigkeit der Strom-Phasen-Beziehungen von Niob-Mikrobrücken zu vermessen [22]. Als weiteren möglichen Einsatzbereich der Nano-SQUIDs nennen Troeman *et al.* Raster-SQUID-Mikroskopie und die Untersuchung von magnetischen Nanopartikeln.

U. Büttner *et al.* haben ausgehend von dünnen Filmen des Hochtemperatursupraleiters $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ mit Hilfe eines Laserätzprozesses Mikrobrücken strukturiert, die Längen im Bereich einiger Mikrometer und Breiten von etwa 1 μm aufweisen [23]. Der Laserätzprozess ließ eine definierte Strukturierung mit Auflösungen unter einem Mikrometer zu, wobei allerdings unklar blieb, welche Veränderungen der YBCO-Film durch die starke lokale Erhitzung während des Ätzprozesses erfuhr. Insbesondere blieb unklar, welche effektive Breite der supraleitende Film im Bereich der Mikrobrücke aufwies oder ob die Mikrobrücken gar komplett normalleitend wurden. Der Josephson-Effekt konnte an den Strukturen nachgewiesen werden, wobei die Mikrobrücken mit unterschiedlicher Breite allerdings sehr unterschiedliche Abhängigkeiten des kritischen Stromes von der Temperatur aufwiesen.

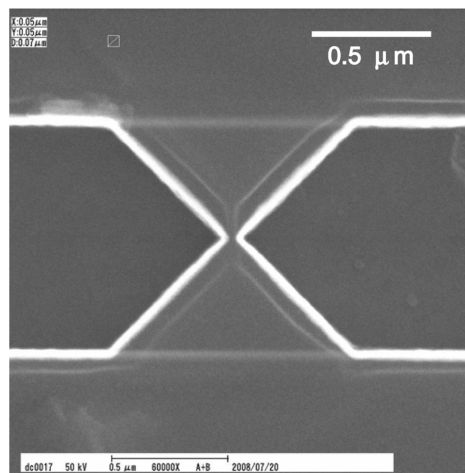


Abbildung 2.2: Raster-Elektronenmikroskopische Aufnahme einer der von Kajino *et al.* hergestellten YBCO-„Nanobrücken“. Die Breite der Brücke wird mit 30 nm angegeben. Abbildung entnommen aus [26].

Mit einem Rasterkraftmikroskop haben A. A. O. Elkaseh *et al.* in einem $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ -Film Mikrobrücken strukturiert [24]. Das Rasterkraftmikroskop, ausgestattet mit einer Diamantspitze, wurde hier verwendet, indem im Kontaktmodus Rillen in das Material geritzt wurden. Die resultierenden Mikrobrücken hatten Längen und Breiten im Bereich einiger hundert Nanometer. Eine Charakterisierung der Josephson-Kontakte über ihre supraleitenden Eigenschaften steht allerdings noch aus.

Von L. Hao *et al.* wurden Nano-SQUIDs hergestellt, die auf Niob-Dünnschichten mit Wolfram-Deckschichten basieren und mit optischer Lithographie und Ionenätzen sowie fokussierten Ionenstrahlen strukturiert wurden [25]. Die Josephson-Kontakte sind bei den hergestellten SQUIDs durch Mikrobrücken realisiert, die typischerweise eine Länge von 80 nm sowie eine Breite von 65 nm aufweisen. Die SQUID-Schleifen haben dabei typischerweise einen Durchmesser von etwa 370 nm und sind dadurch für hochempfindliche Messungen des magnetischen Flusses geeignet. Bei den beschriebenen SQUIDs diente die Wolfram-Deckschicht, ähnlich wie die Goldschicht bei Lam *et al.* [19], gleichzeitig als Schutzschicht bei der Herstellung sowie als Shuntwiderstand und Wärmesenke im Betrieb. Das Rauschen der fabrizierten SQUIDs ist äußerst gering und die Strom-Spannungs-Kennlinien sind hysteresefrei, was von den Autoren auf die geringen Kapazitäten der Josephson-Kontakte sowie die geringe Induktivität der SQUID-Schleifen zurückgeführt wird.

Mit Hilfe eines kombinierten Prozesses basierend auf Elektronenstrahlolithographie und Ionenätzen mit Argon-Ionen haben K. Kajino *et al.* YBCO-Mikrobrücken mit Breiten bis zu minimal 30 nm hergestellt („Nanobrücken“ [26], siehe Abb. 2.2). Um Oberflächenschädigungen durch den Ätzprozess auszuheilen, wurde als weiterer Prozessierungsschritt nach der Strukturierung ein ultradünner YBCO-Film auf der Probe aufgebracht. Dieser ultradünne Film ist auf dem MgO-Substrat isolierend, während er auf dem YBCO-Film, der die Brücke bildet, supraleitend wird. Durch diese erneute YBCO-Deposition nach der Strukturierung konnte der kritische Strom der Brücken um zwei Größenordnungen erhöht werden. Die hergestellten YBCO-„Nanobrücken“ sollen in Zukunft verwendet werden, um optische Signale in *rapid single flux quantum*-Schaltkreise (RSFQ, [27]) einzukoppeln.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass verschiedene rasternde sowie lithographische Verfahren entwickelt wurden, mit denen sich supraleitende Filme mit ausreichend hoher Auflösung strukturieren lassen, um sowohl mit konventionellen als auch mit Hochtemperatur-supraleitern geometrische Josephson-Kontakte herzustellen. Insbesondere Elektronenstrahlolithographie und fokussierte Ionenstrahlen stellen Werkzeuge dar, bei denen zu erwarten

ist, dass sie in Zukunft erlauben werden, supraleitende Filme mit noch höherer Auflösung zu strukturieren. Diese technologischen Möglichkeiten sowie ihre speziellen Eigenschaften machen geometrische Josephson-Kontakte zu interessanten Grundelementen für zukünftige supraleitende Detektoren und supraleitende Elektronik und lassen auf breite technische Anwendungen hoffen.

2.3 Theoretische Modelle für Geometrische Josephson-Kontakte

In diesem Abschnitt werden die Resultate der wichtigsten theoretischen Modelle zur Beschreibung geometrischer Josephson-Kontakte zusammengestellt. Zudem wird die Arbeit von L. G. Aslamazov und A. I. Larkin aus dem Jahr 1969 rekapituliert, in der erstmals theoretisch beschrieben wurde, dass ein supraleitender Punktkontakt die Eigenschaften eines Tunnel-Josephson-Kontaktes zeigen kann. Des Weiteren wird das Verhalten des kritischen Stromes eines Tunnelkontaktes nach V. Ambegaokar und A. Baratoff als bekanntes Referenzergebnis angegeben. Die Ergebnisse der vorgestellten Modelle werden im Folgenden dazu dienen, die Ergebnisse der in dieser Arbeit vorgestellten selbstkonsistenten Lösungen mikroskopischer Theorie in Grenzfällen zu verifizieren und die Korrekturen zu den existierenden Modellen durch die selbstkonsistente mikroskopische Beschreibung zu identifizieren.

Bei der theoretischen Beschreibung geometrischer Josephson-Kontakte gibt es mehrere Punkte, die genauer Betrachtung bedürfen. Diese folgen direkt aus der Tatsache, dass ein derartiger Josephson-Kontakt aus einem durchgängigen supraleitenden Material besteht. Da keine Separation zwischen Josephson-Kontakt und Elektroden durch einen Übergang zu einem anderen Material vorhanden ist, findet eine starke Beeinflussung der Elektroden durch den Kontakt und anders herum statt. Bei einer detaillierten Untersuchung muss die Umgebung der Engstelle mit in Betracht gezogen werden, um die wechselseitige Beeinflussung von Elektroden und Kontakt korrekt zu berücksichtigen. Die wechselseitige Beeinflussung von Elektroden und Kontakt wirft des Weiteren die Frage auf, zwischen welchen Punkten die eichinvariante Phasendifferenz γ gemessen werden muss bzw. welchen Einfluss die Wahl dieser Punkte auf die resultierenden Strom-Phasen-Beziehungen und insbesondere auf den kritischen Strom hat. Auf die Berücksichtigung dieser Punkte in den im Folgenden beschriebenen theoretischen Modellen wird jeweils kurz eingegangen.

2.3.1 Zum Vergleich: Tunnelkontakt nach Ambegaokar und Baratoff

Ein Jahr nach der Veröffentlichung der Vorhersage des Josephson-Effektes durch B. D. Josephson haben V. Ambegaokar und A. Baratoff den kritischen Strom eines Tunnelkontaktes in Abhängigkeit der Temperatur berechnet [28].

Den Ausgangspunkt bildet der folgende Hamilton-Operator:

$$H = H_L + H_R + V \quad (2.15)$$

Hierbei sind H_L und H_R die Vielteilchen-Hamiltonoperatoren für die Supraleiter links und rechts der Tunnelbarriere und V koppelt die beiden:

$$V = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \alpha} (T_{\mathbf{k}\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger d_{\mathbf{q}\alpha} + T_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^* d_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha}) \quad (2.16)$$

Die Operatoren $c_{\mathbf{k}\alpha}$ und $d_{\mathbf{q}\alpha}$ sind Ein-Teilchen-Vernichtungsoperatoren für die linke bzw. die rechte Seite, α ist der Spin-Index und $T_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ sind die Tunnel-Matrixelemente. Der Operator V beschreibt also Prozesse, bei denen Ein-Teilchen-Zustände mit gleichem Impuls \mathbf{k} und Spin α auf der einen Seite der Tunnelbarriere vernichtet und simultan auf der anderen erzeugt, also über den Kontakt transferiert werden.

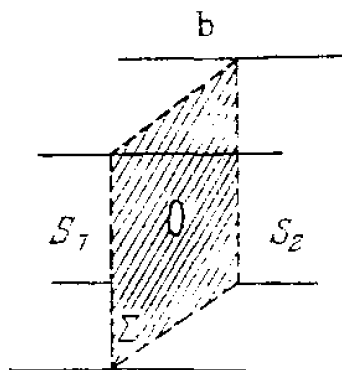


Abbildung 2.3: Modell einer Mikrobrücke bestehend aus einer kreisförmigen Blende, entnommen aus [35].

Unter Verwendung mikroskopischer Theorie konnte als Hauptergebnis die Temperaturabhängigkeit des Produktes aus kritischem Strom I_c und Widerstand im Normalzustand $R_N = 2\pi\hbar/(Se^2T^2)$ angegeben werden, wobei S die Kontaktfläche und $\overline{T^2}$ das über die Fermi-Fläche integrierte und als energieunabhängig angenommene Tunnel-Matrixelement ist:

$$I_c R_N = \frac{1}{e} \Delta_L(T) \Delta_R(T) \pi k_B T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_n^2 + \Delta_L^2(T)) (\varepsilon_n^2 + \Delta_R^2(T))}}$$

Hierbei sind $\varepsilon_n = (2n + 1)\pi k_B T$ die fermionischen Matsubara-Frequenzen und $\Delta_L(T)$ bzw. $\Delta_R(T)$ die temperaturabhängigen Energielücken der beiden Supraleiter. Für einen symmetrischen Kontakt mit $\Delta_L(T) = \Delta_R(T) = \Delta(T)$ ergibt sich folgendes Resultat:

$$I_c R_N = \frac{\pi \Delta(T)}{2e} \tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2k_B T}\right) \quad (2.17)$$

Nahe der kritischen Temperatur folgt daraus unter Verwendung des BCS-Resultates für die Temperaturabhängigkeit der Energielücke $\Delta(T)$ eine einfache lineare Abhängigkeit:

$$I_c R_N = \left(\frac{2.34\pi k_B}{e}\right) (T_c - T) \approx (T_c - T) \times 635 \frac{\mu\text{V}}{\text{K}} \quad (2.18)$$

Die Steigung dieser linearen Näherung nahe der kritischen Temperatur hängt nur von Naturkonstanten ab. Da diese lineare Näherung einen weiten Gültigkeitsbereich hat und viele Arten von Josephson-Kontakten unabhängig von den Details der verwendeten Materialien und der konkreten Ausführung diesem Verhalten folgen, stellt dies ein wichtiges Ergebnis mit allgemeiner Relevanz dar.

2.3.2 Punktkontakt nach Aslamazov und Larkin

Von L. G. Aslamazov und A. I. Larkin wurde 1969 erstmals theoretisch beschrieben, dass ein supraleitender Punktkontakt das Verhalten eines Josephson-Kontaktes zeigen kann, wenn seine Ausdehnung verglichen mit der Kohärenzlänge ξ sowie der magnetischen Eindringtiefe λ_L des Materials klein ist [29]. Die theoretischen Überlegungen wurden stimuliert durch Mikrowellen-Emissions- und Absorptionsexperimente an supraleitenden Punktkontakten, die zuvor von A. H. Dayem *et al.* [30], J. E. Zimmerman *et al.* [31, 32] und I. Ya. Krasnopolin *et al.* [33] publiziert worden waren. Sowohl die Absorption als auch die Emission von Mikrowellenstrahlung mit Frequenzen, die ganzzahligen und fraktionalen Shapiro-Stufen entsprechen, konnte bei diesen Experimenten nachgewiesen werden.

Da die Ausdehnung des Punktkontaktes als klein gegenüber der magnetischen Eindringtiefe angenommen wird, können die Magnetfelder, die durch die fließenden Ströme hervorgerufen werden, vernachlässigt werden. Die wesentliche Feststellung von Aslamazov und Larkin besteht darin, dass der Ordnungsparameter der Ginzburg-Landau-Theorie $\psi(\mathbf{r})$, der im Allgemeinen durch die Ginzburg-Landau-Gleichung

$$\alpha\psi(\mathbf{r}) + \beta|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e^*}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.19)$$

mit geeigneten Randbedingungen festgelegt wird, in der direkten Umgebung des Kontaktes in einem räumlich eng begrenzten Gebiet stark variiert. Wenn die Länge des Punktkontaktes durch L gegeben ist (mit $L \ll \xi$), so dominiert der Gradiententerm, da dieser von der Größenordnung $(\xi/L)^2$ und damit wesentlich größer als die anderen beiden Terme ist. Folglich vereinfacht sich die Ginzburg-Landau-Gleichung (2.19) in der Umgebung des Punktkontaktes zu einer Laplace-Gleichung für den Ordnungsparameter:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.20)$$

Die Randbedingungen an den Oberflächen der Geometrie, die zur eindeutigen Bestimmung des Ordnungsparameters gefordert werden müssen, sind durch $\partial\psi/\partial\hat{\mathbf{n}} = 0$ gegeben, wobei $\hat{\mathbf{n}}$ die Normale der Oberflächen der Geometrie bezeichnet. Fordert man als weitere Bedingung, dass der Ordnungsparameter links bzw. rechts des Kontaktes in den ausgedehnten Supraleitern, die die Elektroden darstellen, die Werte $\psi_{L,R} = |\psi_\infty(T)|e^{i\phi_{L,R}}$ annimmt, so wird Gleichung (2.20) im Bereich des Kontaktes durch

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi_\infty(T)| [f(\mathbf{r})e^{i\phi_L} + (1 - f(\mathbf{r}))e^{i\phi_R}] \quad (2.21)$$

gelöst, wobei die Funktion $f(\mathbf{r})$ eine Lösung der Laplace-Gleichung (2.20) ist, die die Randbedingung $\partial\psi/\partial\hat{\mathbf{n}} = 0$ erfüllt und ausgehend vom Kontakt in Richtung der linken Elektrode asymptotisch den Wert 1 annimmt, in Richtung der rechten Elektrode aber asymptotisch verschwindet.

Durch die Auswertung der Stromgleichung der Ginzburg-Landau-Theorie

$$\mathbf{j} = \frac{e^*\hbar}{2m^*i} (\psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r})) - \frac{e^{*2}}{m^*c} \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

folgt mit Gleichung (2.21) die Stromdichte im Punktkontakt:

$$\mathbf{j} = \frac{e^*\hbar}{m^*} |\psi_\infty(T)|^2 (\nabla f(\mathbf{r})) \sin(\phi_R - \phi_L) \quad (2.23)$$

Die kritische Stromdichte ist somit gegeben durch $\mathbf{j}_c = e^*\hbar|\psi_\infty(T)|^2 (\nabla f(\mathbf{r})) / m^*$ und hängt über den Gradienten der Funktion $f(\mathbf{r})$ von der genauen Geometrie des Punktkontaktes ab. Es gilt $j_c \propto |\psi_\infty(T)|^2 \propto \Delta^2(T)$, genau wie für den kritische Strom des Tunnelkontaktes in Gleichung (2.17) nahe der kritischen Temperatur T_c .

Bei Verwendung des Ohmschen Gesetzes gilt für den Gesamtstrom über den Kontakt

$$I = \frac{V}{R_N} + I_c \sin(\phi_R - \phi_L) \quad (2.24)$$

wobei der Widerstand im Normalzustand R_N und der kritische Strom I_c von der genauen Geometrie abhängen. Dieses Ergebnis liefert den Gesamtstrom über den Kontakt als die Summe des normalleitenden Stromes sowie des supraleitenden Beitrages. Der Beitrag des Suprastromes entspricht der Strom-Phasen-Beziehung des Josephson-Effektes im Fall des Tunnelkontaktes, Gleichung (2.2).

Mit dieser Betrachtung im Rahmen der Ginzburg-Landau-Theorie, deren Gültigkeit auf die Umgebung der kritischen Temperatur beschränkt ist, konnten Aslamazov und Larkin zeigen, dass ein supraleitender Punktkontakt tatsächlich Josephson-Effekte zeigt, sofern seine

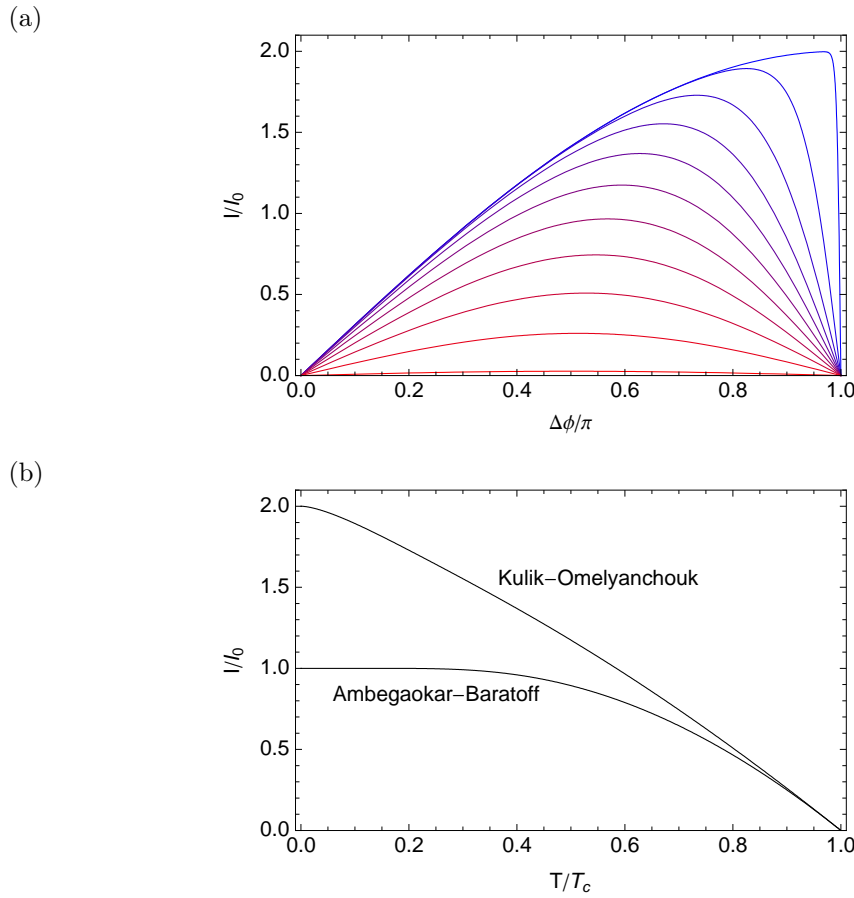


Abbildung 2.4: (a) Strom-Phasen-Beziehung einer Mikrobrücke im sauberen Grenzfall nach Gleichung (2.25) für die Temperaturen $T = 0.01 T_c, 0.1 T_c, 0.2 T_c, \dots, 0.8 T_c, 0.9 T_c, 0.99 T_c$ (farblich abgestuft von blau=„kalt“ nach rot=„warm“). (b) Kritischer Strom einer Mikrobrücke, definiert als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung. Zum Vergleich sind die Ergebnisse für den Tunnelkontakt nach Ambegaokar und Baratoff, Gleichung (2.17), ebenfalls dargestellt. Es ist $I_0 = \pi \Delta(T = 0)/(2eR_N)$.

Ausdehnung klein ist gegenüber der Kohärenzlänge ξ sowie der magnetischen Eindringtiefe λ_L . Gleichung (2.24) besitzt Lösungen, die die Emission sowie die Absorption von Mikrowellenstrahlung erlauben, und somit könnten die erwähnten Mikrowellenexperimente an supraleitenden Punktkontakten im Sinne des Josephson-Effektes verstanden werden.

2.3.3 Mikrobrücke nach Kulik und Omelyanchouk

Die Eigenschaften eines geometrischen Josephson-Kontaktes in der Form einer Mikrobrücke im sauberen Grenzfall wurden von I. O. Kulik und A. N. Omelyanchouk untersucht [34, 35]. Als Modell diente für diese Untersuchung eine Geometrie, die aus zwei supraleitenden Halbräumen besteht, die in einem kreisförmigen Bereich mit der Fläche $S = \pi a^2$ verbunden sein sollen (*superconductor-orifice-superconductor* bzw. S-O-S, siehe Abb. 2.3). Für den Radius a soll gelten, dass $a \ll \xi_0$ und $a \ll l$, wobei ξ_0 die Kohärenzlänge und l die mittlere freie Weglänge bezeichnet. Zur Berechnung des Verhaltens dieser Geometrie wurde mikroskopische Theorie in Form der Eilenberger-Gleichungen verwendet, die auch im Rahmen der vorliegenden Arbeit gelöst werden.

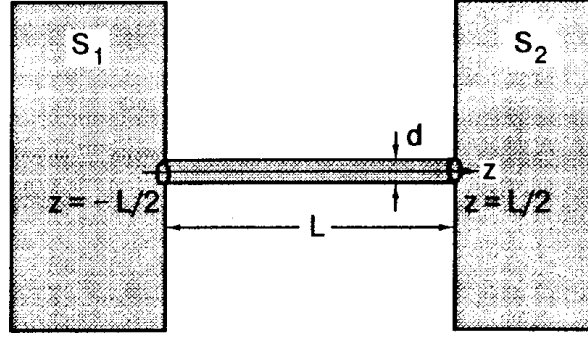


Abbildung 2.5: Modell einer Mikrobrücke der Länge L und der Breite d zwischen zwei ausgedehnten Supraleitern S_1 und S_2 (entnommen aus [36]).

Vernachlässigt man, abgesehen vom Phasensprung $\Delta\phi$ über den Kontakt, die räumliche Variation des Paarpotentials in der Umgebung der Kontaktfläche, so lassen sich die sogenannten quasiklassischen Propagatoren der Eilenberger-Theorie für die beiden Halbräume getrennt analytisch angeben. Mit diesen folgt als Ergebnis für den Gesamtstrom $I = jS = j\pi a^2$ durch die Öffnung als Funktion der Phasendifferenz $\Delta\phi$

$$I(\Delta\phi) = \frac{\pi\Delta(T)}{eR_N} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) \tanh\left(\frac{\Delta(T) \cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right)}{2k_B T}\right) \quad (2.25)$$

Der Widerstand im Normalzustand R_N ist hierbei gegeben durch

$$\frac{1}{R_N} = \frac{1}{2} S e^2 v_F N(0) \quad (2.26)$$

wobei $N(0) = mp_F/(2\pi\hbar)^2$ die Zustandsdichte auf der Fermi-Fläche bezeichnet. Diese Darstellung des Widerstandes R_N ist aus Referenz [36] entnommen.

Die Temperaturabhängigkeit des kritischen Stromes, der definiert ist als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung (2.25), fällt nahe der kritischen Temperatur T_c mit dem in Abschnitt 2.3.1 beschriebenen Resultat für einen Tunnelkontakt nach Ambegaokar und Baratoff zusammen (siehe Abb. 2.4). Bei tiefen Temperaturen steigt der kritische Strom allerdings stärker an und der Wert für $T \rightarrow 0$ ist gerade doppelt so groß wie im Fall des Tunnelkontaktes. Das Ergebnis (2.25) wird im Rahmen der in dieser Arbeit vorgestellten selbstkonsistenten Lösungen der mikroskopischen Eilenberger-Theorie, die eine Variation des komplexen Paarpotentials in der Umgebung der Mikrobrücke berücksichtigen, im Grenzfall einer verschwindend kleinen Kontaktfläche S reproduziert und dient als Referenz zur Verifikation der Ergebnisse.

2.3.4 Ballistische Mikrobrücke nach Zareyan, Kolesnichenko und Omelyanchouk

Von M. Zareyan, Yu. A. Kolesnichenko und A. N. Omelyanchouk wurde der Stromtransport durch einen ballistischen supraleitenden Mikrokanal als Modellsystem für einen Mikrobrücken-Josephson-Kontakt untersucht [36]. Mit Hilfe der in Abbildung 2.5 wiedergegebenen Modellgeometrie wurde dabei insbesondere der Einfluss der Länge des Kanals auf den kritischen Strom berücksichtigt.

Zur theoretischen Beschreibung der Modellgeometrie wurden die mikroskopischen Eilenberger-Gleichungen verwendet. Dies ist angebracht, da die Abmessungen der Geometrie groß sind verglichen mit der Fermi-Wellenlänge λ_F . Wird die Breite des Kanals d zusätzlich als klein verglichen mit der Kohärenzlänge ξ_0 und die Länge des Kanals L als groß verglichen

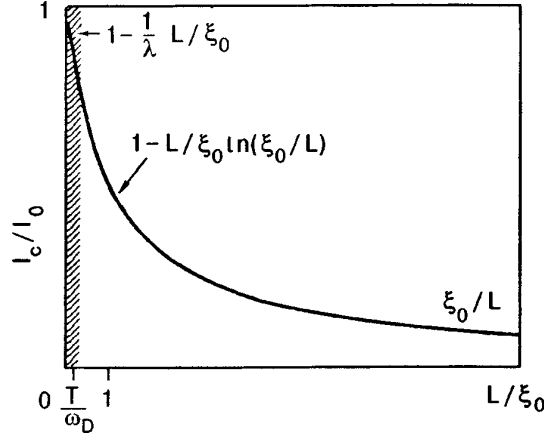


Abbildung 2.6: Abhängigkeit des kritischen Stroms I_c von der Länge der Mikrobrücke L im Temperaturbereich nahe der kritischen Temperatur T_c , entnommen aus [36].

mit d angenommen ($d \ll \xi_0$, $L \gg d$), so hängt das Problem nur noch von der z -Koordinate ab. Als Randbedingung bei $z = \pm L/2$ zur eindeutigen Bestimmung des quasiklassischen Propagators $G(\omega, \mathbf{p}_{F,z}, z)$ können nun die *bulk*-Lösungen¹ für die Supraleiter S_1 und S_2 mit einer Phasendifferenz von $\Delta\phi$ eingesetzt werden. Um mit diesen Randbedingungen eine selbstkonsistente Lösung für den quasiklassischen Propagator im Kanal zu bestimmen, muss die Gap-Gleichung gelöst werden. Im vorliegenden Fall führt dies auf eine geschlossene Integralgleichung für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, T)$, die nahe der kritischen Temperatur T_c analytisch gelöst werden kann. Mit der so erhaltenen selbstkonsistenten Lösung für $\Delta(\mathbf{r}, T)$ kann die Stromgleichung der mikroskopischen Eilenberger-Theorie gelöst werden, um den Strom durch den Mikrokanal in Abhängigkeit der Phasendifferenz $\Delta\phi$ zu berechnen. Schließlich gibt es nahe der kritischen Temperatur T_c vier Bereiche der Länge L , für die die Lösung getrennt untersucht werden kann.

1. Mikrobrücke mit verschwindender Länge, $L = 0$:

Für den kritischen Strom, definiert als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung, folgt:

$$I_0 = \frac{\pi\Delta^2(T)}{4eR_N k_B T_c} \quad (2.27)$$

Dieses Ergebnis fällt nahe T_c mit dem Ergebnis für die Mikrobrücke in der Form einer lochförmigen Blende, Gleichung (2.25), zusammen.

2. Sehr kurze Mikrobrücken, $L \ll a_D$ (mit der Längenskala $a_D \sim v_F/\omega_D$ und der Debye-Frequenz ω_D):

$$I_c(L) = I_0 \left(1 - \frac{8}{\pi\lambda} \frac{k_B T_c L}{\hbar v_F} \right) \quad (2.28)$$

Es existiert folglich ein Längenbereich $L \ll a_D$, in dem der kritische Strom einer Mikrobrücke linear mit der Länge L abnimmt, wobei die Änderungsrate mit der Kopplungskonstanten λ zusammenhängt. Die Längenskala a_D ist charakterisiert durch die Strecke, die ein Ladungsträger mit der Geschwindigkeit v_F in der Flugzeit $1/\omega_D$ zurücklegt. In konventionellen Supraleitern gilt $a_D \ll \xi_0$, wohingegen in Hochtemperatursupraleitern a_D mit ξ_0 vergleichbar ist. Folglich ist in Hochtemperatursupraleitern der kritische Strom von Kontakten der Länge $L \ll a_D$ abhängig von der Kopplungskonstanten.

¹Das Innere eines ausgedehnten Supraleiters wird im Folgenden abkürzend mit *bulk* bezeichnet.

3. Kurze Mikrobrücken, $a_D \ll L \ll \xi_0$:

$$I_c(L) \approx I_0 \left(1 - \text{const} \frac{L}{\xi_0} \ln \frac{\xi_0}{L} \right) \quad (2.29)$$

4. Lange Mikrobrücken, $L \gg \xi_0$:

$$I_c(L) = \frac{14}{3\pi^2} \zeta(3) I_0 \frac{\hbar v_F}{k_B T_c L} \quad (2.30)$$

Für große Längen des Mikrokanals fällt der kritische Strom proportional zu $1/L$ ab.

Die verschiedenen Längsbereiche sind in Abbildung 2.6 skizziert.

Da als Randbedingung gefordert wird, dass der quasiklassische Propagator $G(\omega, \mathbf{p}_{F,z}, z)$ bei $z = \pm L/2$ mit der *bulk*-Lösung übereinstimmt, wird in dem hier untersuchten Modell die Phasendifferenz $\Delta\phi$ zwischen den Punkten $z = \pm L/2$ gemessen. Der Übergang vom Kanal zu den ausgedehnten supraleitenden Elektroden und ihre wechselseitige Beeinflussung wird in diesem Modell folglich nicht berücksichtigt.

2.4 π -Josephson-Kontakte

Die Möglichkeit einer Strom-Phasen-Beziehung eines Josephson-Kontaktes der Form $I = I_c \sin(\gamma + \pi)$ wurde erstmals 1977 von L. N. Bulaevskiĭ, V. V. Kuziĭ und A. A. Sobyannin bei Josephson-Kontakten mit magnetischen Störstellen erkannt [9] und damit der Begriff „ π -Josephson-Kontakt“ geprägt. In der selben Arbeit, in der auf die Möglichkeit eines π -Josephson-Kontaktes hingewiesen wurde, wurde auch die Möglichkeit eines spontanen Kreisstromes in einem supraleitenden Ring mit einem π -Kontakt sowie das damit verbundene Auftreten eines spontanen magnetischen Flusses beschrieben. Von A. I. Buzdin *et al.* wurde 1982 berechnet, dass der kritische Strom eines Josephson-Kontaktes mit einer ferromagnetischen Tunnelbarriere (SFS-Kontakt) als Funktion der Austausch-Wechselwirkung sowie als Funktion der Dicke der ferromagnetischen Schicht Oszillationen mit alternierenden Bereichen positiven und negativen kritischen Stromes aufweisen kann [37].

Eine erste experimentelle Realisierung eines π -Josephson-Kontaktes in Form eines Tunnelkontaktes mit einer ferromagnetischen Zwischenschicht wurde 2001 von V. V. Ryazanov *et al.* publiziert [38]. Dieses Thema wurde von verschiedenen Gruppen aufgegriffen und die erfolgreiche Realisierung einer negativen π -Kopplung durch SFS-Kontakte sowie SFS-Kontakte mit einer zusätzlichen nichtmagnetischen Tunnelbarriere (SIFS- und SIFIS-Kontakte) wurde mehrfach berichtet [39, 40]. Dabei wurde sowohl die Entstehung spontaner Kreisströme in einem supraleitenden Ring mit einem π -Kontakt nachgewiesen [41] als auch das dynamische Verhalten der Kontakte unter Mikrowelleneinstrahlung untersucht [42]. Auch die Strom-Phasen-Beziehungen von ferromagnetischen π -Kontakten wurden vermessen, insbesondere nahe des 0 - π -Überganges [43]. Durch eine stufenförmige Variation der Dicke der ferromagnetischen Schicht innerhalb eines ausgedehnten Kontaktes konnten auch kombinierte 0 - π -Kontakte hergestellt werden, bei denen sich am Übergang zwischen dem Bereich mit 0 -Kopplung und dem Bereich mit π -Kopplung spontan ein fraktionales Flussquant ausbildet [44]. Durch verbesserte Herstellungsverfahren konnten auch mehrfache Übergänge zwischen dem 0 - und dem π -Zustand bei einer Variation der Dicke der ferromagnetischen Schicht beobachtet werden [45].

Eine zweite Realisierung von π -Josephson-Kontakten basiert auf der Ausnutzung der d -Wellen-Symmetrie der Hochtemperatur-Supraleiter aus der Klasse der Kuprate. Durch die Kombination eines Hochtemperatur-Supraleiters (YBCO) mit einem konventionellen Supraleiter (Pb) wurde von D. A. Wollman *et al.* ein Quanteninterferometer hergestellt, das sensitiv auf die relative Phase des Paarpotentials des Hochtemperatur-Supraleiters für verschiedene Orientierungen ist (siehe Abb. 2.7). Damit konnte die Symmetrie der Paarungswechselwirkung nachgewiesen und gleichzeitig ein 0 - π -SQUID hergestellt werden [46].

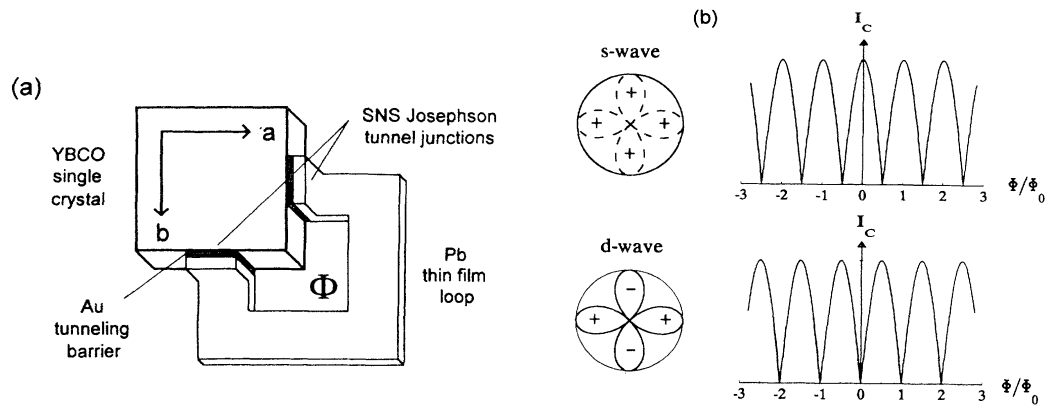


Abbildung 2.7: Links: Aufbau eines YBCO-Pb-SQUIDs zum Nachweis der d -Wellen-Symmetrie des Hochtemperatur-Supraleiters YBCO. Rechts: Typische Modulation des kritischen Stromes des SQUIDs in Abhängigkeit des magnetischen Flusses für s - und d -Wellen-Symmetrie. Im Fall der d -Wellen-Symmetrie ist die $I_c(\Phi)$ -Kennlinie um ein halbes Flussquant $\Phi_0/2$ verschoben. Abbildungen entnommen aus [46].

Die Herstellung von Josephson-Kontakten basierend auf Korngrenzen, die Bereiche von dünnen Filmen eines Hochtemperatur-Supraleiters mit unterschiedlicher Kristallorientierung verbinden, diente zunächst ebenfalls dem experimentellen Nachweis der d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung in diesen Materialien [47], stellt aber gleichzeitig die Realisierung von Josephson-Kontakten mit einer intrinsischen Phasendifferenz dar. Mit diesen phasensensitiven Experimenten konnte die Frage nach der Symmetrie der Paarwechselwirkung in den Hochtemperatur-Supraleitern aus der Klasse der Kuprate eindeutig geklärt werden [48, 49].

Korngrenzen-Josephson-Kontakte in Hochtemperatur-Supraleitern wurden im Folgenden sowohl von theoretischer Seite als auch experimentell im Detail untersucht. Theoretische Arbeiten zu diesem Thema sind unter anderem in den Referenzen [50–53] sowie in der Überblicksarbeit [54] zu finden. Experimentelle Arbeiten, speziell zu SQUIDs, die einen π -Kontakt enthalten, sind unter anderem in den Referenzen [55–58] veröffentlicht. In den Arbeiten [55, 57] werden dabei die Strom-Phasen-Beziehungen der Korngrenzen-Josephson-Kontakte experimentell erschlossen.

Eine dritte experimentelle Realisierung eines π -Josephson-Kontaktes wurde von J. J. A. Baselmans *et al.* publiziert [59, 60]. Der Josephson-Kontakt besteht dabei aus einer Supraleiter-Normalleiter-Supraleiter-Struktur mit einer modifizierten Energieverteilung der stromtragenden Elektronen im Normalleiter. Mit Hilfe zweier zusätzlicher Elektroden wird dazu ein Kontrollstrom durch den Normalleiter geschickt. Sind die Abmessungen der Struktur ausreichend klein, so wird die Energieverteilung der stromtragenden Elektronen im Normalleiter durch die zusätzlichen Elektroden, die als Reservoirs dienen, modifiziert. Diese veränderte Energieverteilung beeinflusst die Besetzung der gebundenen Andreev-Zustände, die den Strom über den Josephson-Kontakt tragen. Durch die Variation des Kontrollstromes kann so ein Übergang zu einem π -Kontakt erreicht werden.

In Referenz [61] wird die Struktur des Supraleiter-Normalleiter-Supraleiter-Kontaktes von Baselmans *et al.* aufgegriffen und variiert, indem die zwei zusätzlichen Steuerelektroden durch eine einzige ersetzt werden und der Kontrollstrom von dieser einen Steuerelektrode direkt in einen der beiden Supraleiter injiziert wird. Auch mit dieser einfacheren Struktur mit nur einer zusätzlichen Steuerelektrode konnte der Übergang zu einem π -Kontakt realisiert werden.

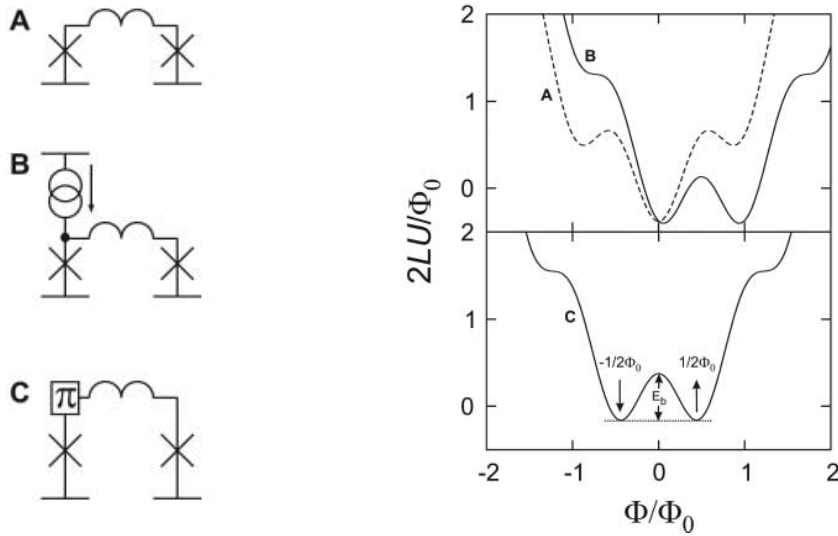


Abbildung 2.8: Potentielle Energie U für drei unterschiedliche dc-SQUID-Konfigurationen. Die Skizze sowie die Kurve **A** entsprechen einem Standard-dc-SQUID mit zwei normalen Josephson-Kontakten. **B** repräsentiert ein dc-SQUID mit einem zusätzlichen Bias-Strom, der gerade einem halben Flussquant entspricht. **C** ist ein dc-SQUID mit einem normalen und einem π -Josephson-Kontakt. Sowohl in Konfiguration **B** als auch in Konfiguration **C** bildet sich ein entarteter Grundzustand aus, in **B** ist dazu allerdings ein zusätzlicher Bias-Strom notwendig. Abbildungen entnommen aus [63].

Josephson-Kontakte mit einer intrinsischen Phasendifferenz eröffnen interessante Möglichkeiten für supraleitende Elektronik, sowohl im Bereich der Grundlagenforschung als auch für technische Anwendungen. Wird ein π -Josephson-Kontakt in eine geschlossene supraleitende Schleife integriert, so fließt aufgrund der Kombination aus der intrinsischen Phasendifferenz des Josephson-Kontaktes und der Stetigkeit der makroskopischen Wellenfunktion im Grundzustand ein spontaner Kreisstrom, der gerade einem halben Flussquant $\Phi_0/2$ entspricht. Da für den spontanen Kreisstrom keine Vorzugsrichtung gegeben ist, kann dieser entweder ein positives oder negatives Vorzeichen aufweisen und die beiden Zustände mit $\pm\Phi_0/2$ bilden einen entarteten Grundzustand. Dieser entartete Grundzustand kann zum Beispiel als elementares Speicherelement verwendet werden, wobei die Orientierung des Stromes den Zustand des Speichers repräsentiert.

Kombiniert man einen π -Josephson-Kontakt und einen normalen Josephson-Kontakt zu einem dc-SQUID, so sind die Kennlinien für den kritischen Strom des SQUIDs in Abhängigkeit des Flusses Φ durch das SQUID-Loch sowie für die dc-Spannung, die über den SQUID abfällt, also $I_c(\Phi)$ und $V_{dc}(\Phi)$, gegenüber einem Standard-SQUID (mit zwei normalen Kontakten) um ein halbes Flussquant $\Phi_0/2$ verschoben. Ein derartiges 0- π -SQUID, bestehend aus einem normalen und einem π -Josephson-Kontakt, stellt somit ein komplementäres Element zu einem 0-0-SQUID, bestehend aus zwei normalen Josephson-Kontakten, dar [62].

Kombiniert man 0-0-SQUIDs und die dazu komplementären 0- π -SQUIDs, so sind vielfältige Verbesserungen supraleitender *rapid single flux quantum*-Schaltungen (RSFQ, [27]) möglich. Verwendet man beide Grundelemente, so sind Schaltungen mit komplementären logischen Blöcken möglich, ohne dass dafür Leitungen für zusätzliche Bias-Ströme notwendig wären (siehe Abb. 2.8). Des Weiteren lässt sich bei der gleichzeitigen Verwendung von normalen und π -Josephson-Kontakten für RSFQ-Schaltungen die Symmetrie der logischen Blöcke verbessern und breitere Toleranzbereiche sind möglich [63]. Schließlich lässt sich durch die Verwendung von π -Josephson-Kontakten auch die Größe der logischen Blöcke der RSFQ-Schaltungen signifikant verringern [64].

Kapitel 3

Mikroskopische Theorie geometrischer Josephson-Kontakte

3.1 Modellgeometrie

In dieser Arbeit werden geometrische Josephson-Kontakte im Rahmen der mikroskopischen Eilenberger-Theorie der Supraleitung anhand verschiedener zweidimensionaler Modellgeometrien untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der selbstkonsistenten Berechnung von Strom-Phasen-Beziehungen, die den Gleichstrom-Josephson-Effekt charakterisieren. Eine typische Modellgeometrie ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Anhand dieser Geometrie werden in diesem Kapitel die relevanten Gleichungen, die zugehörigen Randbedingungen und die Algorithmen zur Lösung dieser Gleichungen sowie deren numerische Umsetzung vorgestellt. In den folgenden Kapiteln werden Engstellen unterschiedlicher Geometrie untersucht und entsprechende Ergebnisse präsentiert. Die theoretische Beschreibung ist jedoch von der genauen Geometrie der Engstelle unabhängig und wird deshalb in diesem Kapitel einheitlich dargestellt.

Die verwendete Modellgeometrie besteht aus einem langen Streifen des supraleitenden Materials der Breite W , die lokal durch eine Engstelle verringert ist. Diese Engstelle wird bei geeigneter Wahl der geometrischen Parameter zu einem Josephson-Kontakt. Alle relevanten Größen werden für einen Abschnitt des Streifens der Länge L berechnet (siehe Abb. 3.1). Am linken und rechten Rand dieses Abschnittes wird die Phase des Paarpotentials durch geeignete Randbedingungen auf die Werte ϕ_L bzw. ϕ_R gesetzt und es ergibt sich somit eine Phasendifferenz von $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L$ über die Engstelle. Der Anschluss an den Streifen (Bereiche mit $|x| > L/2$) wird ebenso durch geeignete Randbedingungen realisiert. Diese werden im Folgenden im Detail beschrieben.

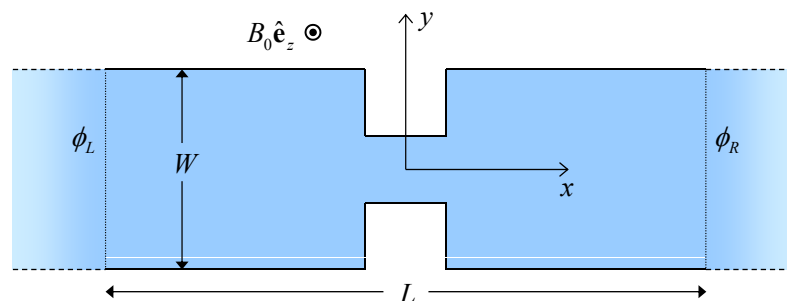


Abbildung 3.1: Typische Modellgeometrie für einen geometrischen Josephson-Kontakt. Der Josephson-Kontakt wird durch eine Engstelle gebildet, die in einen Kanal der Breite W eingebettet ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wird unter anderem der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes auf das Verhalten eines geometrischen Josephson-Kontaktes untersucht. Da im Fall dünner Filme externe Magnetfelder in der Regel senkrecht zur Filmebene orientiert werden, wird auch in dieser Arbeit das externe Magnetfeld

$$\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{\mathbf{e}}_z \quad (3.1)$$

als senkrecht zur zweidimensionalen Modellgeometrie orientiert angenommen.

Aufgrund der als zylindrisch angenommenen Fermi-Fläche mit in $\hat{\mathbf{e}}_z$ -Richtung orientierter Zylinderachse können die Berechnungen auf die xy -Ebene beschränkt werden. Die Ergebnisse sind gültig für supraleitende Filme beliebiger Dicke, wenn ein entsprechender Wert für die Londonsche Eindringtiefe verwendet wird [65]. Die Ergebnisse dieser Arbeit beziehen sich dann auf die Ebene in halber Höhe der Filmdicke in z -Richtung und alle auftretenden Magnetfelder sind somit parallel zu $\hat{\mathbf{e}}_z$ orientiert.

3.2 Mikroskopische Eilenberger-Theorie

3.2.1 Gap- und Stromgleichung

Die mikroskopische Eilenberger-Theorie oder auch quasiklassische Theorie der Supraleitung ist die geeignete Methode zur Berechnung der Eigenschaften supraleitender Systeme unter Berücksichtigung der Probengeometrie sowie von Störstellen. Die relevanten Längenskalen, für die eine Beschreibung im Rahmen der quasiklassischen Theorie möglich ist, sind die Kohärenzlänge ξ_0 und die magnetische Eindringtiefe λ_L . Die quasiklassische Theorie ist mikroskopisch begründet und erlaubt die Beschreibung des supraleitenden Zustandes im gesamten Temperaturbereich von $T = 0$ bis zur Sprungtemperatur T_c . Die Grundlage der quasiklassischen Theorie bilden Gleichungen für die quasiklassischen Propagatoren, die von G. Eilenberger [66] bzw. von A. I. Larkin und Y. N. Ovchinnikov [67] unabhängig hergeleitet wurden. Die wesentliche Voraussetzung bei der Herleitung dieser Gleichungen aus den Gorkov-Gleichungen besteht darin, dass die charakteristischen Längenskalen ξ_0 und λ_L als wesentlich größer angenommen werden als die Wellenlänge der Elektronen an der Fermi-Kante. Dies ist gerade die sogenannte quasiklassische Bedingung $k_F \xi_0 \gg 1$. Die relevante Größe, die durch die so abgeleiteten Gleichungen festgelegt wird, ist der quasiklassische Propagator:

$$\hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = \begin{pmatrix} g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) & f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \\ \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) & \bar{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Mit diesem Propagator können alle relevanten physikalischen Größen, wie z. B. die Zustandsdichte und die Stromverteilung berechnet werden. Die unter Annahme der quasiklassischen Bedingung $k_F \xi_0 \gg 1$ von Eilenberger gewonnenen Gleichungen für den quasiklassischen Propagator lauten im Fall eines Supraleiters im sauberen Grenzfall in Kommutatorschreibweise:

$$-i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = \left[\begin{pmatrix} i\varepsilon_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) & -\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) & -i\varepsilon_n - \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \right]_- \quad (3.3)$$

Hierbei steht $\mathbf{p}_F = \hbar \mathbf{k}_F$ für einen Punkt auf der Fermi-Fläche, \mathbf{v}_F ist die Fermi-Geschwindigkeit, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ bezeichnet das Vektorpotential und \mathbf{r} bezeichnet einen Punkt im Ortsraum. Die Größen

$$\varepsilon_n = (2n + 1)\pi k_B T \quad (3.4)$$

sind die fermionischen Matsubara-Frequenzen. Gleichung (3.3) wird ergänzt durch folgende Normierungsbedingung, die von allen physikalisch sinnvollen Lösungen erfüllt werden muss:

$$\hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \cdot \hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = -\pi^2 \cdot \hat{1} \quad (3.5)$$

Lösungen für die Komponenten des quasiklassischen Propagators können gefunden werden, indem die Selbstkonsistenz-Gleichungen für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ und die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ gelöst werden. Nimmt man eine Paarwechselwirkung der Form

$$V(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}'_F) = V \chi(\mathbf{p}_F) \chi(\mathbf{p}'_F) \quad (3.6)$$

mit einer Symmetriefunktion $\chi(\mathbf{p}_F)$ an, so lässt sich das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ in einen ortsabhängigen komplexen Anteil $\Delta(\mathbf{r})$ und einen impulsabhängigen Anteil $\chi(\mathbf{p}_F)$ faktorisieren

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{p}_F) \quad (3.7)$$

und die Selbstkonsistenz-Gleichungen lauten:

$$\Delta(\mathbf{r}) = VN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \quad (3.8)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2e N(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \quad (3.9)$$

Hierbei bezeichnet $N(0)$ die Zustandsdichte an der Fermi-Kante im Normalzustand. Diese beiden Gleichungen, die oft Gap- und Stromgleichung genannt werden, stellen Stationaritätsbedingungen für die Minimierung der Freien Energie bezüglich $\Delta^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ und $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ dar (siehe dazu auch Anhang C).

In der Gap- und der Stromgleichung ist mit $\langle \dots \rangle_{FS}$ die Mittelung über die Fermi-Fläche bezeichnet. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Fermi-Fläche als zylindrisch angenommen¹. Da die Zylinderachse parallel zur z -Achse orientiert sein soll, kann die Fermi-Fläche in der xy -Ebene allein durch den Winkel θ parametrisiert werden, der bezüglich der x -Achse gemessen wird. Da des Weiteren angenommen wird, dass der Betrag der Fermi-Geschwindigkeit $v_F = |\mathbf{v}_F|$ auf der gesamten Fermi-Fläche konstant sein soll, kann die Fermi-Geschwindigkeit in der Form

$$\mathbf{v}_F = v_F (\hat{\mathbf{x}} \cos \theta + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta) \quad (3.10)$$

geschrieben werden. Daraus folgt sofort, dass die Fermi-Geschwindigkeit stets parallel zum Fermi-Wellenvektor \mathbf{k}_F orientiert ist:

$$\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \parallel \mathbf{k}_F$$

Damit folgt für die Fermi-Flächen-Mittelung im Fall der zylindrischen Fermi-Fläche die konkrete Darstellung $\langle \dots \rangle_\theta = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \dots$.

Die Komponenten des quasiklassischen Propagators $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ sind im Allgemeinen Funktionen des Paarpotentials $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ und, über das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, auch Funktionen der Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$. Somit stellen die beiden Gleichungen (3.8) und (3.9) gekoppelte Selbstkonsistenz-Gleichungen dar, die im Allgemeinen nicht analytisch gelöst werden können.

Da es das Ziel der vorliegenden Arbeit ist, Josephson-Effekte in geometrischen Josephson-Kontakten quantitativ zu untersuchen, ist es unumgänglich, das Paarpotential und die Ströme selbstkonsistent zu bestimmen. Dies bedeutet, dass die Gap- und die Stromgleichung ohne die Verwendung approximativer Modelle gelöst werden müssen. Selbstkonsistente Lösungen enthalten lokale Modulationen der Amplitude des Paarpotentials und können somit eine lokale Unterdrückung der Supraleitung beschreiben. Lokale Unterdrückung der Supraleitung ist aber gerade die wesentliche Ursache für das Auftreten des Josephson-Effektes.

¹Betrachtet man sehr dünne Filme, so kann die Fermi-Fläche immer als näherungsweise zylindrisch angenommen werden. Für die in den Kapiteln 5 und 6 betrachteten d -Wellen-Supraleiter stellen die Kuprate das wichtigste Modellsystem dar. Im Fall der Kuprate kann aufgrund des geschichteten Aufbaus der Kristallstruktur in sehr guter Näherung von einer zylindrischen Fermi-Fläche ausgegangen werden.

Soweit dies möglich ist, werden die Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen in den folgenden Kapiteln mit den Ergebnissen approximativer Modelle verglichen. Diese approximativen Modelle können in der Regel keine quantitativen Vorhersagen liefern, ermöglichen aber zumindest eine teilweise analytische Untersuchung des Einflusses verschiedener Parameter. In diesem Kapitel wird das Vorgehen für die numerische Berechnung der selbstkonsistenten Lösungen beschrieben, während die verschiedenen approximativen Modelle eingeführt werden, wenn das jeweilige Modell zum Vergleich mit den selbstkonsistenten Ergebnissen herangezogen wird.

3.2.2 Maxwell-Gleichungen und Vektorpotential

Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, müssen die Gap-Gleichung (3.8) und die Stromgleichung (3.9) durch die Maxwell-Gleichung

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (3.11)$$

und die Definition des (magnetischen) Vektorpotentials

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (3.12)$$

vervollständigt werden. Diese beiden Gleichungen stellen die Verknüpfung zwischen der Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ und dem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ her und führen damit zu einer Kopplung der Gap-Gleichung und der Stromgleichung. Gleichzeitig können über das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ äußere Magnetfelder berücksichtigt werden.

3.2.3 Riccati-Parametrisierung

Verwendet man die sogenannte Riccati-Parametrisierung, so können die Komponenten des quasiklassischen Propagators $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ durch zwei komplexe Größen $a(s)$ und $b(s)$ ausgedrückt werden, die als Riccati-Amplituden bezeichnet werden [68, 69]:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = \frac{2a(s)}{1 + a(s)b(s)} \quad (3.13)$$

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = -i \frac{1 - a(s)b(s)}{1 + a(s)b(s)} \quad (3.14)$$

Die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ sind Lösungen zweier Differentialgleichungen vom Riccati-Typ:

$$\hbar v_F \partial_s a(s) + [2\tilde{\varepsilon}_n + \Delta^\dagger(\mathbf{r}(s), \mathbf{p}_F) a(s)] a(s) - \Delta(\mathbf{r}(s), \mathbf{p}_F) = 0 \quad (3.15)$$

$$\hbar v_F \partial_s b(s) - [2\tilde{\varepsilon}_n + \Delta(\mathbf{r}(s), \mathbf{p}_F) b(s)] b(s) + \Delta^\dagger(\mathbf{r}(s), \mathbf{p}_F) = 0 \quad (3.16)$$

Die Riccati-Differentialgleichungen müssen entlang von Trajektorien im Ortsraum $\mathbf{r}(s)$ gelöst werden, die parallel zur Fermi-Geschwindigkeit \mathbf{v}_F orientiert sind. Im Fall der zylindrischen Fermi-Fläche (3.10) gilt

$$\mathbf{r}(s) = \mathbf{r}_0 + s \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

wobei \mathbf{r}_0 der Aufpunkt und s der Laufparameter der Trajektorie ist. Des Weiteren sind mit $\tilde{\varepsilon}_n$ die modifizierten Matsubara-Frequenzen bezeichnet, für die folgende Definition gilt:

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (3.18)$$

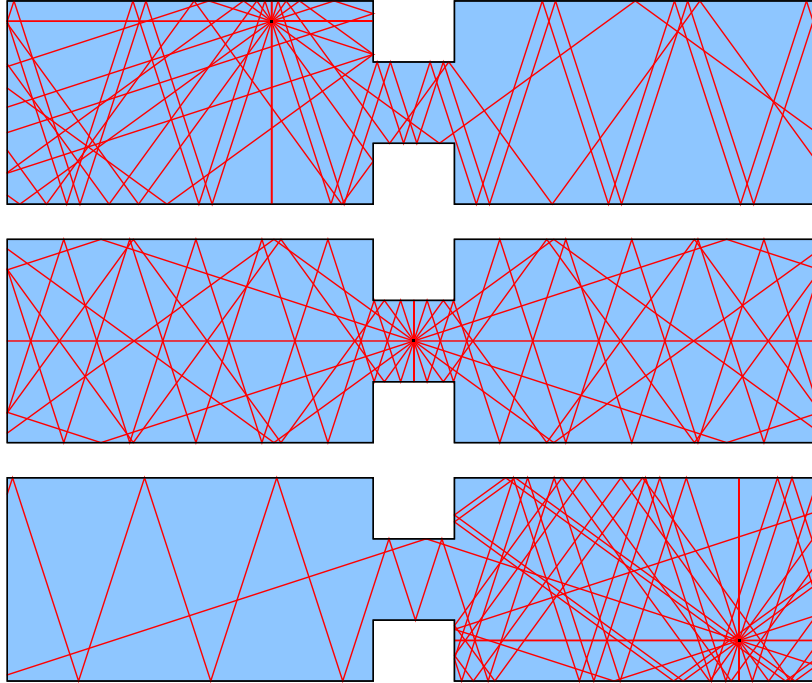


Abbildung 3.2: Einige exemplarische Trajektorien ausgehend von drei verschiedenen Aufpunkten für die Modellgeometrie aus Abbildung 3.1.

Um bei der Integration der Riccati-Gleichungen stabile Lösungen zu erhalten, muss die Gleichung für $a(s)$ entlang der Trajektorie in Richtung der Fermi-Geschwindigkeit $\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F)$ und die Gleichung für $b(s)$ in der entgegengesetzten Richtung integriert werden. Als Startwerte für die Integration können die Lösungen tief im Inneren des Supraleiters verwendet werden, die durch Vernachlässigung der Gradiententerme gewonnen werden können. Für $\varepsilon_n > 0$ folgt:

$$a(-\infty) = \frac{\Delta(-\infty)}{\tilde{\varepsilon}_n + \sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\Delta(-\infty)|^2}} \quad (3.19)$$

$$b(+\infty) = \frac{\Delta^\dagger(+\infty)}{\tilde{\varepsilon}_n + \sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\Delta(+\infty)|^2}} \quad (3.20)$$

Abgesehen vom linken und rechten Ende der Modellgeometrie aus Abbildung 3.1 stellen alle Begrenzungen der Geometrie Oberflächen des supraleitenden Materials dar. Trifft eine Trajektorie, die entsprechend Gleichung (3.17) ausgehend von einem Aufpunkt \mathbf{r}_0 im Inneren des Supraleiters mit einem Winkel θ startet, auf eine Oberfläche des Supraleiters, so ist ihr weiterer Verlauf durch spiegelnde Randbedingungen festgelegt. Dies bedeutet, dass die Trajektorie entsprechend der Regel Einfallswinkel = Ausfallswinkel fortgesetzt werden muss. Da die Trajektorien formal bis $s = \pm\infty$ definiert sind, führt diese Konstruktionsvorschrift unter Umständen zu vielfachen Reflexionen der Trajektorien in der Geometrie. In Abbildung 3.2 sind für drei exemplarisch ausgewählte Aufpunkte die zentralen Abschnitte einiger Trajektorien skizziert.

Entsprechend ihrer Konstruktionsvorschrift verhalten sich die Trajektorien in einer definierten Geometrie wie Lichtstrahlen der Strahlenoptik und zu ihrer Erzeugung muss ein sogenanntes Raytracing-Verfahren implementiert werden. Die Riccati-Gleichungen (3.15) und (3.16) müssen dann entlang der so konstruierten Trajektorien gelöst werden. Eine Oberfläche des Supraleiters impliziert hierbei, dass die allgemeinen Randbedingungen für die

Riccati-Amplituden, wie sie von A. Shelankov und M. Ozana [70] sowie M. Eschrig [71] angegeben wurden, in einer sehr einfachen Form verwendet werden können. Spiegelnde Randbedingungen mit verschwindendem Transmissionskoeffizienten führen dazu, dass die Riccati-Amplituden während einer Reflexion unverändert erhalten bleiben und der Endwert der Integration der Riccati-Gleichungen entlang eines Abschnittes einer Trajektorie bis zum Erreichen einer Oberfläche gleichzeitig den Startwert für die Integration entlang des nächsten Abschnittes der Trajektorie darstellt. Wenn für eine Reflexion der einlaufende Fermi-Wellenvektor mit $\mathbf{k}_{F,in}$ und der auslaufende Fermi-Wellenvektor mit $\mathbf{k}_{F,out}$ bezeichnet wird, so gelten folglich folgende Stetigkeitsbedingungen für die Riccati-Amplituden:

$$a(\mathbf{k}_{F,in}) = a(\mathbf{k}_{F,out}) \quad (3.21)$$

$$b(\mathbf{k}_{F,in}) = b(\mathbf{k}_{F,out}) \quad (3.22)$$

Obwohl die Trajektorien formal bis $s = \pm\infty$ definiert sind, kann die Integration der Riccati-Differentialgleichungen entlang der Trajektorien auf eine endliche Länge beschränkt werden. Die Auswertung der Riccati-Differentialgleichungen auf der imaginären Achse an den Punkten $i\varepsilon_n$ führt zu einer schnell abklingenden Abhängigkeit der Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ von den Startwerten. Dieser Umstand erlaubt es, die Länge der Trajektorien endlich zu wählen.

Mit Hilfe der Riccati-Parametrisierung lässt sich die Berechnung der Komponenten des quasiklassischen Propagators $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ auf die Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung in der Form eines Anfangswertproblems zurückführen, wobei die so konstruierten Lösungen automatisch die Normierungsbedingung (3.5) erfüllen.

Es ist zu beachten, dass die Größe $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F)$ mit $\Delta(\mathbf{r}) = |\Delta(\mathbf{r})|e^{i\phi(\mathbf{r})}$ in den Riccati-Gleichungen das komplexe Paarpotential bezeichnet. Der Gradient der Phase des Paarpotentials $\nabla\phi(\mathbf{r})$ ergibt zusammen mit dem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ die eichinvariante suprafluide Geschwindigkeit $\mathbf{v}_s(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\hbar\nabla\phi(\mathbf{r}) - \frac{2e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \quad (3.23)$$

Im Folgenden wird das Verfahren angegeben, nach dem das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ berechnet wird. Die Verteilung der Phase des Paarpotentials $\phi(\mathbf{r})$ folgt dann aus der Gap-Gleichung (3.8), die, zusammen mit der Stromgleichung (3.9), die Freie Energie minimiert. Folglich wird bei der Wahl der Art und Weise, auf die das Vektorpotential berechnet wird, von der Eichfreiheit Gebrauch gemacht. Nachdem jedoch eine bestimmte Methode zur Berechnung des Vektorpotentials $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ festgelegt ist, folgt die Phase des Paarpotentials $\phi(\mathbf{r})$ eindeutig als Lösung der Strom- und der Gap-Gleichung. Damit liegt eine spezielle Eichung fest, bei der im Allgemeinen sowohl ein komplexes Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ als auch ein endliches Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ vorliegt.

In der gewählten Eichung ist zu beachten, dass Strom-Phasen-Beziehungen durch die eichinvariante Phasendifferenz γ mit

$$\begin{aligned} \gamma &= \phi_2 - \phi_1 - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_L^R d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \\ &= \Delta\phi - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_L^R d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.24)$$

ausgedrückt werden müssen. Das Integral über das Vektorpotential ist dabei vom Integrationspfad abhängig und dieser muss geeignet gewählt werden. Für die Modellgeometrie entsprechend Abbildung 3.1 wird das Wegintegral auf der x -Achse von $x = -L/2$ bis $x = +L/2$ ausgeführt. Anfangs- und Endpunkt dieses Integrationspfades entsprechen den Punkten, zwischen denen die Phasendifferenz $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$ vorgegeben wird und der Integrationspfad verläuft entlang der zentralen Symmetrieachse der Modellgeometrie.

Das Integral über das Vektorpotential in Gleichung (3.24) spielt im Folgenden nur bei Betrachtungen eine Rolle, die Abschirmungseffekte und äußere Magnetfelder berücksichtigen. Dies gilt für die Abschnitte 4.4 und 4.5. In allen anderen Fällen verschwindet das Vektorpotential und es gilt $\gamma = \Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$.

3.2.4 Lokale Zustandsdichte

Wurde eine selbstkonsistente Konfiguration für das Paarpotential, die Stromdichte sowie das Vektorpotential gefunden, so folgt die winkelgemittelte lokale Zustandsdichte für Quasiteilchenanregungen aus folgender Gleichung:

$$\frac{N(\mathbf{r}, E)}{N(0)} = -\langle \text{Im} [g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n \rightarrow E + i\delta)] \rangle_{FS} \quad (3.25)$$

In dieser Form ist die lokale Zustandsdichte bereits auf die Zustandsdichte im Normalzustand $N(0)$ normiert und die Energie E , die bezüglich der Fermi-Energie gemessen wird, folgt aus einer analytischen Fortsetzung der Matsubara-Frequenzen. Für den Parameter δ dieser analytischen Fortsetzung muss im Fall eines Supraleiters im sauberen Grenzfall im Prinzip der Grenzwert $\delta \rightarrow 0^+$ gebildet werden. Für kleine Werte von δ lässt sich dieser Parameter aber als Einfluss einer geringen Konzentration von Störstellen interpretieren und δ kann somit klein, aber endlich gewählt werden. Ein endlicher Wert für den Parameter δ der analytischen Fortsetzung führt bei der Integration der Riccati-Differentialgleichungen gleichzeitig zu einer abklingenden Abhängigkeit der Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ von den Startwerten und die Länge der Trajektorien kann auch bei der Berechnung der Zustandsdichte endlich gewählt werden. In dieser Arbeit wird durchgehend ein Wert von $\delta = 0.01 k_B T_c$ verwendet.

3.3 Lösungsverfahren

3.3.1 Iteratives Lösungsschema

In diesem Abschnitt wird das Verfahren zur Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen beschrieben, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Es handelt sich hierbei um ein iteratives Lösungsschema, das es ermöglicht, für beliebige Geometrien² selbstkonsistente Lösungen für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$, die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ und das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ zu berechnen. Die nach diesem Verfahren gewonnenen Lösungen sind auch in Bezug auf die Kopplung durch die Maxwell-Gleichung (3.11) exakt und erlauben sowohl die Berücksichtigung externer Magnetfelder als auch der Magnetfelder, die durch die in der Geometrie fließenden Ströme hervorgerufen werden. Randbedingungen, die die spezielle Geometrie berücksichtigen, insbesondere für das Vektorpotential, werden bei diesem Schema automatisch erfüllt und müssen nicht „von Hand“ eingebaut werden, was insbesondere bei der Untersuchung komplexer Geometrien einen erheblichen Vorteil darstellt.

Sucht man Lösungen für die Gap-Gleichung und die Strom-Gleichung, so ist es naheliegend, die beiden Gleichungen als Iterationsvorschriften zu verwenden, um eine Startkonfiguration sukzessive zu verbessern. Um die Kopplung dieser beiden Gleichungen über das Vektorpotential, das von den Strömen abhängt, zu berücksichtigen, muss in jeder Iteration das Vektorpotential aus den Strömen berechnet werden. Diese iterative Prozedur muss so lange wiederholt werden, bis eine selbstkonsistente Lösung gefunden wurde.

Dieses bekannte Schema wurde in dieser Arbeit als Ausgangspunkt verwendet, um mit möglichst geringen numerischen Kosten selbstkonsistente Konfigurationen zu finden, die den gegebenen Randbedingungen gehorchen. Das resultierende iterative Lösungsschema ist in Abbildung 3.3 skizziert. In den folgenden Abschnitten werden die Details zu allen Zwischenschritten dieses Lösungsschemas beschrieben.

²Die Geometrie muss auf ein endliches Raumgebiet beschränkt sein; ist dies nicht der Fall, so muss durch geeignete Randbedingungen dafür gesorgt werden, dass Stromerhaltung gilt (siehe Abschnitt 3.3.4).

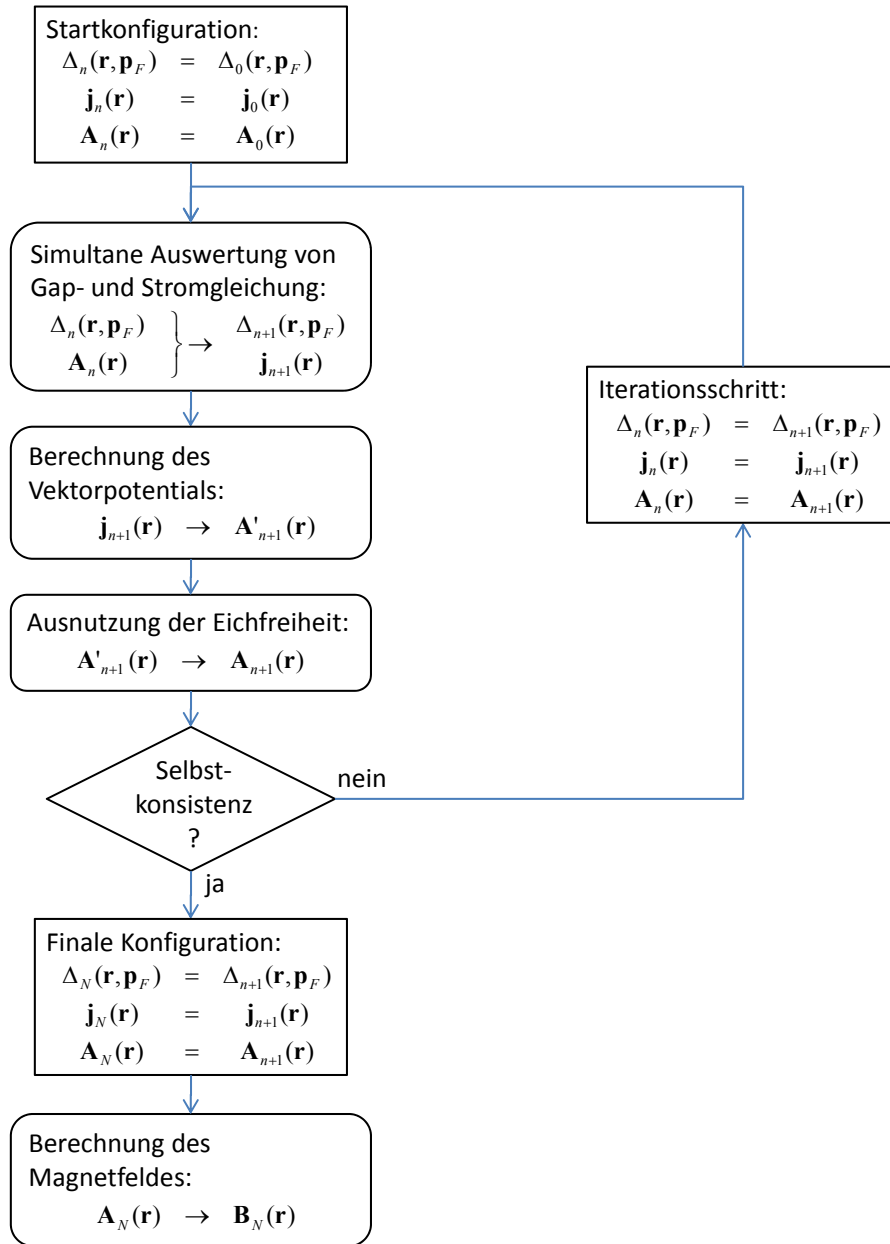


Abbildung 3.3: Iteratives Lösungsschema zur Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen. Eine gegebene Startkonfiguration für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$, die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ und das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ wird durch wiederholte Auswertung der Gap- und der Stromgleichung sowie die wiederholte Berechnung des Vektorpotentials so lange iterativ verbessert, bis eine selbstkonsistente Lösung gefunden ist.

Es sollte angemerkt werden, dass ein iteratives Vorgehen üblicherweise stabile Lösungen liefert. Wie zum Beispiel in Referenz [72] bemerkt wurde, können instabile Lösungen, die Sattelpunkten der Freien Energie entsprechen, nur mit erheblich aufwändigeren Methoden berechnet werden. Da derartige Lösungen instabil und deshalb nicht von Interesse sind, bietet sich ein iteratives Vorgehen aufgrund der Nachvollziehbarkeit und Kontrollierbarkeit an.

3.3.2 Auswertung von Gap- und Stromgleichung

Zur Auswertung von Gap- und Stromgleichung müssen zunächst die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ und aus diesen entsprechend Gleichungen (3.13) und (3.14) die quasiklassischen Propagatoren $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ berechnet werden. Für diese muss dann die Fermi-Flächen-Mittelung $\langle \dots \rangle_\theta = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \dots$ durchgeführt werden, was für jeden Aufpunkt \mathbf{r}_0 die Lösung von Riccati-Differentialgleichungen entlang einer großen Zahl von Trajektorien mit verschiedenen Orientierungen \mathbf{v}_F impliziert. Schließlich müssen die über die Fermi-Fläche gemittelten Funktionen $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $\mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ über alle Matsubara-Frequenzen $|\varepsilon_n| < \omega_c$ bis zur Abschneidefrequenz ω_c summiert werden.

Bei der Summation über die Matsubara-Frequenzen können Symmetrieeigenschaften des quasiklassischen Propagators ausgenutzt werden, um die Summe auf die positiven Matsubara-Frequenzen $0 < \varepsilon_n < \omega_c$ zu beschränken. Dies halbiert offensichtlich die numerischen Kosten.

Nach Referenz [69] gilt für die Komponente $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ folgende Symmetrieeigenschaft:

$$f(\mathbf{r}, -\mathbf{p}_F, -i\varepsilon_n) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \quad (3.26)$$

Da bei der Fermi-Flächen-Mittelung über alle Impulse \mathbf{p}_F integriert wird, erlaubt diese Symmetrieeigenschaft in der Gap-Gleichung die Beschränkung der Summation auf positive Matsubara-Frequenzen:

$$\sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \rightarrow 2 \sum_{0 < \varepsilon_n < \omega_c}$$

Für die Komponente $g(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, i\varepsilon_n)$ gilt nach derselben Referenz

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = g^*(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, -i\varepsilon_n) \quad (3.27)$$

Bei der Berechnung der Stromdichte mit der Stromgleichung ist nur der Realteil von $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ relevant und somit reicht diese Symmetrieeigenschaft aus, um auch in der Stromgleichung die Summe auf die positiven Matsubara-Frequenzen zu beschränken.

Da für die Auswertung der rechten Seiten von Gap-Gleichung (3.8) und Stromgleichung (3.9) jeweils die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ für die selben Parameter benötigt werden, können die Gap- und die Stromgleichung simultan ausgewertet werden. Dies bedeutet, dass die Riccati-Differentialgleichungen an jedem Aufpunkt \mathbf{r}_0 für jede Kombination von Fermi-Geschwindigkeit \mathbf{v}_F und Matsubara-Frequenz $i\varepsilon_n$ nur einmalig ausgewertet werden müssen, um beide Komponenten des quasiklassischen Propagators $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ entsprechend Gleichungen (3.13) und (3.14) zu konstruieren.

3.3.3 Berechnung des Vektorpotentials

Das gesamte Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, das in Gleichung (3.12) definiert wurde, kann in zwei Beiträge aufgeteilt werden. Der erste Beitrag $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$ repräsentiert externe Magnetfelder, während der zweite Beitrag $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ durch die Ströme hervorgerufen wird, die in der untersuchten Geometrie fließen. Ihre Summe ergibt das gesamte Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) \quad (3.28)$$

In Coulomb-Eichung, also mit $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$, folgt aus der Maxwell-Gleichung (3.11) und der Definition des Vektorpotentials (3.12) für den Beitrag, der durch die Ströme hervorgerufen wird:

$$-\Delta \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (3.29)$$

Effektiv wird diese Poisson-Gleichung für das Vektorpotential $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ in $D = 2$ Dimensionen gelöst, da die Ströme translationsinvariant in z -Richtung sind und die z -Komponente $j_z(\mathbf{r})$ aufgrund der zylindrischen Fermi-Fläche verschwindet. Zur Berechnung einer Lösung für das

Vektorpotential wird die Greensche Funktion $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ des Laplace-Operators $\mathcal{L}_2 = -\Delta$ in $D = 2$ Dimensionen verwendet³ [74]:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) &= \frac{4\pi}{c} \int_F d^2r' G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{4\pi}{c} \int_F d^2r' \left(-\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right) \mathbf{j}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (3.30)$$

Damit wird die Berechnung des Vektorpotentials auf eine Integration über alle in der zwei-dimensionalen Geometrie F fließenden Ströme zurückgeführt, gewichtet mit der Greenschen Funktion $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/(2\pi)$. Randbedingungen für das Abklingen des Vektorpotentials im freien Raum für große Abstände $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ sind in der Greenschen Funktion (3.30) enthalten. Die korrekten Randbedingungen an den Oberflächen der untersuchten Geometrie werden durch die Selbstkonsistenz-Gleichungen (3.8) und (3.9) garantiert; dies wird in Abschnitt 3.4 im Detail diskutiert.

Nachdem das Vektorpotential durch Auswertung von Gleichung (3.30) berechnet wurde, wird von der Eichfreiheit Gebrauch gemacht. Der Gradient der Phase des Paarpotentials $\nabla\phi(\mathbf{r})$ ruft zusammen mit dem gesamten Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ die in der Geometrie fließenden Ströme hervor. Dies ist aus der Definition der (eichinvarianten) suprafluiden Geschwindigkeit \mathbf{v}_s , Gleichung (3.23), ersichtlich. Da die suprafluide Geschwindigkeit eine eichinvariante Größe ist, hängt folglich die endgültige Verteilung des Gradienten der Phase $\nabla\phi(\mathbf{r})$ von der Verteilung des Vektorpotentials $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ab, und anders herum. Um sowohl die absoluten Werte des Phasengradienten als auch die des Vektorpotentials zu minimieren, ist es deshalb nützlich, den Beitrag zum Vektorpotential $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$, nachdem dieser durch Auswertung von Gleichung (3.30) berechnet wurde, zu minimalen absoluten Werten zu verschieben. Dies kann durch die Addition eines räumlich konstanten Vektors \mathbf{A}_s erreicht werden. Die Addition eines konstanten Vektors verändert weder das mit dem Vektorpotential verbundene Magnetfeld $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ noch steht sie im Widerspruch zu der Poisson-Gleichung (3.29) bzw. der verwendeten Coulomb-Eichung und stellt somit eine erlaubte Operation dar. Die Minimierung der absoluten Werte des Phasengradienten und des Vektorpotentials, die mit dem beschriebenen Vorgehen erreicht wird, führt zu einem robusteren Konvergenzverhalten des iterativen Verfahrens zur Lösung der Gap- und der Stromgleichung.

Um das gesamte Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ zu vervollständigen, fehlt noch der Beitrag $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$, der das externe Magnetfeld repräsentiert. Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, ist das externe Magnetfeld $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{\mathbf{e}}_z$ in $\hat{\mathbf{e}}_z$ -Richtung orientiert. Folglich kann es durch ein Vektorpotential der Form $\mathbf{A}_0(\mathbf{r}) = -B_0 y \hat{\mathbf{e}}_x$ dargestellt werden. Diese Form des Vektorpotentials ist mit der gewählten Coulomb-Eichung kompatibel und minimiert die absoluten Werte des Vektorpotentials. Weiterhin ist sie derart gewählt, dass die Orientierung des Vektorpotentials $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$ der Orientierung der Abschirmströme entspricht. Dadurch werden die resultierenden Phasengradienten sowie die notwendige Anzahl der Iterationen des Verfahrens zur selbstkonsistenten Lösung der Gap- und der Strom-Gleichung minimiert.

3.3.4 Periodische Fortsetzung

Um die quasiklassischen Propagatoren für eine Geometrie entsprechend der in Abbildung 3.1 skizzierten Modellgeometrie korrekt zu berechnen, müssen Randbedingungen berücksichtigt werden. Für die Begrenzungen der Geometrie, die Oberflächen des Supraleiters darstellen, wurden diese bereits in Abschnitt 3.2.3 beschrieben. Diese gelten jedoch nicht für den linken und rechten Rand der Geometrie, bei $x = \pm L/2$, also an den Anschlüssen an den Streifen.

Ist die Länge L des Abschnittes, für den die Gap- und die Stromgleichung gelöst werden sollen, ausreichend groß, so ist zu erwarten, dass die Amplitude des Paarpotentials sowie die Ströme nahe der Anschlüsse an den Streifen keine Variation in x -Richtung aufweisen. Dennoch kann die Amplitude des Paarpotentials $|\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)|$ gegenüber dem *bulk*-Wert $\Delta_\infty(T)$

³Siehe z. B. Kapitel V in Referenz [73]; die Definition des Laplace-Operators mit dem negativen Vorzeichen geschieht in Anlehnung an diese Referenz.

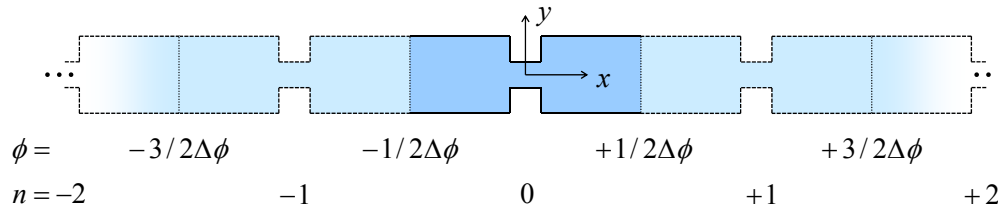


Abbildung 3.4: Periodische Fortsetzung zur Gewährleistung korrekter Randbedingungen an der linken bzw. rechten Begrenzung der Modellgeometrie aus Abbildung 3.1. Die periodischen Wiederholungen der Geometrie sind mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ nummeriert, wobei positive n die Wiederholungen im Bereich positiver x -Werte und negative n die Wiederholungen im Bereich negativer x -Werte bezeichnen. Zur stetigen Fortsetzung der Phase muss zu dieser im n -ten Abschnitt der Wert $n \cdot \Delta\phi$ addiert werden.

verringert sein. Eine Verringerung oder Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials kann hervorgerufen werden durch den paarbrechenden Einfluss der Ströme, die durch den Kanal fließen, durch Magnetfelder und kann z. B. auch an einer geeignet orientierten Oberfläche eines Supraleiters mit d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung auftreten. Um derartige Einflüsse korrekt zu berücksichtigen, müssen auch in dem langen Streifen, der die Randbedingungen liefert, alle relevanten Größen exakt berechnet werden.

Gleiches wie für das Paarpotential gilt für die in dem langen Streifen fließenden Ströme. Zur Auswertung von Gleichung (3.30) muss über alle in der Geometrie fließenden Ströme integriert werden, also auch über die in dem langen Streifen. Daher muss im Prinzip auch die Stromdichte in dem langen Streifen exakt berechnet werden.

Die explizite Berechnung aller relevanten Größen im Bereich $|x| > L/2$ erübrigt sich, wenn die Modellgeometrie aus Abbildung 3.1 entsprechend der Skizze in Abbildung 3.4 periodisch fortgesetzt wird. Die periodische Fortsetzung sorgt automatisch für die korrekten Randbedingungen am linken bzw. rechten Rand der Modellgeometrie. Gleichzeitig sorgt sie dafür, dass die Erhaltung der Ströme am linken bzw. rechten Rand der Geometrie gesichert ist, was wiederum für eine konsistente räumliche Variation des Vektorpotentials entscheidend ist.

Für die Fortsetzung der einzelnen Größen in der periodisch wiederholten Geometrie gelten folgende Regeln:

1. Amplitude des Paarpotentials:

Die räumliche Modulation der Amplitude des Paarpotentials $|\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)|$ wiederholt sich identisch in der periodisch fortgesetzten Geometrie. Wenn mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ die periodischen Wiederholungen der Geometrie gezählt werden und diese bezüglich des zentralen Abschnittes (mit $n = 0$) um einen Vektor $n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x$ verschoben sind, so gilt für die Amplitude des Paarpotentials:

$$|\Delta(\mathbf{r} + n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x, \mathbf{p}_F)| = |\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)| \quad (3.31)$$

2. Phase des Paarpotentials:

Die räumliche Modulation der Phase des Paarpotentials $\phi(\mathbf{r})$ wiederholt sich ebenfalls identisch in der periodisch fortgesetzten Geometrie. Allerdings muss zur Phase „nach rechts“ für die $+|n|$ -te Wiederholung der Geometrie der Wert $|n| \cdot \Delta\phi$ addiert und entsprechend „nach links“ für die $-|n|$ -te Wiederholung der Geometrie der Wert $|n| \cdot \Delta\phi$ subtrahiert werden:

$$\phi(\mathbf{r} + n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x) = \phi(\mathbf{r}) + n \cdot \Delta\phi \quad (3.32)$$

Dies gewährleistet eine stetige Fortsetzung der Phase am linken bzw. rechten Rand der periodischen Wiederholungen der Geometrie. Die Werte der Phase an den Übergängen zwischen den periodischen Wiederholungen sind in Abbildung 3.4 entsprechend vermerkt.

3. Stromdichte:

Die Stromdichte wiederholt sich identisch in jeder Wiederholung der periodisch fortgesetzten Geometrie:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r} + n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x) = \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (3.33)$$

Diese periodische Fortsetzung der Ströme sichert gleichzeitig, dass am linken bzw. rechten Rand der Geometrie Stromerhaltung gilt.

Da die Stromdichte nicht direkt in die Gap- oder die Stromgleichung eingeht, sondern die Kopplung über das Vektorpotential stattfindet, können jedoch vereinfachte Randbedingungen zur Berechnung des Vektorpotentials $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ verwendet werden. Wird das Vektorpotential $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ für den zentralen Abschnitt mit $n = 0$ berechnet und ist die Länge L jedes Abschnittes ausreichend groß gewählt, so besteht aufgrund der Stromerhaltung⁴ eine sehr gute Näherung darin, die exakte Stromverteilung in der Umgebung der benachbarten Engstellen (in den Abschnitten mit $n = \pm 1, \pm 2, \dots$) zu vernachlässigen und die Ströme für $|x| \geq L/2$ als konstant anzunehmen.

4. Vektorpotential:

Der Beitrag zum Vektorpotential, der durch die Ströme hervorgerufen wird, wiederholt sich identisch in der periodisch fortgesetzten Geometrie:

$$\mathbf{A}_c(\mathbf{r} + n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x) = \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) \quad (3.34)$$

Da diese Periodizität auch für den Beitrag $\mathbf{A}_0(\mathbf{r}) = -B_0y\hat{\mathbf{e}}_x$ gilt, der das externe Magnetfeld repräsentiert, folgt sie für das gesamte Vektorpotential:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r} + n \cdot L\hat{\mathbf{e}}_x) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (3.35)$$

Die periodische Fortsetzung der Geometrie entsprechend Abbildung 3.4 impliziert, dass die Trajektorien der Riccati-Parametrisierung, deren Aufpunkte \mathbf{r}_0 innerhalb des zentralen Abschnittes mit $n = 0$ liegen, durch die bereits erwähnte Raytracing-Prozedur auch in die periodisch fortgesetzte Geometrie verlängert werden müssen. Um die Riccati-Differentialgleichungen in den Bereichen mit $|x| \geq L/2$ zu lösen, müssen Paarpotential und Vektorpotential entsprechend den genannten Regeln fortgesetzt werden.

3.4 Selbstkonsistente Lösungen

In diesem Abschnitt wird beschrieben, nach welchen Kriterien entschieden werden kann, ob im Rahmen des iterativen Lösungsalgorithmus eine selbstkonsistente Konfiguration erreicht wurde. Des Weiteren werden wichtige Eigenschaften selbstkonsistenter Lösung diskutiert. Schließlich wird begründet, warum im Rahmen des verwendeten Lösungsschemas die Greensche Funktion des Laplace-Operators für den freien Raum, Gleichung (3.30), zur Berechnung des Vektorpotentials verwendet werden kann.

Die einfachste Möglichkeit zur Abschätzung der Konvergenz des iterativen Lösungsschemas besteht darin, die Veränderung der Funktionen $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$, $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ und $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ in jeder Iteration zu bestimmen und weitere Iterationen durchzuführen, bis diese Veränderung hinreichend klein ist. Allerdings besteht bei dieser Methode das Problem, dass die Konvergenzrate in einer einzigen Iteration unter Umständen sehr klein sein kann und deshalb eine genaue Beurteilung der Konvergenz schwierig ist⁵.

Eine wesentlich zuverlässigere und strengere Methode zur Beurteilung der Selbstkonsistenz einer Lösung besteht darin, die Erhaltung der Ströme in jeder Iteration zu prüfen, da

⁴Für selbstkonsistente Lösungen ist die Erhaltung des Stromes ($\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) garantiert; siehe dazu den folgenden Abschnitt 3.4 sowie Anhang A.

⁵Beispielsweise konvergiert das iterative Verfahren bei Temperaturen nahe der Sprungtemperatur T_c aufgrund der schwachen Variation der Freien Energie bei Abweichungen von der selbstkonsistenten Konfiguration sehr langsam. Auch die Dämpfung des Iterationsprozesses der Stromgleichung, wie in Abschnitt 3.6.3 beschrieben, führt zu verlangsamerter Konvergenz.

selbstkonsistente Lösungen immer die Bedingung $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ erfüllen. Zur lokalen Überprüfung der Stromerhaltung wird die Divergenz der Stromdichte $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})$ in jeder Iteration für die gesamte Geometrie berechnet. Zur globalen Beurteilung wird in jeder Iteration der Gesamtstrom, der durch die Geometrie fließt, bei $x = 0$ und bei $x = \pm L/2$ durch Integration der Stromdichte über den Querschnitt der Geometrie bestimmt und die relative Abweichung ausgewertet.

Die Erhaltung der Ströme

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.36)$$

ist eine wichtige Eigenschaft selbstkonsistenter Lösungen der mikroskopischen Eilenberger-Theorie der Supraleitung. Sie folgt direkt aus den Eilenberger-Gleichungen, wenn die Gap-Gleichung und die Stromgleichung erfüllt sind und wird in Anhang A hergeleitet. Für das Verschwinden der Normalkomponente der Stromdichte an Oberflächen mit der Normalen $\hat{\mathbf{n}}$

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.37)$$

sorgen die Reflexionseigenschaften der Riccati-Amplituden; siehe hierzu die Referenzen [70, 71] sowie [75].

Im Rahmen der Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen muss die Stromerhaltung, sowohl im Inneren der Geometrie als auch an Oberflächen des Materials, nicht explizit bei der Konstruktion der Lösungen berücksichtigt werden. Sie folgt sofort als Eigenschaft selbstkonsistenter Lösungen, was insbesondere bei komplexen Geometrien einen erheblichen Vorteil der Methode darstellt.

Auf den ersten Blick scheint die verwendete zweidimensionale Greensche Funktion des Laplace-Operators (3.30) die Randbedingungen an den Oberflächen des Supraleiters für beliebige Geometrien nicht korrekt zu erfüllen, da es sich um eine Greensche Funktion für den freien Raum handelt. Der entscheidende Punkt ist hier, dass die Greensche Funktion in eine mikroskopische Selbstkonsistenz-Rechnung eingebettet ist, bei der die Gap- und die Stromgleichung für die Erfüllung der an Vektorpotential und Magnetfeld gestellten Randbedingungen sorgen.

In Anhang A wird die Stromerhaltung für selbstkonsistente Lösungen hergeleitet. Da das Vektorpotential aus allen Strömen berechnet wird, die in der Geometrie fließen, und die Ströme in der iterativen Prozedur wiederum vom Vektorpotential abhängen, folgt aus der Erhaltung der Ströme im Inneren des Supraleiters ($\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) und dem korrekten Verhalten an den Oberflächen ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j} = 0$), beides durch die mikroskopische Selbstkonsistenz-Rechnung gesichert, sofort das korrekte Verhalten für das Vektorpotential und das Magnetfeld an den Oberflächen der Geometrie. Die Erfüllung der Randbedingungen im Unendlichen wird durch die Verwendung der Greenschen Funktion des freien Raumes gewährleistet.

Des Weiteren wurde zur Herleitung der Poisson-Gleichung (3.29) für das Vektorpotential die Coulomb-Eichung mit $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ gewählt. Wie in Anhang B gezeigt wird, folgt bei der Berechnung des Vektorpotentials mit Hilfe der Greenschen Funktion des Laplace-Operators (3.30) aus der Erhaltung der Ströme und dem korrekten Verhalten an Oberflächen sofort die Divergenzfreiheit des Vektorpotentials ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$). Folglich ist diese Eigenschaft des Vektorpotentials für selbstkonsistente Lösungen gewährleistet. Für das Magnetfeld, das durch $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ aus dem Vektorpotential folgt, gilt per constructionem $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$.

Die Geometrie der untersuchten Struktur geht im Rahmen der vorgestellten Methode einzig und allein über die Reflexionseigenschaften der Riccati-Gleichungen an den Oberflächen des Supraleiters in die Rechnungen ein. Die Erfüllung der Randbedingungen für alle relevanten Größen folgt dann durch die Einbettung in eine mikroskopische Selbstkonsistenz-Rechnung. Die Tatsache, dass die Randbedingungen für das Vektorpotential und das Magnetfeld nicht explizit bei der Berechnung der Lösungen berücksichtigt werden müssen, stellt einen erheblichen Vorteil der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methode zur Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen unter Berücksichtigung des Vektorpotentials dar. Erst durch diese Methode ist es in der Praxis möglich, für nahezu beliebige Geometrien selbstkonsistente Lösungen zu berechnen. Die einzige praktische Beschränkung besteht in den numerischen Kosten des Verfahrens.

3.5 Freie Energie eines Josephson-Kontaktes

Ist die Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ eines Josephson-Kontaktes bekannt, so kann die Änderung der Freien Energie, die durch eine Variation der Phasendifferenz γ hervorgerufen wird, durch die Integration der Strom-Phasen-Beziehung bezüglich γ berechnet werden:

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma') \quad (3.38)$$

Eine mikroskopische Herleitung dieser Gleichung aus dem Eilenberger-Funktional $\mathcal{E}(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; a, b)$ wird in Anhang C präsentiert. Diese Herleitung basiert auf der Ausnutzung der Eichinvarianz des Eilenberger-Funktionals sowie der Stationarität selbstkonsistenter Lösungen bezüglich der Variation nach den Parametern Δ , Δ^\dagger , \mathbf{A} , a und b . Bei der Herleitung werden keine weiteren Annahmen getroffen und Gleichung (3.38) gilt somit für beliebige Systeme, die durch die mikroskopischen Eilenberger-Gleichungen beschrieben werden können. Wird zur Auswertung von Gleichung (3.38) eine Strom-Phasen-Beziehung verwendet, die nicht selbstkonsistent berechnet wurde, so folgt zumindest eine obere Schranke für die Änderung der Freien Energie. Des Weiteren ist zu bemerken, dass die Gültigkeit von Gleichung (3.38) nicht auf Josephson-Kontakte beschränkt ist, sondern für beliebige Strukturen mit einer Strom-Phasen-Beziehung gilt.

Die Berechnung der Freien Energie nach Gleichung (3.38) kann unter anderem dazu verwendet werden, den Grundzustand eines Josephson-Kontaktes mit einer bekannten Strom-Phasen-Beziehung zu identifizieren. Eine Nullstelle γ_0 der Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ im Bereich $0 \leq \gamma \leq \pi$ impliziert ein lokales Extremum der Freien Energie bei der Phasendifferenz γ_0 . Gilt bei der Phasendifferenz γ_0 zusätzlich die Bedingung

$$\left. \frac{d^2 \mathcal{E}(\gamma)}{d\gamma^2} \right|_{\gamma=\gamma_0} = \frac{\hbar}{2e} \left. \frac{dI(\gamma)}{d\gamma} \right|_{\gamma=\gamma_0} > 0 \quad (3.39)$$

so handelt es sich um ein stabiles lokales Minimum der Freien Energie. Folglich liegt in diesem Fall der Grundzustand bei der Phasendifferenz γ_0 und der Kontakt weist eine intrinsische Phasendifferenz von γ_0 auf.

In Abbildung 3.5 wird der Zusammenhang zwischen der Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ eines Josephson-Kontaktes und der Freien Energie anhand von drei exemplarischen Fällen illustriert.

Ein „normaler“ oder 0-Josephson-Kontakt mit einer Strom-Phasen-Beziehung der Form $I(\gamma) = I_c \sin(\gamma)$ ist durch die blauen Kurven dargestellt. Die Strom-Phasen-Beziehung weist in diesem Fall bei $\gamma_0 = 0$ eine Nullstelle auf, die die Stabilitätsbedingung (3.39) erfüllt. Damit ist das energetische Minimum im Grundzustand bei $\gamma_0 = 0$ und es liegt keine endliche intrinsische Phasendifferenz vor.

Durch die lila Kurven ist ein π -Josephson-Kontakt mit einer Strom-Phasen-Beziehung der Form $I(\gamma) = I_c \sin(\gamma + \pi)$ angedeutet. Bei dieser Form der Strom-Phasen-Beziehung liegt die Nullstelle, die die Stabilitätsbedingung (3.39) erfüllt, bei $\gamma_0 = \pi$ und der Josephson-Kontakt weist eine intrinsische Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$ auf.

Als dritter exemplarischer Fall ist durch die braunen Kurven ein Josephson-Kontakt mit einer Strom-Phasen-Beziehung der Form $I(\gamma) = -I_c \sin(2\gamma)$ berücksichtigt. In diesem Fall liegt die Nullstelle, die die Stabilitätsbedingung (3.39) erfüllt, bei $\gamma_0 = \pi/2$. Folglich weist der Josephson-Kontakt im Grundzustand eine intrinsische Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi/2$ auf und es handelt sich somit um einen φ -Josephson-Kontakt.

Das Auftreten intrinsischer Phasendifferenzen wird für die im Folgenden untersuchten Josephson-Kontakte diskutiert und in der Form von 0- π -Phasendiagrammen dargestellt.

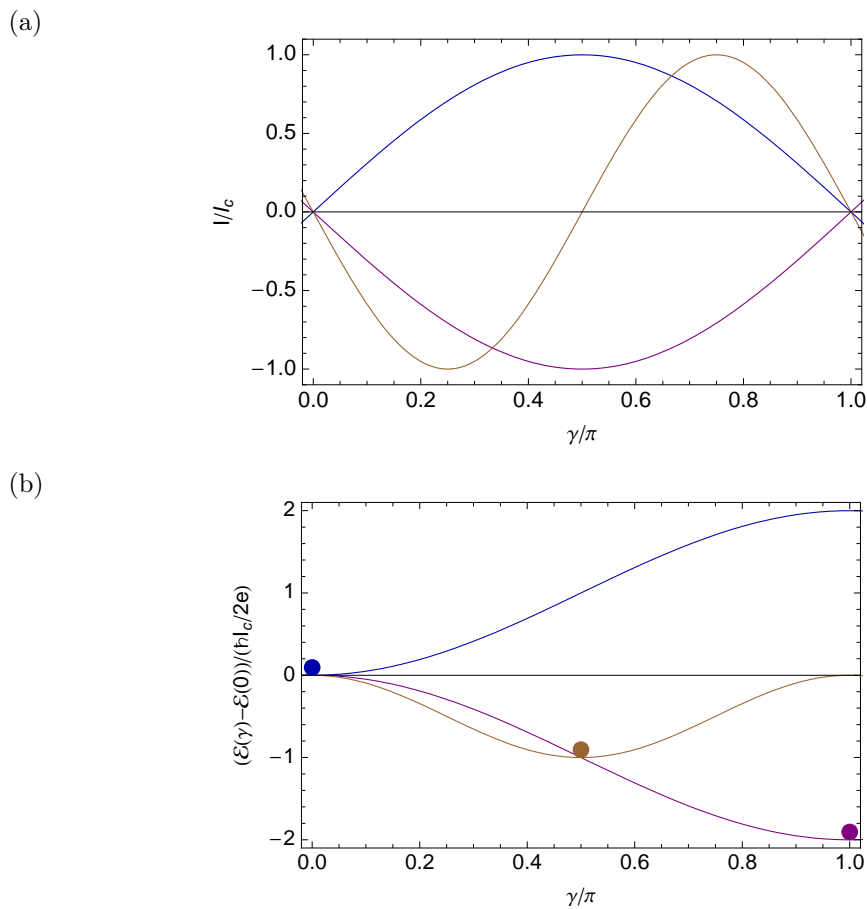


Abbildung 3.5: Drei exemplarische Strom-Phasen-Beziehungen in (a) und die entsprechende Änderung der Freien Energie des Josephson-Kontaktes in (b). Die blauen Kurven repräsentieren einen „normalen“ oder 0-Josephson-Kontakt mit einer verschwindenden intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = 0$. Die lila Kurven entsprechen einem π -Josephson-Kontakt mit $\gamma_0 = \pi$. Die braunen Kurven gehören zu einem φ -Josephson-Kontakt mit einer intrinsischen Phasendifferenz γ_0 zwischen 0 und π .

3.6 Numerische Methoden

Die Berechnung selbstkonsistenter Lösungen für eine zweidimensionale Geometrie nach dem im letzten Abschnitt beschriebenen Verfahren ist mit erheblichem numerischem Aufwand verbunden. Bei der Auswertung der Gap- und der Stromgleichung in jeder Iteration rühren die numerischen Kosten aus der Winkelmittelung und der Summation über die Matsubara-Frequenzen, da für jeden Winkel und jede Matsubara-Frequenz zwei Riccati-Differentialgleichungen gelöst werden müssen. Die Lösung der Riccati-Differentialgleichungen stellt aufgrund der Stabilitätseigenschaften kein prinzipielles Problem dar, wird aber durch die große Anzahl zu lösender Gleichungen numerisch aufwändig.

Das Vektorpotential wird durch die Auswertung des Integrals über alle in der Geometrie fließenden Ströme, gewichtet mit der Greenschen Funktion des Laplace-Operators, berechnet. Folglich muss zur Berechnung des Vektorpotentials in jeder Iteration für jeden Punkt der Geometrie ein Integral über die gesamte Geometrie ausgewertet werden, was wieder kein prinzipielles Problem darstellt, aber bei einer ausgedehnten Geometrie numerisch aufwändig wird.

Ist die Geometrie groß im Vergleich zu den charakteristischen Längenskalen des Problems, die durch die Kohärenzlänge ξ_0 und die magnetische Eindringtiefe λ_L gegeben sind, so sind viele Iterationen zum Erreichen einer selbstkonsistenten Konfiguration notwendig. Dieser Umstand erhöht die numerischen Kosten weiter.

Da bei der Untersuchung des stationären Josephson-Effektes in geometrischen Josephson-Kontakten ein wichtiges Ziel darin besteht, Strom-Phasen-Beziehungen für verschiedene geometrische Parameter bei verschiedenen Temperaturen und verschiedenen Werten des äußeren Magnetfeldes zu berechnen, liegen zumindest fünf Parameter vor, die innerhalb bestimmter Intervalle variiert werden müssen: die eichinvariante Phasendifferenz γ , Länge l und Breite w der Engstelle, die Temperatur T und das äußere Magnetfeld B_0 . Somit müssen, um schlüssige Ergebnisse zu erhalten, zweidimensionale selbstkonsistente Konfigurationen für eine große Anzahl an Parametern berechnet werden. Die verschiedenen im Rahmen der vorliegenden Arbeit zur Reduzierung der numerischen Kosten eingesetzten Verfahren werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

3.6.1 Diskretisierung der Geometrie

Zur numerischen Behandlung wird die zweidimensionale Geometrie räumlich diskretisiert und die relevanten Größen werden auf dem durch die Diskretisierung festgelegten Gitter definiert. Im vorliegenden Fall sind dies die komplexe Funktion $\Delta(\mathbf{r})$ aus der Faktorisierung des Paarpotentials (3.7), die Vektorfelder Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = (j_x(\mathbf{r}), j_y(\mathbf{r}))$ und Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (A_x(\mathbf{r}), A_y(\mathbf{r}))$, die z -Komponente des Magnetfeldes $B_z(\mathbf{r})$ sowie einige auf dem Gitter definierte Hilfsgrößen für die im Folgenden beschriebenen numerischen Verfahren.

Die Diskretisierung wird mit Hilfe eines quadratischen Gitters durchgeführt, das allerdings in zwei Bereiche aufgeteilt wird. Dies sind ein Bereich mit feinerer Gitterweite dx_1 in der direkten Umgebung der Engstelle und einen Bereich mit gröberer Gitterweite dx_2 in größerer Entfernung der Engstelle. An den Knoten dieser beiden Gitter müssen in jeder Iteration Gap- und Stromgleichung ausgewertet und das Vektorpotential berechnet werden (siehe Abb. 3.6(a)). Für die Berechnung von Vektorpotential und Magnetfeldern außerhalb der untersuchten Geometrie muss das Gitter entsprechend erweitert werden.

Zur Lösung der Riccati-Gleichungen müssen alle Größen an jedem beliebigen Punkt innerhalb der Geometrie bekannt sein. Zu diesem Zweck werden die auf dem Gitter definierten Funktionen bilinear interpoliert, was bei einem ausreichend feinmaschigen Gitter einen guten Kompromiss zwischen numerischen Kosten und Genauigkeit darstellt⁶. Um die Verwaltung der Diskretisierung und die Interpolation so einfach wie möglich zu halten, wird am Ende jeder Iteration jede Funktion für die gesamte Geometrie auf das feinere Gitter mit der Gitterweite dx_1 interpoliert. Da dies nur ein Mal je Iteration durchgeführt werden muss, sind die numerischen Kosten zweitrangig und es kann ein genauere Interpolationsalgorithmus verwendet werden. Vorliegend wird eine Interpolation mit natürlichen kubischen Splines verwendet, die zunächst in y - und dann in x -Richtung durchgeführt wird⁷ (siehe Abb. 3.6(b)). Da folglich in jeder Iteration alle Größen für das gesamte Gitter mit der feineren Gitterweite dx_1 vorliegen, kann die bilineare Interpolation auf dem gesamten Gitter einheitlich verwendet werden (siehe Abb. 3.6(c)).

3.6.2 Integration der Riccati-Gleichungen

Die Riccati-Gleichungen müssen entlang von Trajektorien gelöst werden, die innerhalb der untersuchten Geometrie wie Lichtstrahlen der Strahlenoptik zu konstruieren sind. Dazu ist eine Raytracing-Prozedur notwendig, die die Konstruktion von Trajektorien in beliebigen Geometrien realisiert. Eine derartige Raytracing-Prozedur für zweidimensionale Geometrien

⁶Siehe dazu Kapitel 3.6 in Referenz [76].

⁷Siehe Kapitel 3.3 bzw. die Routinen `spline` und `splint` aus Referenz [76]; beide Routinen wurden für die Behandlung komplexer Größen erweitert.

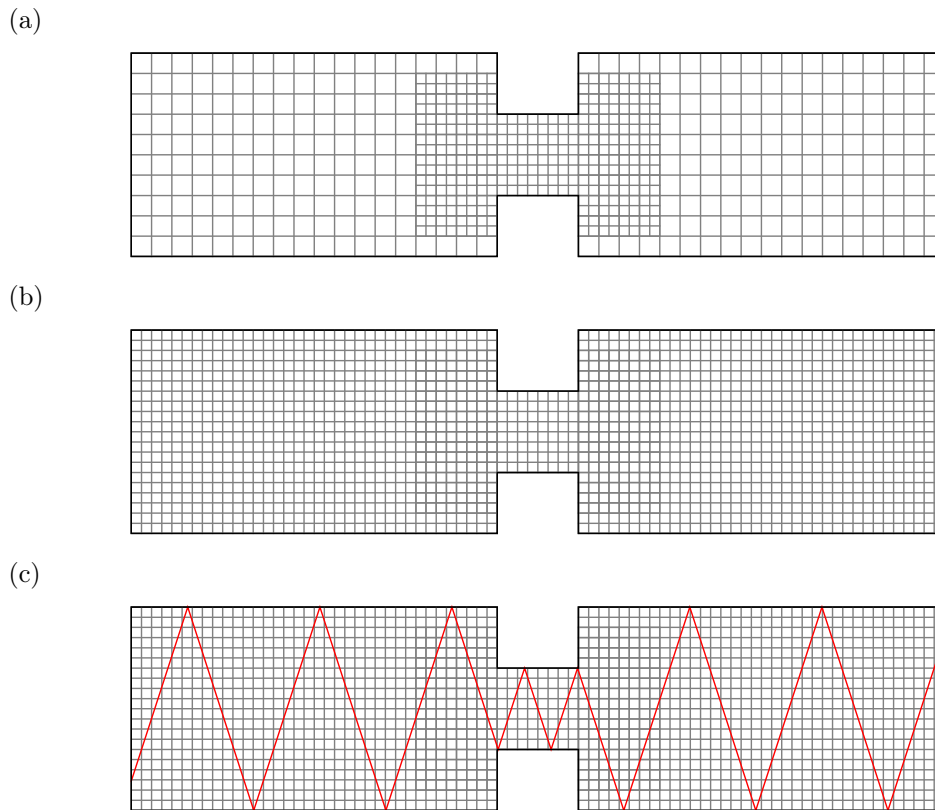


Abbildung 3.6: Diskretisierung der Geometrie (schematisch). (a) In jeder Iteration werden das Paarpotential und die Stromdichte sowie das Vektorpotential an den Knoten eines quadratischen Gitters berechnet, das in einen Bereich mit feinerer Gitterweite dx_1 und einen Bereich mit gröberer Gitterweite dx_2 aufgeteilt ist. (b) Die so erhaltenen Werte werden mit natürlichen kubischen Splines für die gesamte Geometrie auf ein Gitter mit der feineren Gitterweite dx_1 interpoliert. (c) Zur Integration der Riccati-Gleichungen entlang der Trajektorien in der nächsten Iteration wird bilinear auf dem quadratischen Gitter mit der Gitterweite dx_1 interpoliert.

mit polygonalen Begrenzungslinien wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementiert.

Die Riccati-Gleichungen sind gewöhnliche Differentialgleichungen, die in der Form eines Anfangswertproblems gelöst werden müssen. Zur Lösung dieser Gleichungen wird ein adaptives Runge-Kutta-Verfahren fünfter Ordnung mit Koeffizienten nach Cash und Karp verwendet⁸. Bei diesem Verfahren werden die in jedem Integrationsschritt entlang der Trajektorie berechneten Zwischenschritte derart kombiniert, dass sowohl das Integrationsergebnis als auch ein Fehlerschätzer bestimmt werden können. Mit diesem Fehlerschätzer wird die Schrittweite adaptiv variiert, um die gewünschte Genauigkeit der Lösung zu erhalten.

Die Integration der Riccati-Gleichungen entlang der Trajektorien liefert die Werte der Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$. Mit diesen Werten werden die Funktionen $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ berechnet, die über die Fermi-Fläche gemittelt und über alle Matsubara-Frequenzen summiert werden müssen. Insofern stellt die Integration der Riccati-Gleichungen die innerste Operation mehrerer geschachtelter Schleifen dar und muss mit ausreichender Genauigkeit durchgeführt werden, um die Anhäufung numerischer Fehler zu vermeiden.

⁸Siehe Kapitel 16.1 und 16.2 bzw. die Routinen `rkqs`, `rkck` und `odeint` aus Referenz [76]; die Routinen wurden für die Behandlung komplexer Zahlen erweitert.

3.6.3 Numerische Auswertung von Gap- und Stromgleichung

Bei der Fermi-Flächen-Mittelung besteht die Aufgabe darin, das Integral $\langle \dots \rangle_\theta = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \dots$ für eine bestimmte Funktion auszuführen. Im Fall der Gap-Gleichung ist dies die Funktion $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$, im Fall der Stromgleichung die Funktion $\mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ und im Fall der Zustandsdichte die Funktion $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$. Es liegt nahe, eine adaptive Integrationsroutine zu verwenden, um die numerischen Kosten zu reduzieren. Der Algorithmus, der hierzu implementiert wurde, ist aus Kapitel 7.5 in Referenz [77] entnommen. Bei diesem Algorithmus wird das Integrationsintervall in mehrere Teilintervalle unterteilt und in jedem Teilintervall wird über einen Vergleich der Ergebnisse aus Trapez- und Simpsonscher Quadraturformel entschieden, ob eine weitere Unterteilung notwendig ist, um die geforderte Genauigkeit zu erreichen. Ist eine feinere Unterteilung notwendig, so wird lokal eine Intervallhalbierung durchgeführt und auf jedes der beiden Teilintervalle wieder Trapez- und Simpsonsche Quadraturformel angewendet. Das Verfahren stellt durch die Auswertung einfacher Quadraturformeln kombiniert mit einem adaptiven Algorithmus eine stabile und effiziente Möglichkeit zur Mittelung über die Fermi-Fläche dar.

Zur Auswertung der Gap- und der Stromgleichung müssen die über die Fermi-Fläche gemittelten Funktionen $\langle f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS}$ bzw. $\langle \mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS}$ über alle positiven Matsubara-Frequenzen bis zur Abschneidefrequenz ω_c summiert werden ($\sum_{0 < \varepsilon_n < \omega_c}$). Die Abschneidefrequenz muss dabei ausreichend groß gewählt werden, so dass die Ergebnisse unabhängig von ω_c sind, insbesondere im Fall der Stromgleichung⁹. In Tabelle 3.1 sind die Werte festgehalten, die für die numerischen Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurden. In allen Temperaturbereichen ist die Abschneidefrequenz mindestens 20 mal größer als die Energielücke bei der jeweiligen Temperatur ($\omega_c > 20\Delta_\infty(T)$). Bei Temperaturen nahe der Sprungtemperatur T_c wurden wesentlich höhere Abschneidefrequenzen verwendet, um eine ausreichend große Anzahl an Summanden zu berücksichtigen¹⁰.

Um die Gap-Gleichung auszuwerten, wird des Weiteren die Kopplungskonstante $VN(0)$ benötigt. Zur formalen Berechnung dieser startet man mit der Gap-Gleichung im *bulk*:

$$\Delta_\infty(T) = VN(0) 2\pi k_B T \sum_{0 < \varepsilon_n < \omega_c} \left\langle \frac{\Delta_\infty(T) \chi(\mathbf{p}_F)^2}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T) \chi(\mathbf{p}_F)|^2}} \right\rangle_{FS} \quad (3.40)$$

Linearisiert man diese Gleichung im Paarpotential $\Delta_\infty(T)$ um $T = T_c$, so kann die Größe $VN(0)$ bei gegebener Temperatur T und gegebener Abschneidefrequenz ω_c bestimmt werden. Als Ergebnis folgt mit der Näherung $\omega_c \gg 2\pi k_B T_c \geq 2\pi k_B T$:

$$\frac{1}{VN(0)} \approx \langle \chi(\mathbf{p}_F)^2 \rangle_{FS} \left[\sum_{0 < \varepsilon_n < \omega_c} \frac{2}{2n+1} + \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) \right] \quad (3.41)$$

Diese formale Darstellung der Größe $VN(0)$ entspricht der Subtraktion der Asymptotik der Matsubara-Summe in der Gap-Gleichung

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) = 2\pi k_B T \sum_{0 < \varepsilon_n < \omega_c} \left(\langle f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} - \frac{\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)}{\varepsilon_n} \right) \quad (3.42)$$

und beschleunigt damit erheblich die Konvergenz als Funktion der Abschneidefrequenz.

⁹Im *bulk* konvergiert die Stromgleichung als Funktion der Abschneidefrequenz wie $1/\omega_c$, während die Gap-Gleichung durch die Subtraktion der Asymptotik der Matsubara-Summe wie $1/\omega_c^2$ konvergiert (siehe dazu den nächsten Absatz sowie insbesondere Gleichung (3.42)).

¹⁰Die obere Grenze für die Summation ist offensichtlich $n_{\max} = \left\lfloor \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_c}{\pi k_B T} - 1 \right) \right\rfloor$ und verhält sich damit für große ω_c proportional zu $1/T$.

Die Berechnung der Matsubara-Summe in der Gap- und in der Stromgleichung wurde durch Anwendung der Reihentransformation nach E. E. Kummer weiter optimiert¹¹. Wird die Summe s der konvergenten Reihe

$$s = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \quad (3.43)$$

gesucht, und ist

$$c = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \quad (3.44)$$

eine konvergente Reihe mit bekannter Summe c und gilt die Eigenschaft

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_k}{c_k} = \lambda \neq 0 \quad (3.45)$$

so lässt sich die gesuchte Summe s schreiben als

$$s = \lambda c + \sum_{k=0}^{\infty} \left(1 - \lambda \frac{c_k}{a_k}\right) a_k \quad (3.46)$$

Diese Darstellung der ursprünglichen Reihe (3.43) kann verwendet werden, um die Berechnung der Summe s zu beschleunigen, da die verbleibende Summe in Gleichung (3.46) bei geeigneter Wahl der Vergleichsreihe (3.44) wesentlich schneller konvergiert. Das Verfahren wird desto effektiver, je früher, d. h. für möglichst kleine Indizes k , die Reihen (3.43) und (3.44) gleiches Konvergenzverhalten zeigen.

Ein erster Kandidat für eine derartige Vergleichsreihe (3.44) für die Berechnung der Matsubara-Summe in Gap- und Stromgleichung ist die Matsubara-Summe aus Gap- und Stromgleichung im *bulk*. Verwendet man diese für die Darstellung der gesuchten Matsubara-Summe entsprechend Gleichung (3.46), so können die numerischen Kosten bereits deutlich reduziert werden. Eine weiter verbesserte Variante besteht jedoch darin, alle Summanden der Matsubara-Summe an jedem Gitterpunkt in jeder Iteration zu speichern und diese gespeicherten Werte als Vergleichsreihe am jeweiligen Gitterpunkt in der folgenden Iteration zu verwenden.

Sei die Matsubara-Summe mit ihren Summanden aus der $(n-1)$ -ten Iteration gespeichert und mit $c = \sum_{k=0}^N c_k$ bezeichnet, und die Matsubara-Summe der n -ten Iteration gesucht und mit $s = \sum_{k=0}^N a_k$ bezeichnet, so wird nach folgendem adaptivem Schema vorgegangen:

1. Berechne das Verhältnis λ als $\lambda = \frac{a_N}{c_N}$.
2. Die initiale Schätzung für die gesuchte Summe ist $s_{-1} = \lambda c$.
3. Berechne für $k \geq 0$ die Summanden a_k explizit und erhalte damit Korrekturen zur gesuchten Summe durch $s_k = s_{k-1} + (a_k - \lambda c_k)$.
4. Breche die Berechnung der Korrekturen zu s_k ab und erhalte $s = s_k$ falls
 - a) die relative Korrektur $(a_k - \lambda c_k) / s_k$ für $k = k_s < N$ eine vorgegebene Toleranz ε unterschreitet oder
 - b) $k = N$.
5. Speichere die berechneten Summanden a_k für die nächste Iteration. Wurde die explizite Berechnung der Summanden bei $k_s < N$ abgebrochen, so speichere für $k_s < k \leq N$ die mit dem Verhältnis λ gewichteten Werte der vorherigen Iteration λc_k .

¹¹Siehe Absatz 3.6.26 in Referenz [78].

Temperaturbereich	verwendete Abschneidefrequenz ω_c
$0 < T \leq 0.5 T_c$	$50 k_B T_c$
$0.5 T_c < T \leq 0.7 T_c$	$100 k_B T_c$
$0.7 T_c < T \leq 0.9 T_c$	$200 k_B T_c$
$0.9 T_c < T < T_c$	$500 k_B T_c$

Tabelle 3.1: Temperaturbereiche und verwendete Abschneidefrequenzen ω_c .

Die Matsubara-Summe aus der vorherigen Iteration stellt eine exzellente Vergleichsreihe dar, da sich die Werte des Paarpotentials, der Stromdichte und des Vektorpotentials in der Regel von Iteration zu Iteration nur schwach ändern. Mit einer schwachen Änderung ist hierbei gemeint, dass sich die Änderung im Wesentlichen durch ein Verhältnis $\lambda \neq 1$ bemerkbar macht, nicht aber durch ein verändertes Konvergenzverhalten. Damit bricht die explizite Berechnung der Summanden der Matsubara-Summe in der Regel für niedrige Werte von k ab und die numerischen Kosten werden erheblich reduziert.

Um ein kritisches Verlangsamen der Konvergenz der iterativen Prozedur zur Lösung der Gap- und der Stromgleichung durch das beschriebene adaptive Verfahren unbedingt zu verhindern, wird die Anwendung der Konvergenzbeschleunigung nach Kummer in jeder dritten Iteration ausgesetzt und alle Terme der Matsubara-Summen werden explizit berechnet.

Die gesamte Rechenzeit für die Berechnung der Matsubara-Summen kann durch die Verwendung der Konvergenzbeschleunigung nach Kummer deutlich reduziert werden. In Testrechnungen war eine Verringerung der numerischen Kosten um ca. 30% festzustellen. Allerdings ist das Verfahren mit einem erheblich erhöhten Speicheraufwand verbunden, da an jedem Gitterpunkt alle Summanden der Matsubara-Summe gespeichert werden müssen.

Um das Konvergenzverhalten der Iterationen der Gap-Gleichung zu verbessern, wird ein adaptives Extrapolationsverfahren verwendet¹². Bei diesem Verfahren, dessen Ziel die Minimierung der Anzahl der benötigten Iterationen ist, wird die durch die Auswertung der Gap-Gleichung gelieferte Änderung des Paarpotentials $d\Delta_n(\mathbf{r}_i)$ an einem Gitterpunkt \mathbf{r}_i in der n -ten Iteration mit einem auf dem Gitter definierten Extrapolationsfaktor $(1 + p_n(\mathbf{r}_i))$ mit $p_n(\mathbf{r}_i) \geq 0$ multipliziert, wobei die Werte $p_n(\mathbf{r}_i)$ adaptiv durch das Konvergenzverhalten bestimmt werden. Die n -te Iteration liefert mit dem Extrapolationsverfahren folglich am Gitterpunkt \mathbf{r}_i folgende Veränderung des Paarpotentials:

$$\Delta_{n+1}(\mathbf{r}_i) = \Delta_n(\mathbf{r}_i) + d\Delta_n(\mathbf{r}_i) \cdot (1 + p_n(\mathbf{r}_i)) \quad (3.47)$$

Die Werte der $p_n(\mathbf{r}_i)$ werden dabei folgendermaßen bestimmt:

$$p_0(\mathbf{r}_i) = 1$$

$$p_n(\mathbf{r}_i) = \begin{cases} 1.2 \cdot p_{n-1}(\mathbf{r}_i) & , \text{ für } \begin{cases} |d\Delta_n(\mathbf{r}_i)| < |d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)| \text{ und} \\ (\text{Re}[d\Delta_n(\mathbf{r}_i)] \cdot \text{Re}[d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)] \\ + \text{Im}[d\Delta_n(\mathbf{r}_i)] \cdot \text{Im}[d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)]) \geq 0 \end{cases} & (A) \\ 0.8 \cdot p_{n-1}(\mathbf{r}_i) & , \text{ für } \begin{cases} |d\Delta_n(\mathbf{r}_i)| < |d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)| \text{ und} \\ (\text{Re}[d\Delta_n(\mathbf{r}_i)] \cdot \text{Re}[d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)] \\ + \text{Im}[d\Delta_n(\mathbf{r}_i)] \cdot \text{Im}[d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)]) < 0 \end{cases} & (B) \\ 0.5 \cdot p_{n-1}(\mathbf{r}_i) & , \text{ für } |d\Delta_n(\mathbf{r}_i)| \geq |d\Delta_{n-1}(\mathbf{r}_i)| & (C) \end{cases}$$

¹²Dieses Verfahren wurde zuvor in anderem Zusammenhang zur Lösung der Gap-Gleichung eingesetzt [79].

Ausgehend vom Startwert $p_0(\mathbf{r}_i) = 1$ wird die Extrapolationsstärke erhöht, wenn die Änderung in zwei aufeinander folgenden Iterationen in der komplexen Ebene in die selbe Richtung weist und ihr Absolutwert abnimmt, das Verfahren also konvergiert (Fall *A*). Nimmt der Absolutwert der Veränderung in zwei aufeinander folgenden Iterationen ab, weist aber in der komplexen Ebene in entgegengesetzte Richtungen, was oszillierende Konvergenz impliziert, so wird die Extrapolationsstärke leicht verringert (Fall *B*). Wächst der Absolutwert der Veränderung in zwei aufeinander folgenden Iterationen an, liegt also keine Konvergenz vor, so wird die Extrapolationsstärke deutlich verringert (Fall *C*).

Tests bei früheren Anwendungen dieser Methode lieferten eine Verringerung der Anzahl der benötigten Iterationen der Gap-Gleichung um etwa 20-30%.

Bei der Iteration der Stromgleichung existiert das Problem, dass der Iterationsprozess vor allem für kleine Werte von $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ zu oszillatorischem Verhalten neigt und nicht konvergiert. Dieses Problem lässt sich beheben, indem die durch die Auswertung der Stromgleichung gelieferte Änderung der Stromdichte $d\mathbf{j}_n(\mathbf{r}_i)$ an einem Gitterpunkt \mathbf{r}_i in der n -ten Iteration mit einem konstanten Dämpfungsfaktor $(1 - q_0)$ mit $0 \leq q < 1$ multipliziert wird. Die tatsächliche Änderung der Stromdichte in der n -ten Iteration am Gitterpunkt \mathbf{r}_i ergibt sich damit zu

$$\mathbf{j}_{n+1}(\mathbf{r}_i) = \mathbf{j}_n(\mathbf{r}_i) + d\mathbf{j}_n(\mathbf{r}_i) \cdot (1 - q_0) \quad (3.48)$$

Für sehr kleine Werte von κ muss der Dämpfungsfaktor $(1 - q_0)$ sehr klein gewählt werden, um ein konvergentes Verhalten des Iterationsprozesses der Stromgleichung zu erhalten. Dies bedingt allerdings eine erhöhte Anzahl an benötigten Iterationen zum Erreichen einer selbstkonsistenten Konfiguration.

Im Rahmen des iterativen Lösungsschemas verändern sich die Werte von $\Delta(\mathbf{r})$ und $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ in einer Iteration an gewissen Gitterpunkten unter Umständen nur sehr schwach. Diese Tatsache kann ausgenutzt werden, um das Verfahren weiter zu optimieren. Wenn die Veränderung der Werte von $\Delta(\mathbf{r})$ und $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ in jeder Iteration an jedem Gitterpunkt gespeichert wird, so kann vor der Auswertung der Gap- und der Stromgleichung an jedem Gitterpunkt kontrolliert werden, ob die Veränderung in der vorherigen Iteration kleiner als ein festgelegter Grenzwert war. War dies der Fall, so kann die Auswertung der Gap- und der Stromgleichung in dieser Iteration an diesem Gitterpunkt ausgesetzt und der Wert von $\Delta(\mathbf{r})$ und $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ aus der vorherigen Iteration beibehalten werden. Um Konflikte mit dem Extrapolationsverfahren zu vermeiden, wird gleichzeitig der Extrapolationsfaktor an diesem Gitterpunkt $p_n(\mathbf{r}_i)$ auf Null gesetzt. Wird ein Gitterpunkt einmalig ausgelassen, so ist davon auszugehen, dass die Werte von $\Delta(\mathbf{r})$ und $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ an diesem Gitterpunkt bereits sehr nahe beim endgültigen Wert liegen und eine Extrapolation ist nicht mehr wesentlich. Um allerdings ein kritisches Verlangsamen der Konvergenz durch das Auslassen von Gitterpunkten unbedingt zu verhindern, erweist es sich als nützlich, in jeder dritten Iteration die Auswertung der Gap- und der Stromgleichung an allen Gitterpunkten zu erzwingen.

3.6.4 Berechnung des Vektorpotentials und des Magnetfeldes

Bei der Berechnung des Vektorpotentials muss die Integralgleichung (3.30) gelöst werden. Die Aufgabe besteht also darin, die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, die an diskreten Gitterpunkten berechnet wurde, mit der zweidimensionalen Greenschen Funktion des Laplace-Operators $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/(2\pi)$ zu gewichten und über die gesamte zweidimensionale Geometrie einschließlich der konstanten Fortsetzung der Ströme für $|x| > L/2$ zu integrieren.

Diese Aufgabe kann erheblich vereinfacht werden, wenn die Stromdichte innerhalb von Zellen der Fläche $Z = a^2$, die um die Gitterpunkte \mathbf{r}_i zentriert sind, näherungsweise als konstant angenommen wird; $a = dx_1$ ist hierbei die feinere Gitterweite der Diskretisierung der Geometrie, siehe Abschnitt 3.6.1. Dann kann das Integral aus Gleichung (3.30) zur Berechnung des Vektorpotentials an einem Gitterpunkt \mathbf{r}_i in eine Summe über alle Knoten

des Gitters $j = 0 \dots M$ umgewandelt werden:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_c(\mathbf{r}_i) &= -\frac{4\pi}{c} \int_F d^2r' \left(-\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'| \right) \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\
&= \frac{2}{c} \sum_{j=0}^M \mathbf{j}(\mathbf{r}_j) \int_{Z_j} d^2r' \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'| \\
&= \frac{2}{c} \sum_{i=0}^M \mathbf{j}(\mathbf{r}_j) g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Das Gewicht $g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ für einen Gitterpunkt \mathbf{r}_i , an dem das Vektorpotential gesucht wird, und eine Zelle Z_j um den Gitterpunkt $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j)$

$$\begin{aligned}
g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) &= \int_{Z_j} d^2r' \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'| \\
&= \int_{x_j-a/2}^{x_j+a/2} dx' \int_{y_j-a/2}^{y_j+a/2} dy' \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|
\end{aligned} \tag{3.50}$$

ist unabhängig von der Stromdichte und kann analytisch integriert werden. Es ist daher nützlich, die numerischen Werte der Gewichte $g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ zur Reduzierung der Rechenzeit für alle Abstände $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ einmalig zu bestimmen und zu speichern. Allerdings ist zu beachten, dass die Darstellung der Gewichte entsprechend Gleichung (3.50) nur für Zellen im Inneren der Geometrie gilt. Für die Randzellen müssen die Gewichte mit entsprechenden Integrationsgrenzen für die Integrale in (3.50) gesondert berechnet werden.

Ist die Gitterweite $a = dx_1$ ausreichend klein, so stellt die Annahme einer konstanten Stromdichte innerhalb von Zellen der Fläche $Z = a^2$ eine sehr gute Näherung dar. Nach dem angegebenen Schema ermöglicht die einmalige analytische Berechnung der Gewichte $g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ eine effiziente Berechnung des Vektorpotentials durch eine einfache Summation.

Das Magnetfeld $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ist nach Gleichung (3.12) durch Bilden der Rotation aus dem Vektorpotential zu berechnen. Da ein quadratisches Gitter mit ausreichend kleiner Gitterweite verwendet wird, können die enthaltenen partiellen Ableitungen durch einfache finite Differenzen berechnet werden. Stellvertretend werden die verwendeten Schemata für eine skalare Funktion $f(x)$, die von einer Variablen x abhängt und an Gitterpunkten x_i mit Abstand h gegeben ist, angegeben:

$$\partial_x f(x_i) \simeq \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} \tag{3.51}$$

$$\partial_x^2 f(x_i) \simeq \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} \tag{3.52}$$

Beide Verfahren sind zentriert um den Gitterpunkt x_i , an dem die partiellen Ableitungen gesucht werden. Ist $f(x)$ zweifach stetig differenzierbar, so sind die Fehler beider Verfahren proportional zu h^2 . Entsprechende Schemata wurden auch für die Implementierung von Kontrollroutinen zur Überprüfung von $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ und $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ verwendet.

3.6.5 Parallelisierung

Bei der Lösung der Gap- und der Stromgleichung sowie der Berechnung des Vektorpotentials bieten sich verschiedene Möglichkeiten zur Parallelisierung der Algorithmen. Eine Parallelisierung ist immer dann möglich, wenn Teile der Berechnungen unabhängig voneinander durchgeführt werden können. Auf Computer-Systemen mit mehr als einer Ausführungseinheit können diese Teilberechnungen dann parallel abgearbeitet werden, wodurch im besten

Fall eine Beschleunigung entsprechend dem Amdahlschen Gesetz¹³ zu erwarten ist.

Bei der Auswertung von Gap- und Stromgleichung ist eine solche Aufteilung in unabhängig auswertbare Teilaufgaben auf verschiedenen Ebenen möglich. Die Fermi-Flächen-Mittelung ist in ihrer diskretisierten Form nichts anderes als eine Schleife, bei der das Argument für eine große Anzahl an Winkeln aufsummiert wird. Die Auswertung der Argumente für verschiedene Winkel kann dabei vollständig unabhängig durchgeführt und somit direkt parallelisiert werden. Gleiches gilt für die Summation über die Matsubara-Frequenzen, bei der das Argument für verschiedene Matsubara-Frequenzen ausgewertet werden muss, was wiederum vollständig unabhängig durchgeführt und parallelisiert werden kann. Eine dritte mögliche Ebene zur Parallelisierung ist die Auswertung von Gap- und Stromgleichung an den Gitterpunkten der räumlichen Diskretisierung. Diese Auswertung kann für verschiedene Gitterpunkte ebenfalls unabhängig durchgeführt und somit parallelisiert werden.

Eine Parallelisierung bringt immer zusätzliche Kosten mit sich, die aus der Verwaltung der verschiedenen Ausführungsstränge (*threads*) des parallelisierten Programmes resultieren. Deshalb muss ein Kompromiss gefunden werden, bei dem einerseits die Aufteilung in Teilaufgaben fein genug ist, so dass verschiedene Ausführungsstränge nicht lange auf eine Zusammenführung warten müssen, wenn sie ihre jeweilige Teilaufgabe erledigt haben, bei dem andererseits die Aufteilung aber nicht zu fein ist und dadurch zu große numerische Kosten durch die Verwaltung der Ausführungsstränge verursacht werden.

Im vorliegenden Fall wurde eine Parallelisierung der Auswertung von Gap- und Stromgleichung auf der Ebene der Gitterpunkte durchgeführt. Die große Anzahl an Gitterpunkten liefert eine ausreichend große Anzahl an unabhängig ausführbaren Teilaufgaben und Konflikte mit den eingesetzten Algorithmen zur beschleunigten Ausführung der Fermi-Flächen-Mittelung sowie der Berechnung der Matsubara-Summe werden vermieden.

Die Berechnung von Vektorpotential und Magnetfeld wurde ebenfalls auf der Ebene der Gitterpunkte parallelisiert. Im Fall des Vektorpotentials muss an jedem Gitterpunkt die Summe (3.49) berechnet werden, die unabhängig von der Berechnung an anderen Gitterpunkten ist. Im Fall des Magnetfeldes muss die Rotation des Vektorpotentials unter Verwendung der finiten Differenzen entsprechend Gleichung (3.51) gebildet werden, was ebenfalls an jedem Gitterpunkt unabhängig durchgeführt werden kann.

3.6.6 Einheiten

In dieser Arbeit werden alle Energien auf die charakteristische Skala $k_B T_c$ normiert. Die charakteristische Längenskala, die zur Normierung aller Längen verwendet wird, ist die Kohärenzlänge bei $T = 0$

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta_0} \quad (3.53)$$

mit der Amplitude des Paarpotentials bei $T = 0$ im *bulk* $\Delta_0 = \Delta_\infty(T = 0)$. Stromdichten werden mit der Normierung

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{\mathbf{j}}{eN(0)v_F k_B T_c} \quad (3.54)$$

angegeben, und über eine bestimmte Breite w integrierte Gesamtströme bei der Filmdicke d in der Darstellung

$$\hat{I} = \frac{I}{\pi e N(0) v_F k_B T_c \xi_0 d} \quad (3.55)$$

¹³Das Amdahlsche Gesetz macht Aussagen über die maximal mögliche Beschleunigung eines Computerprogrammes durch eine parallelisierte Ausführung. Wird ein parallelisiertes Programm auf N Prozessoren ausgeführt und ist p der parallelisierbare sowie $(1-p)$ der nicht parallelisierbare Anteil des Programmes, so ergibt sich die maximal mögliche Beschleunigung s durch die Parallelisierung (*speedup*) zu $s = 1 / [(1-p) + \frac{p}{N}]$. Im Grenzfall einer großen Anzahl von Prozessoren wird die maximal mögliche Beschleunigung folglich durch den nicht parallelisierbaren Anteil des Programmes limitiert.

Die London-Eindringtiefe $\lambda_L(T = 0)$ ist definiert durch

$$\frac{1}{\lambda_L^2(T = 0)} = 4\pi \frac{e^2}{c^2} \frac{n_s}{m} \quad (3.56)$$

wobei n_s die zunächst unbestimmte Dichte der an der Supraleitung beteiligten Elektronen sowie m ihre Masse ist. Verwendet man näherungsweise als natürliche obere Grenze für n_s die Dichte aller beweglichen Elektronen n , so folgt im Fall einer zylindrischen Fermi-Fläche mit $n = N(0)v_F^2 m$ die Darstellung

$$\frac{1}{\lambda_L^2(T = 0)} = 4\pi \frac{e^2}{c^2} N(0)v_F^2 \quad (3.57)$$

Normiert man das Vektorpotential mit dem Flussquant $\Phi_0 = hc/(2e)$ durch

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{A}}{\frac{\Phi_0}{\xi_0} \frac{1}{\pi^2} \frac{k_B T_c}{\Delta_0}} \quad (3.58)$$

sowie das Magnetfeld durch

$$\hat{\mathbf{B}} = \frac{\mathbf{B}}{\frac{\Phi_0}{\xi_0^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{k_B T_c}{\Delta_0}} \quad (3.59)$$

so folgt aus der Poisson-Gleichung (3.29) für den Anteil des Vektorpotentials $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$, der durch die in der Geometrie fließenden Ströme hervorgerufen wird, mit dem Verhältnis $\kappa = \lambda_L(T = 0)/\xi_0$ aus London-Eindringtiefe $\lambda_L(T = 0)$ und Kohärenzlänge ξ_0 die normierte Poisson-Gleichung

$$-\hat{\Delta} \hat{\mathbf{A}}_c = \frac{1}{\kappa^2} \hat{\mathbf{j}}$$

mit dem normierten Laplace-Operator $-\hat{\Delta} = -\xi_0^2 \Delta$. Hieraus wird sofort ersichtlich, dass die Amplitude des Beitrages zum Vektorpotential \mathbf{A}_c , der durch die in der Geometrie fließenden Ströme hervorgerufen wird, mit $1/\kappa^2$ skaliert. Damit wird \mathbf{A}_c und elektromagnetische Selbstkonsistenz an sich für große Werte von κ sehr schnell vernachlässigbar, während der Einfluss für kleine Werte von κ stark anwächst.

Das (temperaturunabhängige) Verhältnis $\kappa = \lambda_L(T = 0)/\xi_0$ ist proportional zum Ginzburg-Landau-Parameter $\kappa_{\text{GL}}(T) = \lambda_{\text{eff}}(T)/\xi(T)$ bei $T = T_c$, wobei durch $\lambda_{\text{eff}}^2(T) = m^* c^2 / (4\pi |\psi|^2 e^{*2})$ die effektive Eindringtiefe und durch $\xi^2(T) = \hbar^2 / (2m^* |\alpha(T)|)$ die Kohärenzlänge der Ginzburg-Landau-Theorie gegeben ist. Für eine kugelförmige Fermi-Fläche und einen Supraleiter im sauberen Grenzfall ist die Proportionalitätskonstante $\kappa_{\text{GL}}(T_c)/\kappa = 0.96$ in den Referenzen [80] (Gleichung (4.27 a)) und [81] (Kapitel 14, Gleichung (23)) angegeben. Für den vorliegenden Fall einer zylindrischen Fermi-Fläche, ebenfalls im sauberen Grenzfall, ist die Proportionalitätskonstante $\kappa_{\text{GL}}(T_c)/\kappa = 0.78$.

3.7 Implementierung

Die in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Algorithmen und numerischen Methoden zur Berechnung selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit in der Programmiersprache C++ umgesetzt. Das Programm folgt einer objektorientierten Struktur und wurde numerisch optimiert. Die beschriebene Parallelisierung wurde mit Hilfe von OpenMP realisiert und ermöglicht die Nutzung von Multiprozessor-Umgebungen mit gemeinsam genutztem Speicher (*shared memory multiprocessor*, SMP).

Das Programm wurde objektorientiert strukturiert, um eine möglichst große Modularität und Erweiterbarkeit zu gewährleisten. Da das Programm für eine große Anzahl an numerischen Rechnungen verwendet wurde, ist eine übersichtliche und erweiterbare Strukturierung unablässig. Gleichzeitig ist es bei einem umfangreichen numerischen Projekt zum Schutz vor Programmierfehlern äußerst wichtig, möglichst strenge Mechanismen zur Vermeidung fälschlicher Zugriffe auf die zwischengespeicherten Daten zu implementieren. Beides kann mit einer objektorientierten Grundstruktur erreicht werden.

Um vorhandene SMP-Systeme optimal einzusetzen, wurde die beschriebene Parallelisierung mit Hilfe von OpenMP realisiert. OpenMP ist eine Programmierschnittstelle (*application programming interface*, API) zur Erzeugung und Steuerung von Ausführungssträngen (*threads*) sowie der Lastverteilung zwischen diesen und besteht aus einem Satz von Compiler-Anweisungen, Laufzeit-Bibliotheken und Umgebungsvariablen, die einem definierten Standard entsprechen und in mehreren C++- und FORTRAN-Compilern umgesetzt sind¹⁴. Dies garantiert optimale Portabilität, d. h. der Einsatz verschiedener Compiler und Betriebssysteme ist ohne weiteres möglich. Des Weiteren lässt sich vorhandener sequentieller (nicht-parallelisierter) Code mit Hilfe von OpenMP inkrementell parallelisieren und es ist möglich, eine rein sequentielle und eine (partiell) parallelisierte Programmversion in einem gemeinsamen Quellcode zu verwalten. Dadurch ist es nicht notwendig, mehrere Programmversionen für den Einsatz auf Multiprozessor- und Ein-Prozessor-Systemen zu führen und eine Ausführung des Programmes auf verschiedensten Plattformen ist einfach möglich. Gleichzeitig ist die Fehlersuche durch die Möglichkeit der inkrementellen Parallelisierung nicht wesentlich komplexer als bei rein sequentiellen Programmen.

Durch die in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Algorithmen und numerischen Methoden konnte die Rechenzeit zur Berechnung zweidimensionaler selbstkonsistenter Lösungen der mikroskopischen Eilenberger-Gleichungen drastisch reduziert werden. Damit konnten in dieser Arbeit erstmals systematisch zweidimensionale selbstkonsistente Rechnungen zur Untersuchung des supraleitenden Zustandes eingesetzt werden.

Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes, der zur selbstkonsistenten Lösung der mikroskopischen Eilenberger-Gleichungen notwendig ist, sind die Laufzeiten des erstellten Programmes trotz aller eingesetzten Verfahren erheblich. Für die Berechnung einer einzigen selbstkonsistenten zweidimensionalen Konfiguration, die einem Punkt auf einer Strom-Phasen-Beziehung entspricht, liegt die Rechenzeit bei Verwendung eines aktuellen Ein-Prozessor-Arbeitsplatzrechners in der Größenordnung von einem Tag. Um dennoch Ergebnisse für eine große Anzahl an Parameterkombinationen angeben zu können, wurde eine erhebliche Anzahl an Arbeitsplatzrechnern und Workstations parallel eingesetzt. Die zuvor beschriebene Portabilität des erstellten Programmes, die aus der Verwendung der Programmiersprache C++ zusammen mit OpenMP resultiert, ermöglicht dabei die effiziente und einheitliche Verwendung verschiedener Systeme und Architekturen.

¹⁴Eine aktuelle Einführung unter Berücksichtigung der neuesten Version 2.5 des OpenMP-Standards ist in Referenz [82] zu finden.

3.8 Vergleich mit bekannten Resultaten

Das implementierte Programm wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit eingesetzt, um Strom-Phasen-Beziehungen und kritische Ströme geometrischer Josephson-Kontakte mit verschiedenen Engstellen-Geometrien für Supraleiter mit s - und d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung zu untersuchen. Um die Korrektheit des numerischen Codes sicherzustellen, wurden zunächst einige Testrechnungen durchgeführt, die dazu dienen, bekannte Ergebnisse für s -Wellen-Supraleiter zu reproduzieren.

Als erster Test dient der Vergleich mit Ergebnissen der Ginzburg-Landau-Theorie für den kritischen Strom eines dünnen Drahtes oder Films¹⁵. Bei dieser Rechnung wird die als homogen angenommene Unterdrückung des Ordnungsparameters durch eine endliche suprafluide Geschwindigkeit in einem dünnen Draht oder Film untersucht. Für die Amplitude des Ordnungsparameters $|\psi|$ folgt

$$|\psi(T)|^2 = \psi_\infty^2(T) \left[1 - \left(\frac{\xi(T)m^*v_s}{\hbar} \right)^2 \right] \quad (3.60)$$

mit der Amplitude des Ordnungsparameters im *bulk* $\psi_\infty(T)$, der Ginzburg-Landau-Kohärenzlänge $\xi^2(T) = \hbar^2/(2m^*|\alpha(T)|)$ sowie dem Betrag der suprafluiden Geschwindigkeit $v_s = |\mathbf{v}_s|$. Die Abhängigkeit der Stromdichte von der suprafluiden Geschwindigkeit folgt dann aus

$$\mathbf{j} = 2e|\psi|^2\mathbf{v}_s \quad (3.61)$$

wobei das Maximum bezüglich der Variation von \mathbf{v}_s den kritischen Strom liefert. Nahe der Sprungtemperatur T_c und bei Verwendung einer Geometrie ohne Engstelle sowie mit lateraler Ausdehnung $W < \lambda_L$ reproduziert die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode die Ergebnisse der Ginzburg-Landau-Rechnung.

Ein zweiter, rigoroserer Test besteht im Vergleich mit einer Doppler-Shift-Rechnung¹⁶. Dazu werden die Selbstkonsistenz-Bedingungen der quasiklassischen Theorie, gegeben durch die Gap-Gleichung (3.8) und die Stromgleichung (3.9), im *bulk* mit einem homogenen Phasengradienten

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n - \frac{\hbar}{2}\mathbf{v}_F \cdot \nabla\phi(x) \quad (3.62)$$

gelöst. Dies führt, wie die zuvor beschriebene Ginzburg-Landau-Rechnung, zu einer homogenen Unterdrückung des Paarpotentials, wobei der Gültigkeitsbereich jedoch nicht auf Temperaturen nahe T_c beschränkt ist. Mit diesem homogenen Phasengradienten können Gap- und Stromgleichung im *bulk* gelöst werden (siehe Abb. 3.7). Bei Verwendung einer Geometrie ohne Engstelle sowie mit $W < \lambda_L$ decken sich die Ergebnisse perfekt mit denen des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programmes.

Ein dritter Test besteht darin, die Ergebnisse mit denen für eine ballistische Mikrobrücke nach Zareyan, Kolesnichenko und Omelyanchouk zu vergleichen; diese wurden in Abschnitt 2.3.4 beschrieben. Allerdings müssen dazu die Randbedingungen der in dieser Arbeit verwendeten Methode leicht angepasst werden. Wird für die Realisierung der Randbedingungen am linken und rechten Ende des Kanals (bei $x = \pm L/2$) nicht die beschriebene periodische Fortsetzung verwendet, sondern die Werte $\Delta_{L,R} = \Delta_\infty(T)e^{\mp i\gamma/2}$ fest vorgegeben, und wird eine Geometrie ohne Engstelle verwendet, so kann der gesamte Kanal mit der ballistischen Mikrobrücke aus der Arbeit von Zareyan *et al.* identifiziert werden. Nahe der kritischen Temperatur T_c , dem Gültigkeitsbereich der Lösung von Zareyan *et al.*, können die in Abschnitt 2.3.4 angegebenen Ergebnisse numerisch reproduziert werden.

¹⁵Siehe dazu Kapitel 4.4 in Referenz [81]

¹⁶Zur Doppler-Shift-Methode, ihrer Ableitung aus der Riccati-Parametrisierung sowie zu einem kritischen Vergleich mit der exakten Lösung im Vortex-Zustand in s - und d -Wellen-Supraleitern siehe Referenz [83].

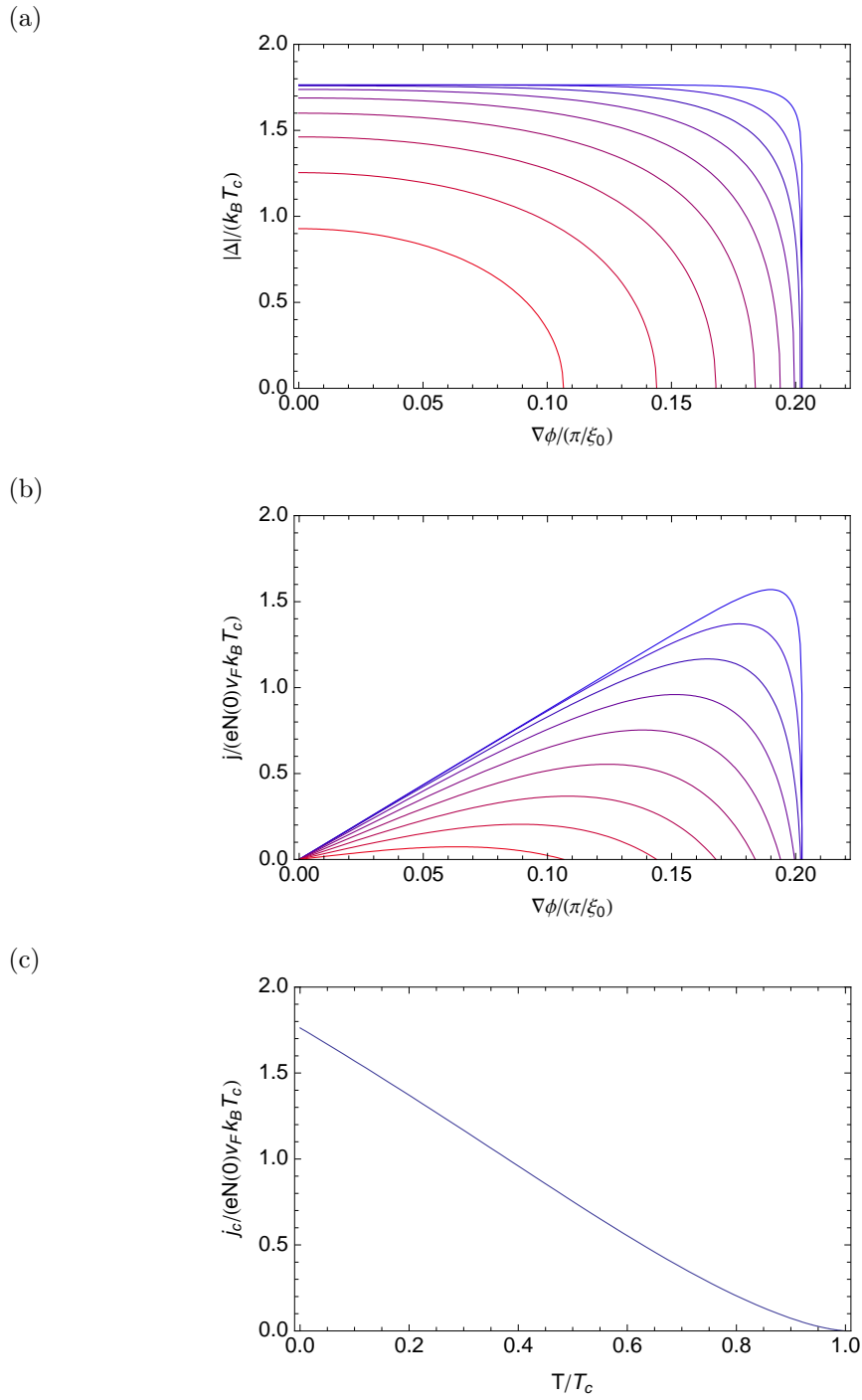


Abbildung 3.7: Resultate der Doppler-Shift-Methode für einen Supraleiter mit s-Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung ($\chi(\mathbf{p}_F) = 1$). Amplitude des Paarpotentials in (a) und Stromdichte in (b) bei einem homogenen Phasengradienten $\nabla\phi$ für Temperaturen von $T = 0.1 T_c$ (blau) bis $T = 0.9 T_c$ (rot) in Schritten von $0.1 T_c$. In (c) ist die resultierende maximale oder kritische Stromdichte als Funktion der Temperatur dargestellt.

Die Ergebnisse der durchgeführten numerischen Rechnungen werden in den folgenden Kapiteln präsentiert und diskutiert. Diese werden, soweit möglich, mit früheren Ergebnissen sowie mit approximativen, aber analytisch lösbaren Modellen verglichen.

In Kapitel 4 wird der Josephson-Effekt an Mikrobrücken in einem s -Wellen-Supraleiter untersucht. In diesem Kapitel werden die grundlegenden Mechanismen, die zum Auftreten des Josephson-Effektes an Engstellen-Kontakten führen, diskutiert. Des Weiteren wird der Einfluss der geometrischen Parameter, der Temperatur, des Parameters $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ und der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes betrachtet.

In Kapitel 5 werden geometrische Josephson-Kontakte an d -Wellen-Supraleitern untersucht. Hierbei werden insbesondere Effekte betrachtet, die nur bei Supraleitern mit d -Wellen-Symmetrie auftreten und diese von s -Wellen-Supraleitern unterscheiden.

In Kapitel 6 wird ein geometrischer Josephson-Kontakt in einem d -Wellen-Supraleiter vorgeschlagen, der allein aufgrund seiner speziellen Geometrie robuste intrinsische Phasendifferenzen aufweist.

Kapitel 4

s -Wellen-Supraleiter: Mikrobrücke

In diesem Kapitel wird ein geometrischer Josephson-Kontakt bestehend aus einem Supraleiter mit s -Wellen-Symmetrie des Paarpotentials betrachtet. Bei s -Wellen-Symmetrie ist der impulsabhängige Anteil der Faktorisierung des Paarpotentials (3.7) unabhängig vom Fermi-Impuls \mathbf{p}_F

$$\chi(\mathbf{p}_F) = 1 \quad (4.1)$$

und das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})$ ist nur vom Ort \mathbf{r} abhängig.

Die untersuchte Geometrie besteht aus einer rechtwinkligen Mikrobrücke entsprechend Abbildung 4.1. Im Folgenden wird zunächst anhand selbstkonsistenter Lösungen der Eilenberger-Gleichungen im Detail erklärt, wie der Josephson-Effekt an einer Engstelle entsteht (Abschnitt 4.1). Des Weiteren wird der Einfluss der Temperatur (Abschnitt 4.2), geometrischer Parameter (Abschnitt 4.3), des Parameters $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ (Abschnitt 4.4) sowie eines externen Magnetfeldes (Abschnitt 4.5) untersucht.

Die wichtigsten Ergebnisse dieses Kapitels sind in Referenz [84] veröffentlicht.

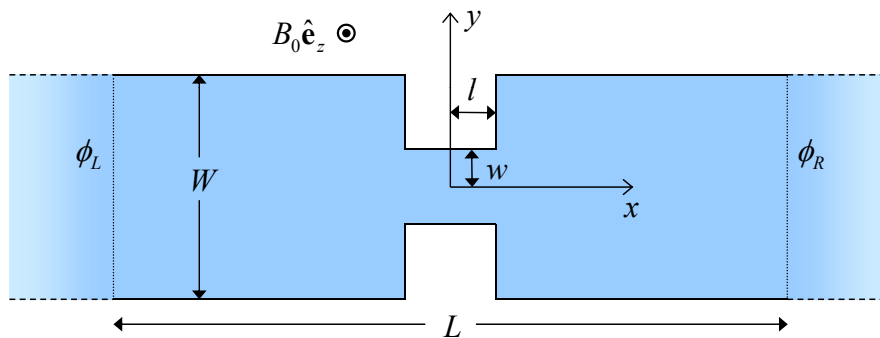


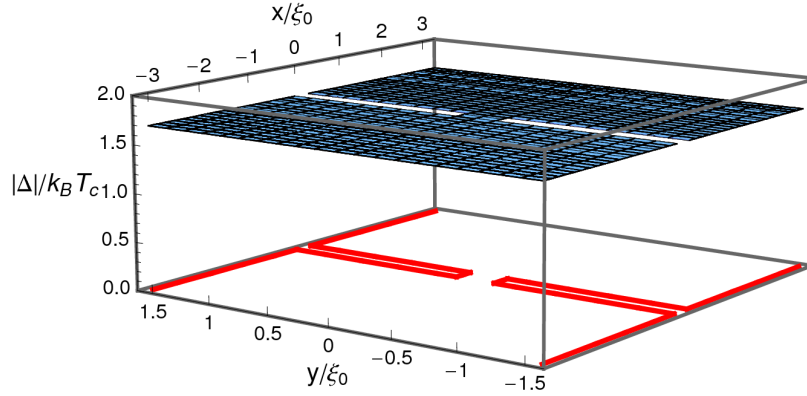
Abbildung 4.1: Modellgeometrie zur Untersuchung eines Engstellen-Josephson-Kontaktes in einem Supraleiter mit s -Wellen-Symmetrie des Paarpotentials. Die Engstelle in der Form einer rechtwinkligen Mikrobrücke ist durch die Länge $2l$ und die Breite $2w$ definiert und in einen Kanal der Breite W eingebettet.

4.1 Der Josephson-Effekt an Engstellen-Kontakten

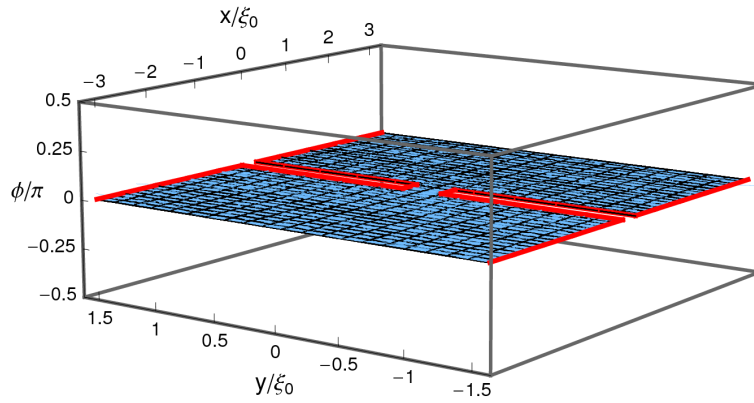
In diesem Abschnitt werden Ergebnisse ohne die Berücksichtigung elektromagnetischer Selbstkonsistenz ($\kappa = \infty$) sowie ohne äußeres Magnetfeld ($B_0 = 0$) präsentiert, um die für das Auftreten des Josephson-Effektes an einem Engstellen-Kontakt relevanten Mechanismen im Detail zu untersuchen. Weiterhin werden dazu zunächst feste Werte für die geometrischen

Parameter verwendet ($2l = 2w = 0.314 \xi_0$) und es wird eine Temperatur von $T = 0.5 T_c$ eingestellt. Die Abmessungen des Abschnittes, für den die Eilenberger-Gleichungen numerisch gelöst werden, werden zu $L = 6.28 \xi_0$ und $W = 3.14 \xi_0$ gewählt. Am Ende dieses Abschnittes wird der Einfluss der Größen L und W diskutiert.

(a)



(b)



(c)

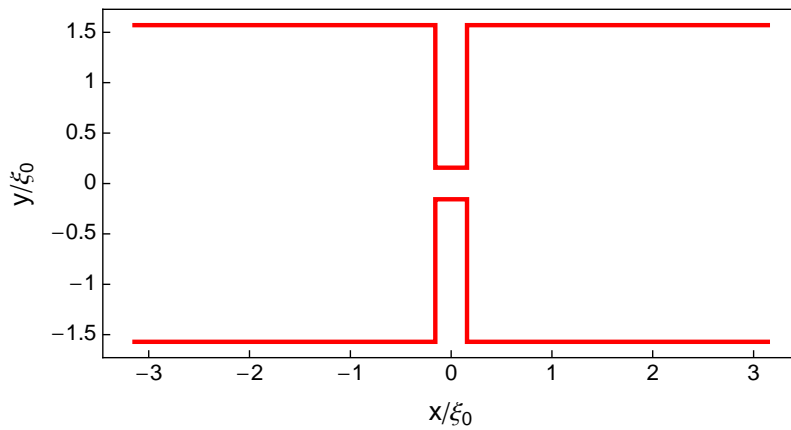


Abbildung 4.2: Amplitude und Phase des Paarpotentials in (a) und (b) sowie die Stromdichte in (c) für verschwindende Phasendifferenz $\gamma = 0$. Die Geometrie der Engstelle ist jeweils durch die roten Linien ersichtlich. In (c) ist die Stromdichte dargestellt, die für $\gamma = 0$ überall verschwindet.

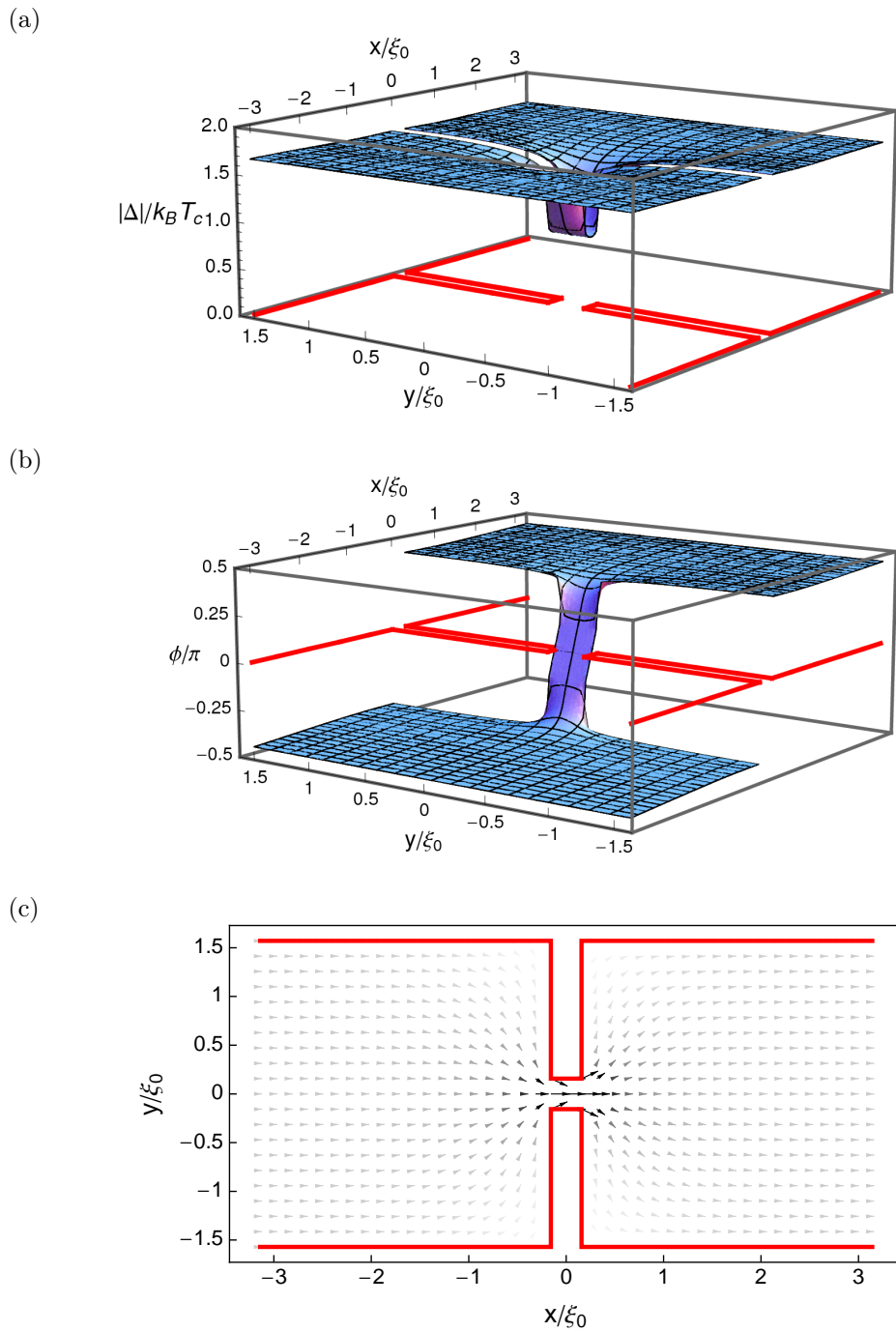


Abbildung 4.3: Amplitude und Phase des Paarpotentials in (a) und (b) sowie die Stromdichte in (c) bei einer endlichen Phasendifferenz (hier exemplarisch $\gamma = 0.9\pi$). In (c) ist in beiden räumlichen Richtungen jeweils nur jeder fünfte tatsächlich berechnete Gitterpunkt eingezeichnet; die Graustufung ist dabei proportional zum Betrag der Stromdichte.

In den Abbildungen 4.2 und 4.3 sind die Amplitude und die Phase des Paarpotentials sowie die Stromdichte für verschwindende Phasendifferenz ($\gamma = 0$) sowie für eine endliche Phasendifferenz (hier exemplarisch $\gamma = 0.9\pi$) dargestellt. Bei einer verschwindenden Phasendifferenz (Abb. 4.2) nimmt die Amplitude des Paarpotentials überall den *bulk*-Wert $\Delta_\infty(T)$ an und ist konstant. Die Phase ist ebenfalls konstant und folglich verschwindet die Strom-

dichte überall. Im Fall einer endlichen Phasendifferenz (Abb. 4.3) ist die Amplitude des Paarpotentials lokal in der Engstelle stark verringert. Die Phasendifferenz fällt im Wesentlichen im Bereich der Engstelle ab, während die Phase in größerer Entfernung der Engstelle schwach variiert. Es ergibt sich eine hohe Stromdichte in der Engstelle, während sich aufgrund des größeren Querschnittes in einiger Entfernung der Engstelle eine vergleichsweise schwache, homogene Stromdichte einstellt.

Der Gleichstrom-Josephson-Effekt wird durch die Strom-Phasen-Beziehung charakterisiert. Die in den Abbildungen 4.2 und 4.3 exemplarisch für zwei Werte der Phasendifferenz dargestellten Größen müssen demnach für beliebige Phasendifferenzen im Intervall $\gamma \in [0, \pi]$ betrachtet werden. Für die gewählte Geometrie sind dazu in Abbildung 4.4(a) und (b) Amplitude und Phase des Paarpotentials entlang der x -Achse entsprechend Abbildung 4.1 für verschiedene Werte der Phasendifferenz γ dargestellt. Die entsprechenden Stromdichten entlang der x -Achse sind in Teilabbildung (c) abgebildet.

Wie aus Abbildung 4.4 ersichtlich wird, fließt mit zunehmender Phasendifferenz ein immer stärkerer Strom durch die Engstelle. Die Konzentration der Ströme in der Engstelle führt lokal zu hohen Stromdichten, die Paarbrechung und somit eine Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials bedingen. Die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials wiederum limitiert den Strom, der über den Kontakt fließen kann. Gleichzeitig führt die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials zu einer teilweisen Entkopplung der linken und der rechten Hälfte der Geometrie. Die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials, die durch die Konzentration der Ströme in der Engstelle hervorgerufen wird, führt damit zum Auftreten des Josephson-Effektes in Engstellen-Kontakten. Die für den Josephson-Kontakt relevante teilweise Entkopplung der Elektroden wird bei einem Engstellen-Kontakt durch die Konzentration der fließenden Ströme in der Engstelle hervorgerufen.

So lange die Phasendifferenz γ und damit die Stromdichte klein sind, ist die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials vernachlässigbar. In diesem Bereich entspricht die selbstkonsistent berechnete Verteilung der Phase der Lösung einer Laplace-Gleichung mit Neumannschen Randbedingungen ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \phi = 0$) entsprechend London-Theorie, d. h. lokaler Elektrodynamik. Die Begründung für die Gültigkeit einer Laplace-Gleichung für die Phase des Paarpotentials im Rahmen lokaler Elektrodynamik wird im Folgenden kurz dargestellt. Aufgrund der Annahmen $B_0 = 0$ und $\kappa = \infty$ verschwindet das Magnetfeld im Inneren des Supraleiters lokal:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$$

Deshalb kann das Vektorpotential in London-Eichung, d. h. mit einem reellen Paarpotential $\Delta(\mathbf{r})$, als Gradient einer skalaren Funktion $\phi(\mathbf{r})$ geschrieben werden:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \phi(\mathbf{r})$$

In London-Theorie gilt

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{n_s e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

und damit

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{n_s e^2}{mc} \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \phi(\mathbf{r})$$

Aufgrund von $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ folgt sofort, dass die Funktion $\phi(\mathbf{r})$ eine Laplace-Gleichung erfüllen muss:

$$\nabla \cdot (\nabla \phi(\mathbf{r})) = 0$$

Des Weiteren muss die Normalkomponente der Stromdichte an Oberflächen verschwinden ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$) und folglich gelten die erwähnten Neumannschen Randbedingungen für die Funktion $\phi(\mathbf{r})$.

Die bisher nicht näher bestimmte skalare Funktion $\phi(\mathbf{r})$ kann aufgrund der Eichfreiheit der Riccati-Gleichungen bezüglich der Eichtransformation

$$\begin{aligned}\Delta(\mathbf{r}) &\rightarrow \tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r}) e^{i\phi(\mathbf{r})} \\ \mathbf{A}(\mathbf{r}) &\rightarrow \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla\phi(\mathbf{r})\end{aligned}$$

mit der Phase des komplexen Paarpotentials $\tilde{\Delta}(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})e^{i\phi(\mathbf{r})}$ identifiziert werden. Mit dieser Eichtransformation verschwindet das transformierte Vektorpotential $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$, was exakt der vorliegenden Situation ($B_0 = 0$, $\kappa = \infty$) entspricht, und die Funktion $\phi(\mathbf{r})$ ist die Phase des transformierten Paarpotentials $\tilde{\Delta}(\mathbf{r})$. Nach dieser Eichtransformation entspricht die Eichung genau der in der vorliegenden Rechnung gewählten und die Funktion $\phi(\mathbf{r})$ wird tatsächlich mit der Phase des Paarpotentials identifiziert.

Mit wachsender Phasendifferenz wächst die Stromdichte und damit die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials in der Engstelle. Dadurch wachsen auch die Abweichungen der Phasenverteilung von der Lösung einer Laplace-Gleichung. Bei einer Phasendifferenz von $\gamma = \pi$ fällt die gesamte Phasendifferenz in der Engstelle ab und die Amplitude des Paarpotentials ist lokal vollständig unterdrückt. Damit verschwinden die Ströme über die Engstelle bei $\gamma = \pi$.

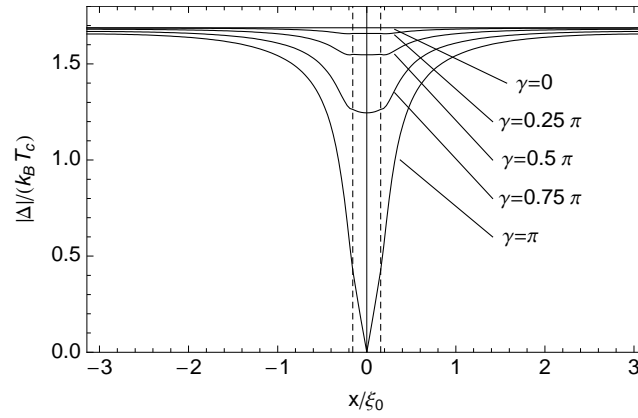
Die Strom-Phasen-Beziehung, die aus einer Integration der Stromdichte über einen Querschnitt der Geometrie für alle Werte der Phasendifferenz γ resultiert, ist in Abbildung 4.5(a) dargestellt. Für kleine Phasendifferenzen wächst der Strom zunächst linear mit γ an. Für die hier gewählten Parameter wird der kritische Strom bei etwa $\gamma \simeq 0.71\pi$ erreicht. Für größere Phasendifferenzen fällt der Gesamtstrom wieder ab und verschwindet bei $\gamma = \pi$. Die für die verwendeten Parameter resultierende Strom-Phasen-Beziehung zeigt deutliche Abweichungen von einer sinusförmigen Abhängigkeit; diese Abweichungen werden in den folgenden Abschnitten im Detail untersucht.

In Abbildung 4.5(b) ist die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle dargestellt. Für $\gamma = 0$ entspricht diese zunächst der lokalen Zustandsdichte im *bulk*. Mit zunehmender Phasendifferenz entstehen ausgeprägte gebundene Andreev-Zustände innerhalb der Energielücke ($|E| < \Delta_\infty(T)$). Die Energie dieser gebundenen Zustände nimmt mit wachsender Phasendifferenz γ ab. Bei der maximalen Phasendifferenz von $\gamma = \pi$ liegen sie bei $E = 0$ und weisen das ausgeprägteste lokale Maximum auf. Bei mittleren Phasendifferenzen zeigt die lokale Zustandsdichte weitere Substrukturen; diese werden im folgenden Abschnitt genauer diskutiert.

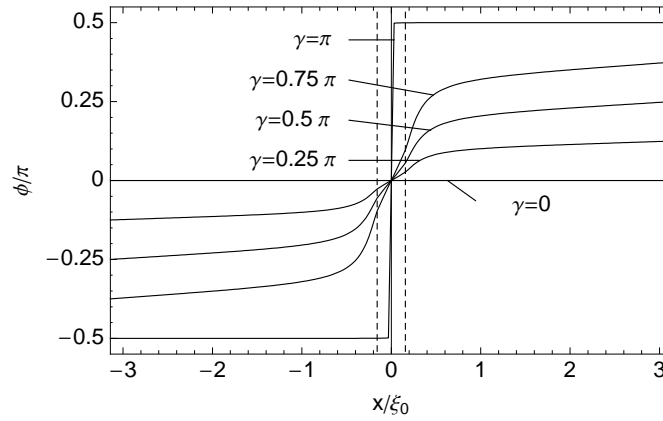
Die gebundenen Andreev-Zustände repräsentieren phasenkohärente Quasiteilchen, die den Strom über den Josephson-Kontakt tragen. Auf einer Seite des Kontaktes einlaufende Cooper-Paare werden in Quasiteilchen-Zustände umgewandelt, die phasenkohärent über den Kontakt fließen. Auf der anderen Seite des Kontaktes bilden diese Quasiteilchen-Zustände wieder ein Cooper-Paar. Damit tragen die gebundenen Andreev-Zustände den Strom über einen Engstellen-Josephson-Kontakt.

Durch die Betrachtung der Amplitude und der Phase des Paarpotentials sowie der Ströme und der lokalen Zustandsdichte resultiert ein geschlossenes Bild des Josephson-Effektes an einem Engstellen-Kontakt. Die teilweise Entkopplung der beiden Elektroden, die einen Josephson-Kontakt ausmacht, ist eine Folge der starken Konzentration der Ströme in der Engstelle. Aufgrund dieser teilweisen Entkopplung ist eine starke Variation der Phase in der Engstelle möglich und die Ströme verschwinden bei Phasendifferenzen γ , die ganzzahlige Vielfache von π sind. Gleichzeitig entstehen durch die starke Variation der Phase gebundene Andreev-Zustände, die den Strom über den Kontakt tragen.

(a)



(b)



(c)

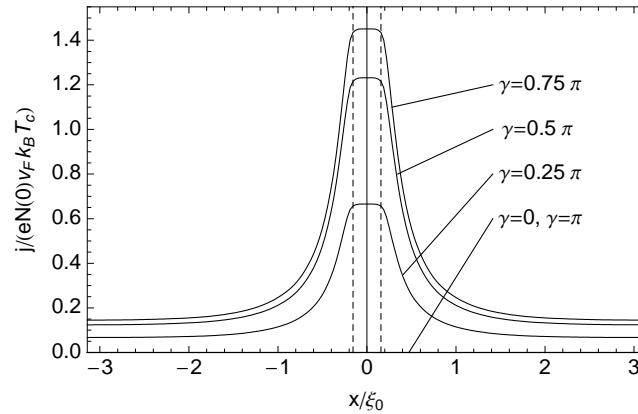


Abbildung 4.4: Josephson-Effekt an einem Engstellen-Kontakt mit $2l = 2w = 0.314\xi_0$ bei $T = 0.5T_c$ mit $B_0 = 0$ und $\kappa = \infty$. In (a) und (b) sind die Amplitude und die Phase des Paarpotentials entlang der x -Achse der Geometrie aus Abbildung 4.1 für verschiedene Werte der eichinvarianten Phasendifferenz γ dargestellt. In (c) ist die Stromdichte entlang der x -Achse für die selben Werte der Phasendifferenz abgebildet. Die Länge der Engstelle ist jeweils durch die gestrichelten vertikalen Linien angedeutet.

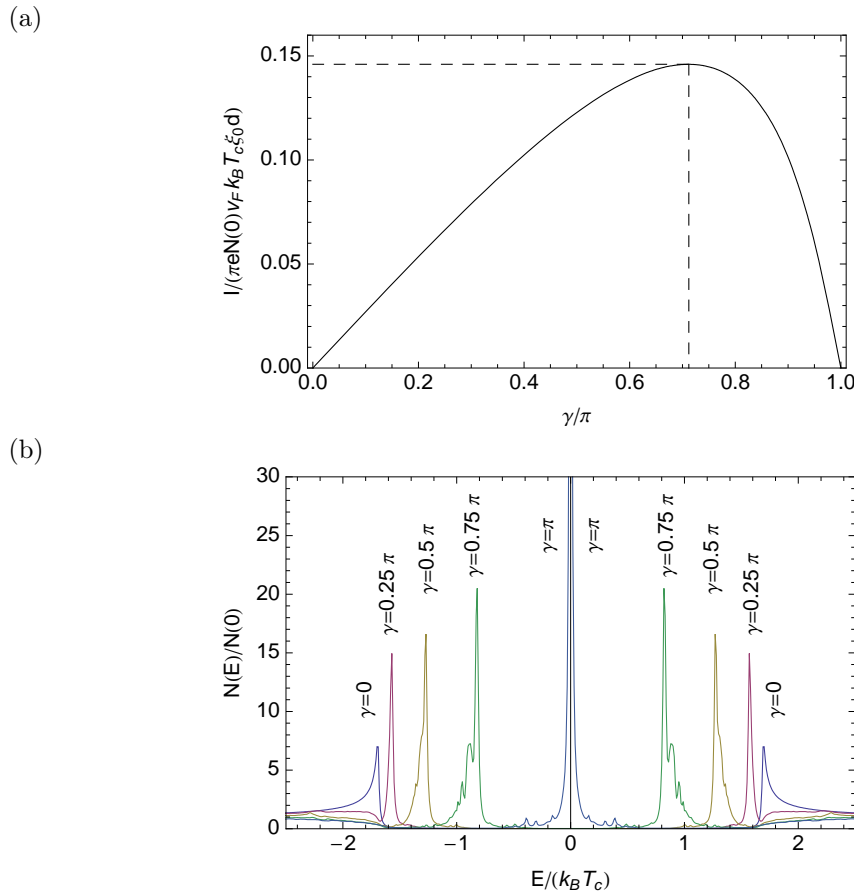


Abbildung 4.5: Die Strom-Phasen-Beziehung zu Abbildung 4.4 ist in (a) dargestellt, wobei der kritische Strom durch die gestrichelten Linien hervorgehoben ist. Die entsprechende lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0$, $y = 0$) ist in (b) abgebildet.

Die Bedeutung von gebundenen Andreev-Zuständen für ein detailliertes Bild des Cooper-Paar-Tunnels in Josephson-Kontakten wurde bereits von I. O. Kulik [85] und C. Ishii [86,87] erkannt. Dieses Bild beinhaltet die sogenannte Andreev-Reflexion [88–91] an den Übergängen zwischen dem Josephson-Kontakt und den Elektroden, bei der Cooper-Paare in phasenkohärente Quasiteilchen umgewandelt werden, und umgekehrt. Die gebundenen Andreev-Zustände repräsentieren demnach umlaufende elektronenartige und lochartige Quasiteilchenanregungen innerhalb des Josephson-Kontaktes, die in jedem Umlauf ein Cooper-Paar über den Kontakt transferieren. Folglich wird der Stromtransport über einen Josephson-Kontakt von gebundenen Andreev-Zuständen getragen.

Für dieses Bild des Stromtransportes über einen Josephson-Kontakt ist die genaue Kenntnis der gebundenen Andreev-Zustände im Kontakt und seiner Umgebung von grundlegender Bedeutung. Diese Tatsache hat dazu geführt, dass die lokale Zustandsdichte für verschiedene Arten von Josephson-Kontakten untersucht wurde. So wurden unter anderem in den Referenzen [72, 92] Engstellen-Kontakte untersucht, SNS-Kontakte in den Referenzen [85–87], SNS- und SIS-Kontakte in den Referenzen [93–96] sowie SNS- und SFS-Kontakte mit s - und d -Wellen-Symmetrie in Referenz [97]¹. In der vorliegenden Arbeit wird die lokale Zustandsdichte in Engstellen-Josephson-Kontakten erstmals anhand selbstkonsistenter Lösungen mikroskopischer Theorie für eine realistische zweidimensionale Geometrie untersucht.

¹Hierbei steht S für Supraleiter, N für Normalleiter, I für Isolator und F für Ferromagnet.

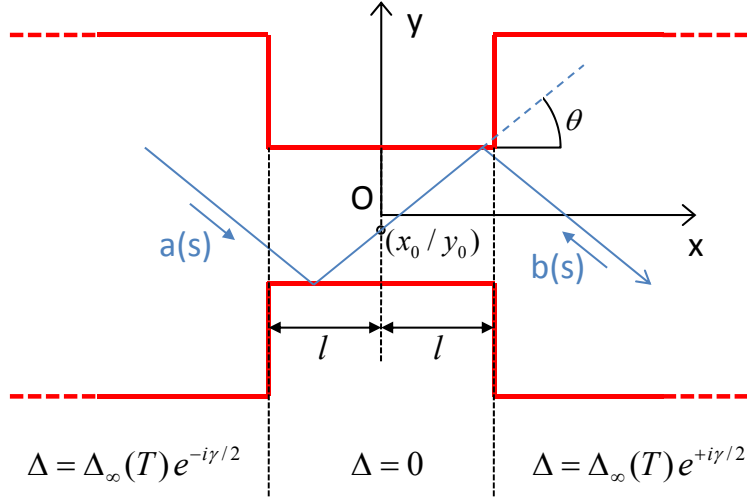


Abbildung 4.6: Skizze zum S-N-S-Modell für das Paarpotential. Für eine exemplarische Trajektorie ausgehend vom Aufpunkt $(x_0 = 0, y_0)$ mit dem Orientierungswinkel θ sind die Richtungen angedeutet, entlang derer die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ integriert werden müssen.

Um die Bedeutung der Selbstkonsistenz zu verdeutlichen, werden die selbstkonsistenten Ergebnisse im Folgenden mit einem einfachen nicht-selbstkonsistenten Modell für Amplitude und Phase des Paarpotentials verglichen. Bei diesem Modell wird im Kontakt eine vollständig unterdrückte Amplitude des Paarpotentials angenommen, während diese außerhalb der Engstelle voll ausgebildet sein soll:

$$\Delta(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Delta_\infty(T) e^{-i\gamma/2}, & x \leq -l \\ 0, & |x| < l \\ \Delta_\infty(T) e^{+i\gamma/2}, & x \geq +l \end{cases} \quad (4.2)$$

Zur Berechnung von Strom-Phasen-Beziehungen mit diesem Supraleiter-Normalleiter-Supraleiter- bzw. S-N-S-Modell, muss die Stromdichte bei $x = 0$ auf dem Querschnitt der Engstelle berechnet und über diesen integriert werden. Da das Paarpotential in diesem Modell abschnittsweise konstant ist, besteht die Aufgabe darin, die Riccati-Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten Δ und ε_n zu lösen. Das Vorgehen zur allgemeinen analytischen Berechnung der Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ aus den Riccati-Differentialgleichungen im speziellen Fall konstanter Koeffizienten ist in Anhang D dargestellt.

Werden die Riccati-Amplituden für das S-N-S-Modell auf dem Querschnitt der Engstelle bei $x = 0$ gesucht, so liegt entlang jeder Trajektorie für $|x| \geq l$ ein konstantes Paarpotential vor, und ebenso für den gesamten Abschnitt innerhalb der Engstelle, also für $|x| < l$ (siehe Abb. 4.6). Deshalb müssen für jede Trajektorie drei Abschnitte stückweise konstanten Paarpotentials berücksichtigt werden: $x \leq -l$, $|x| < l$ und $x \geq l$.

Setzt man die allgemeinen Lösungen aus Anhang D für die vorliegende Situation ein, so resultieren bei $x = 0$ folgende Ausdrücke:

$$a_{L,R}(s=0) = \frac{\Delta_\infty(T) e^{\mp i\gamma/2}}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T)|^2}} \exp\left(-\frac{2|\varepsilon_n|}{\hbar v_F} \frac{l}{\cos \theta}\right) \quad (4.3)$$

$$b_{L,R}(s=0) = \frac{\Delta_\infty(T) e^{\pm i\gamma/2}}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T)|^2}} \exp\left(-\frac{2|\varepsilon_n|}{\hbar v_F} \frac{l}{\cos \theta}\right) \quad (4.4)$$

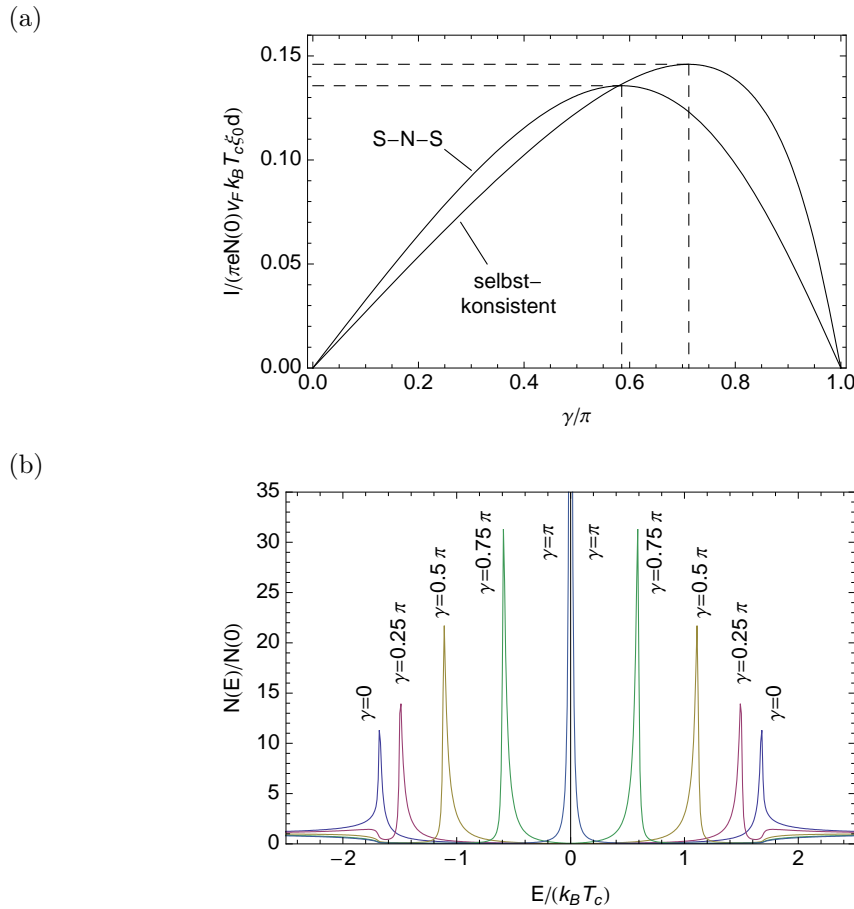


Abbildung 4.7: Strom-Phasen-Beziehung in (a) und lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0$, $y = 0$) in (b) für das nicht-selbstkonsistente S-N-S-Modell aus Gleichung (4.2). Die selbstkonsistent berechnete Strom-Phasen-Beziehung aus Abbildung 4.5(a) ist zum Vergleich in Teilabbildung (a) nochmals dargestellt. Es wurden die selben Parameter wie für die Abbildungen 4.4 und 4.5 verwendet.

Hierbei bezeichnen die Indizes L und R Lösungen aus den Bereichen $x < 0$ bzw. $x > 0$, die Amplitude des Paarpotentials im *bulk* ist mit $\Delta_\infty(T)$ bezeichnet und θ ist der bezüglich der x -Achse gemessene Winkel der Trajektorien. Die Reflexionen der Trajektorien in der Engstelle, die je nach Orientierungswinkel θ auftreten, beeinflussen die effektive Länge des Abschnittes der Trajektorie im Bereich $|x| < l$ nicht und müssen deshalb im Fall eines s -Wellen-Supraleiters nichts explizit berücksichtigt werden. Die ausgehend von der y -Achse gemessene halbe Länge der Engstelle l geht über das Argument der Exponentialfunktion in die Lösungen ein, während die Breite der Engstelle bei der Integration der Stromdichte über den Querschnitt der Engstelle ins Spiel kommt. Da die Lösungen (4.3) und (4.4) nicht von der Position auf der y -Achse abhängen, vereinfacht sich die Integration der Stromdichte über den Querschnitt zu einer Multiplikation mit der Breite $2w$.

Mit diesen Lösungen für die Riccati-Amplituden können die Komponenten des quasiklassischen Propagators analytisch angegeben und ausgewertet werden. Durch Auswertung der Stromgleichung für Phasendifferenzen $\gamma \in [0, \pi]$ kann die Strom-Phasen-Beziehung bestimmt werden. Ebenso kann die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle berechnet werden. Entsprechende Ergebnisse sind in Abbildung 4.7 dargestellt, wobei die verwendeten Parameter l , w und T identisch mit denen für die selbstkonsistenten Ergebnisse in den vorhergehenden Abbildungen 4.4 und 4.5 dieses Abschnittes sind.

Verwendet man das nicht-selbstkonsistente Modell für das Paarpotential, so geht man implizit davon aus, dass eine schwache Kopplung der beiden Elektroden vorliegt. Dies rechtfertigt die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials in der Engstelle und erlaubt eine stark lokalisierte Variation der Phase. Im Fall des nicht-selbstkonsistenten S-N-S-Modells geht die schwache Kopplung damit als Annahme in das Modell ein, während diese bei den selbstkonsistenten Rechnungen ohne weitere Annahmen als Ergebnis folgt.

Für das nicht-selbstkonsistente S-N-S-Modell resultiert eine wesentlich sinusförmigere Strom-Phasen-Beziehung, da für das Paarpotential bei $x = \pm l$ die *bulk*-Werte vorgegeben sind. Im Gegensatz dazu fällt in der selbstkonsistenten Lösung ein Teil der Phasendifferenz im breiteren Kanal ab und die effektive Phasendifferenz in der direkten Umgebung der Engstelle ist kleiner (siehe Abb. 4.4(b)).

Die Position der gebundenen Andreev-Zustände in der lokalen Zustandsdichte bei Verwendung des nicht-selbstkonsistenten S-N-S-Modells entsprechend Gleichung (4.2), dargestellt in Abbildung 4.7(b), spiegelt die Tatsache, dass die Strom-Phasen-Beziehung stärker sinusförmig ist, wider. Des Weiteren zeigen die gebundenen Zustände im Gegensatz zu den selbstkonsistenten Ergebnissen keine Substruktur.

Zum Abschluss dieses Abschnittes soll die Frage geklärt werden, welchen Einfluss die Breite W des Kanals sowie die Länge L des Abschnittes des Kanals haben, für den die Eilenberger-Gleichungen selbstkonsistent gelöst werden.

Für die Breite W des Kanals ist diese Frage direkt zu beantworten und bei allen Resultaten einfach kontrollierbar. Das Kriterium für eine ausreichende Breite W ist, dass diese wesentlich größer als die Breite der Engstelle w sein sollte, so dass die Stromdichte und damit die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials im Kanal (weit weg von der Engstelle) vernachlässigbar sind. Für die in diesem Abschnitt gewählten Parameter ist $W/(2w) = 10$. Folglich ist die Stromdichte aufgrund der Stromerhaltung in der Engstelle im Vergleich zum breiteren Kanal zehnfach überhöht und weit entfernt von der Engstelle entsprechend schwach (siehe Abb. 4.4(c)). Dies führt zu einer vernachlässigbar schwachen Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials am linken bzw. rechten Ende des Kanals (siehe Abb. 4.4(a)).

Die Länge L des Abschnittes des Kanals muss ausreichend groß gewählt sein, so dass die durch die Engstelle hervorgerufene Störung im Paarpotential innerhalb der Länge L abklingen kann. Da die charakteristische Längenskala für die Variation des Paarpotentials durch die Kohärenzlänge ξ_0 gegeben ist, reicht eine Länge L in der Größenordnung einiger ξ_0 aus. Anhand exemplarischer Rechnungen kann gesehen werden, dass die funktionale Form der Strom-Phasen-Beziehung von der Wahl der Länge L abhängt. In Abbildung 4.8 sind für verschiedene Werte von L die Strom-Phasen-Beziehungen in (a) sowie die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle in (b) für die in diesem Abschnitt verwendeten Parameter ($2l = 2w = 0.314\xi_0$, $T = 0.5T_c$) abgebildet. Mit zunehmender Länge L weicht die Strom-Phasen-Beziehung zunehmend von einer sinusförmigen Abhängigkeit ab. Auch die Eindeutigkeit bzw. Mehrdeutigkeit der Strom-Phasen-Beziehung ist nicht universell, sondern von der Wahl der Länge L abhängig. Der kritische Strom I_c , definiert als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung, ist jedoch ab einer gewissen Mindestlänge (hier $\simeq 6\xi_0$) unabhängig von L .

Dieses Verhalten entspricht vollständig der intuitiven Vorstellung, dass der kritische Strom eine charakteristische (unveränderliche) Eigenschaft des untersuchten Josephson-Kontaktes ist, während die Strom-Phasen-Beziehung von der Wahl der Punkte, zwischen denen die Phasendifferenz gemessen wird, abhängt. Bei einer sehr großen Länge L charakterisiert die Strom-Phasen-Beziehungen nicht allein den Josephson-Kontakt, sondern beinhaltet auch den Einfluss der langen Zuleitungen zum eigentlichen Kontakt. Diese limitieren zwar nicht den kritischen Strom der gesamten Anordnung, führen aber zu einer veränderten Form der Strom-Phasen-Beziehungen, da auch in den langen Zuleitungen ein endlicher Phasengradient vorliegt.

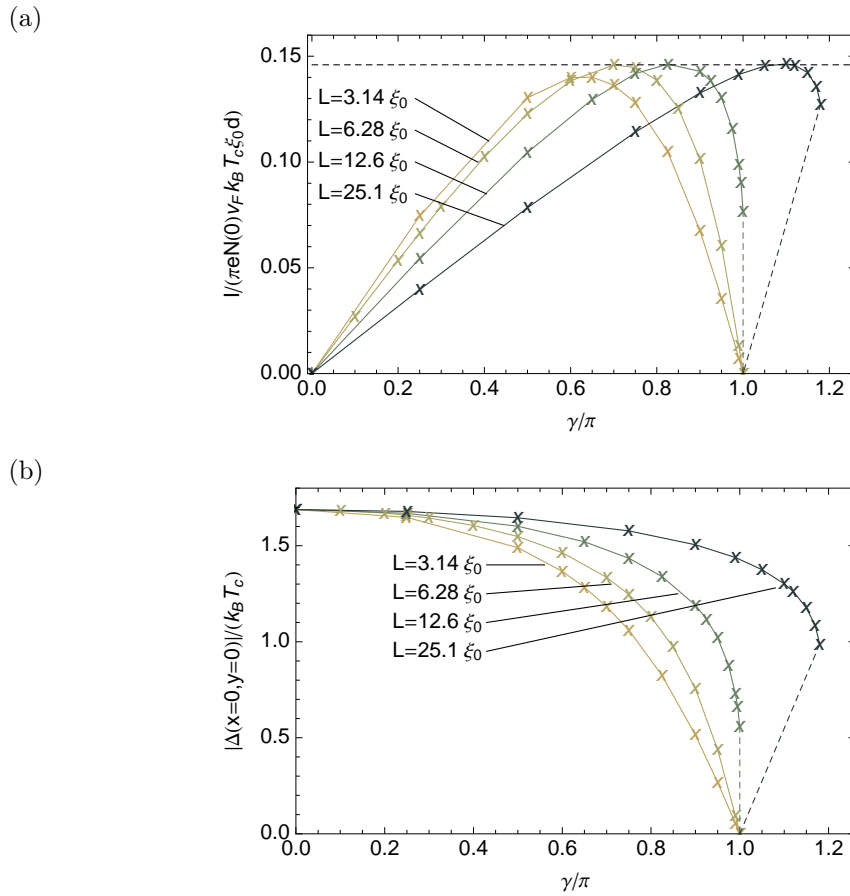


Abbildung 4.8: Für verschiedene Werte der Länge L ist die Strom-Phasen-Beziehung in (a) und die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle ($x = 0, y = 0$) in (b) dargestellt. Die übrigen Parameter werden hierzu entsprechend der zu Beginn dieses Abschnittes genannten Werte festgehalten ($2l = 2w = 0.314 \xi_0, T = 0.5 T_c, B_0 = 0, \kappa = \infty$). Die tatsächlich berechneten Punkte sind durch die durchgezogenen Linien verbunden; die gestrichelten Linien deuten die instabilen Äste an.

Bei dem S-N-S-Modell (4.2) wird das Paarpotential per Annahme bei $x = \pm l$ auf die *bulk*-Werte fixiert. Damit kann dieses Modell als der Grenzfall minimaler Länge L mit $L = 2l$ betrachtet werden. Für dieses Modell folgen immer eindeutige Strom-Phasen-Beziehungen, während im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen mehrdeutige Strom-Phasen-Beziehungen möglich sind. In Kapitel 6 wird eine spezielle Engstellen-Geometrie eines d -Wellen-Supraleiters betrachtet. Für diese werden die Ergebnisse selbstkonsistenter Rechnungen im Detail mit den Ergebnissen eines nicht-selbstkonsistenten Stufenmodells verglichen und es wird genauer auf die Eindeutigkeit bzw. Mehrdeutigkeit der Strom-Phasen-Beziehungen eingegangen.

4.2 Temperaturabhängigkeit

In diesem Abschnitt wird die Temperaturabhängigkeit des Josephson-Effektes an einem Engstellen-Kontakt untersucht. Dazu werden für drei verschiedene Abmessungen der Engstelle die Strom-Phasen-Beziehungen sowie die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle betrachtet. Aus den Strom-Phasen-Beziehungen werden weiterhin die kritischen Ströme für die drei Geometrien extrahiert. Für eine der drei Abmessungen wird zusätzlich die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle gezeigt. Magnetfelder werden dabei nicht betrachtet ($B_0 = 0$, $\kappa = \infty$).

Die Strom-Phasen-Beziehungen sowie die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle sind in den Abbildungen 4.9 und 4.10 für Temperaturen zwischen $T = 0.1 T_c$ und $0.9 T_c$ dargestellt. Bei Temperaturen nahe der Sprungtemperatur T_c sind die Strom-Phasen-Beziehungen für alle Abmessungen nahezu sinusförmig. Je tiefer die Temperatur, desto größer sind die Abweichungen von der einfachsten Form $I = I_c \sin(\gamma)$. Wie bereits bemerkt, liefert die verwendete iterative Methode zur Lösung der Eilenberger-Gleichungen nur stabile Lösungen. Die instabilen Äste der Strom-Phasen-Beziehungen sowie der entsprechenden Variation der Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle sind in den Abbildungen 4.9 und 4.10 durch die gestrichelten Linien angedeutet.

Unterhalb einer bestimmten Temperatur und ab einer bestimmten Ausdehnung der Engstelle werden die Strom-Phasen-Beziehungen mehrdeutig. Für die Abmessungen $2l = 2w = 0.314 \xi$, für die die Strom-Phasen-Beziehungen in Abbildung 4.9(b) dargestellt sind, ist dies für den verwendeten Wert von $L = 6.28 \xi_0$ beispielsweise unterhalb von $T \simeq 0.3 T_c$ der Fall. Eine mehrdeutige Strom-Phasen-Beziehung impliziert unter Umständen, dass die Ströme für Phasendifferenzen von $\gamma > \pi$ weiter ansteigen. Dieser Übergang zu mehrdeutigen Strom-Phasen-Beziehungen und einem längeren Bereich von Phasendifferenzen, für den die Ströme näherungsweise linear ansteigen, ist charakteristisch für den Übergang vom Josephson-Effekt zum Stromfluss in einem ausgedehnten Supraleiter.

In Abbildung 4.11 ist die kritische Stromdichte, definiert als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung dividiert durch die Breite der Engstelle, für die drei betrachteten Abmessungen in Abhängigkeit der Temperatur T dargestellt. Die Abbildung stellt dabei die Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen denen des S-N-S-Modells (4.2) gegenüber. Zum Vergleich ist zusätzlich das Resultat für einen Tunnelkontakt nach Ambegaokar und Baratoff (aus Abschnitt 2.3.1) sowie das Resultat von Kulik und Omelyanchouk für eine Mikrobrücke im sauberen Grenzfall (aus Abschnitt 2.3.3) dargestellt.

Im Rahmen der selbstkonsistenten Lösungen der Eilenberger-Gleichungen ebenso wie im Rahmen des S-N-S-Modells wird das Resultat von Kulik und Omelyanchouk im Grenzfall einer verschwindenden Ausdehnung der Engstelle ($l, w \rightarrow 0$) reproduziert. Nahe der kritischen Temperatur folgt in diesem Grenzfall die lineare Abhängigkeit des kritischen Stromes von der Temperatur, die sowohl das Resultat von Kulik und Omelyanchouk als auch das Resultat von Ambegaokar und Baratoff aufweisen.

Betrachtet man die kritischen Stromdichten, so verringern diese sich mit zunehmender Ausdehnung der Engstelle. Dies ist verständlich, da bei einer zunehmenden Ausdehnung der Engstelle die Amplitude des Paarpotentials in einem räumlich ausgedehnteren Bereich unterdrückt wird und somit nur noch schwächere Ströme fließen können. Für endliche Ausdehnungen der Engstelle weicht das Verhalten des kritischen Stromes nahe der Sprungtemperatur T_c vom linearen Verhalten ab und wird mit zunehmender Ausdehnung der Engstelle zunehmend positiv gekrümmt. Dieses Verhalten bei Berücksichtigung der endlichen Ausdehnung der Engstelle ist sowohl in den selbstkonsistent berechneten Ergebnissen als auch in den Resultaten des S-N-S-Modells enthalten. Im Rahmen des S-N-S-Modells fällt die kritische Stromdichte mit zunehmender Ausdehnung der Engstelle allerdings stärker ab, da eine vollständige Unterdrückung des Paarpotentials in der Engstelle angenommen wird. Dennoch approximiert das S-N-S-Modell die selbstkonsistent berechneten Ergebnisse auch quantitativ

in sehr guter Näherung, insbesondere im Fall einer kurzen Mikrobrücke².

Der Grenzfall $l, w \rightarrow 0$ wird oft als Punktkontakt bezeichnet. Für diesen Grenzfall können die Eilenberger-Gleichungen mit der Riccati-Parametrisierung analytisch gelöst und das Resultat von Kulik und Omelyanchouk einfach abgeleitet werden. Dazu geht man von zwei supraleitenden Halbräumen aus, die in einem Punkt verbunden sein sollen. Dieses Modell ist in dem bereits verwendeten S-N-S-Modell (4.2) als Grenzfall $l, w \rightarrow 0$ enthalten.

Bezeichnet man den linken bzw. rechten Halbraum mit den Indizes L und R , dann vereinfacht sich das S-N-S-Modell (4.2) im Grenzfall $l, w \rightarrow 0$ zu

$$\Delta_{L,R} = \Delta_\infty(T) e^{\mp i\gamma/2} \quad (4.5)$$

Für die Riccati-Amplituden folgt damit:

$$a_{L,R}(s=0) = \frac{\Delta_\infty(T) e^{\mp i\gamma/2}}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T)|^2}} \quad (4.6)$$

$$b_{L,R}(s=0) = \frac{\Delta_\infty(T) e^{\pm i\gamma/2}}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T)|^2}} \quad (4.7)$$

Berechnet man mit diesen Ausdrücken die Komponente des quasiklassischen Propagators $g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$ nach Gleichung (3.14) und setzt diese in die Stromgleichung (3.9) ein, so folgt das Ergebnis für die Strom-Phasen-Beziehung von Kulik und Omelyanchouk, Gleichung (2.25) bzw. Abbildung 2.4. Das Maximum der Strom-Phasen-Beziehung liefert den kritischen Strom, der in Abbildung 2.4 und in Abbildung 4.11 dargestellt und mit Kulik-Omelyanchouk (KO) bezeichnet ist.

Die Ergebnisse für den kritischen Strom in Abhängigkeit der Temperatur lassen sich mit den Messungen an Niob-SQUID-Strukturen von S. K. H. Lam *et al.* [19] vergleichen, die in Abbildung 2.1 wiedergegeben wurden. Die von Lam *et al.* hergestellten Mikrobrücken weisen effektive Breiten von etwa 40 – 170 nm auf, was für Niob etwa 1 – 4 ξ_0 entspricht (mit $\xi_0 \simeq 40$ nm nach [98]). Diese Breiten fallen in den Bereich der für die Abbildungen 4.9, 4.10 und 4.11 verwendeten Parameter. Die gemessene Temperaturabhängigkeit (Abb. 2.1) entspricht in sehr guter Näherung den theoretischen Ergebnissen dieser Arbeit (Abb. 4.11). Um die Werte der kritischen Ströme zu vergleichen, können die in dieser Arbeit verwendeten Einheiten für den Gesamtstrom, die in Abschnitt 3.6.6 angegeben wurden, umgeschrieben werden:

$$\pi e N(0) v_F k_B T_c \xi_0 d = \left(\frac{1}{\lambda_L} \right)^2 \frac{\Phi_0}{\mu_0} \frac{1}{\pi} \left(\frac{k_B T_c}{\Delta_0} \right) d$$

Setzt man typische Werte für Niob ein ($\xi_0 \simeq 40$ nm, $\lambda_L \simeq 38$ nm nach [98] und $\Delta_0 \simeq 1.764 k_B T_c$) sowie die Filmdicke der Strukturen von Lam *et al.* ($d \simeq 20$ nm, damit $\lambda_{L,\text{eff}} \simeq \lambda_L^2/d \simeq 72$ nm nach [65]), so folgt $\pi e N(0) v_F k_B T_c \xi_0 d \simeq 360 \mu\text{A}$. Die effektive Breite der beiden Mikrobrücken aus Abbildung 2.1(c) und (d) beträgt etwa 80 nm bzw. 50 nm.³ Dies entspricht etwa 2 ξ_0 bzw. 1.25 ξ_0 und somit können näherungsweise die Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 4.9(c) zum Vergleich herangezogen werden. Bei $T = 0.1 T_c$ folgt mit dem angegebenen Zahlenwert für die Einheiten ein kritischer Strom von etwa 400 μA . Dieser Wert ergibt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen für den kritischen Strom der Strukturen aus Abbildung 2.1, der für die zwei von Lam *et al.* charakterisierten Mikrobrücken bei etwa 950 μA bzw. 400 μA lag⁴.

²Wie bereits erwähnt, geht die Breite der Mikrobrücke im Rahmen des S-N-S-Modells nur multiplikativ bei der Integration des Stromes über den Querschnitt ein.

³In den Abbildungen 2.1(a), (c) und (d) ist die Gold-Deckschicht zu sehen; die darunterliegende Niob-Schicht ist auf beiden Seiten etwa 15 nm unterätzt.

⁴Bei diesem Vergleich ist zu beachten, dass im Fall von Niob eigentlich keine zylindrische Fermi-Fläche vorliegt; für die mit $d \simeq 20$ nm sehr dünnen Filme ist die Verwendung einer effektiv zylindrischen Fermi-Fläche allerdings gerechtfertigt.

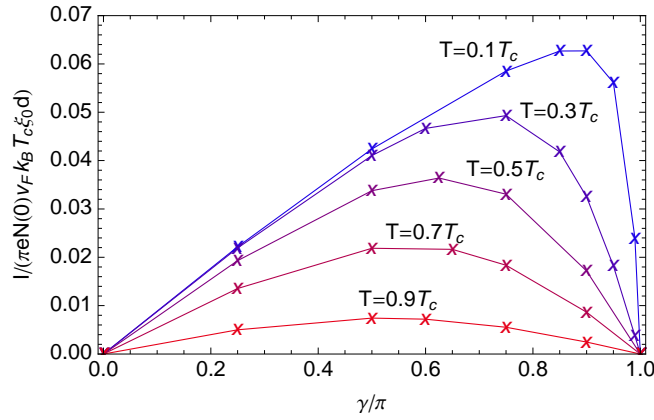
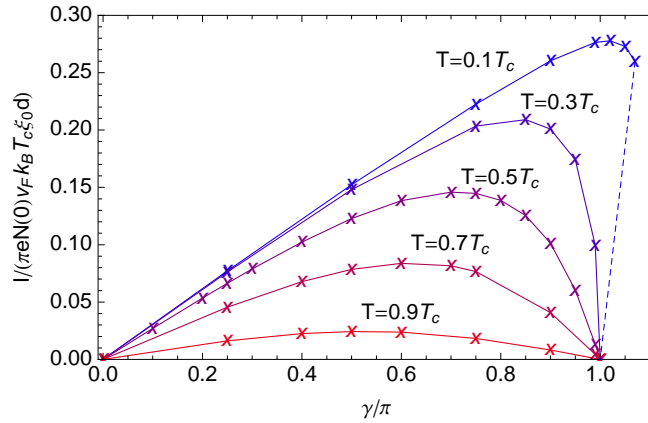
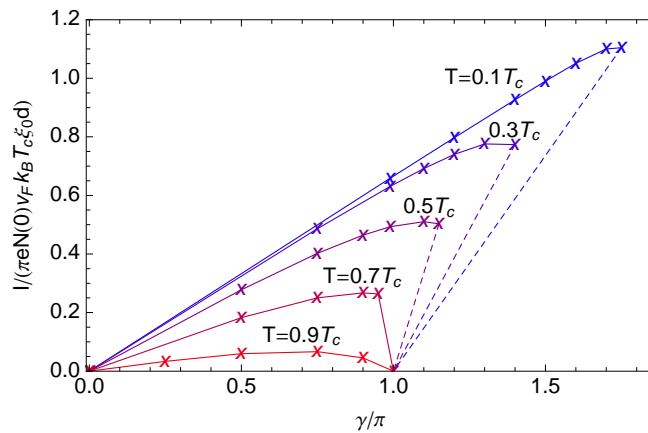
(a) $2l = 2w = 0.0628 \xi_0$ (b) $2l = 2w = 0.314 \xi_0$ (c) $2l = 2w = 1.57 \xi_0$ 

Abbildung 4.9: Strom-Phasen-Beziehungen für drei verschiedene Ausdehnungen der Engstelle: $l = w = 0.0628 \xi_0$ in (a), $l = w = 0.314 \xi_0$ in (b) sowie $l = w = 1.57 \xi_0$ in (c). Es sind jeweils die Temperaturen $T = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 T_c$ dargestellt. Die berechneten Punkte sind durch die durchgezogenen Linien verbunden; die gestrichelten Linien deuten die instabilen Äste an. Für (a) und (b) wurden $L = 6.28 \xi_0$ und $W = 3.14 \xi_0$ verwendet, für (c) $L = 12.6 \xi_0$ und $W = 6.28 \xi_0$.

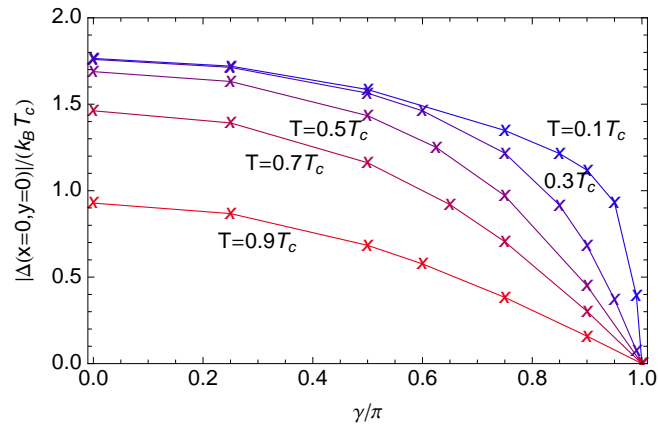
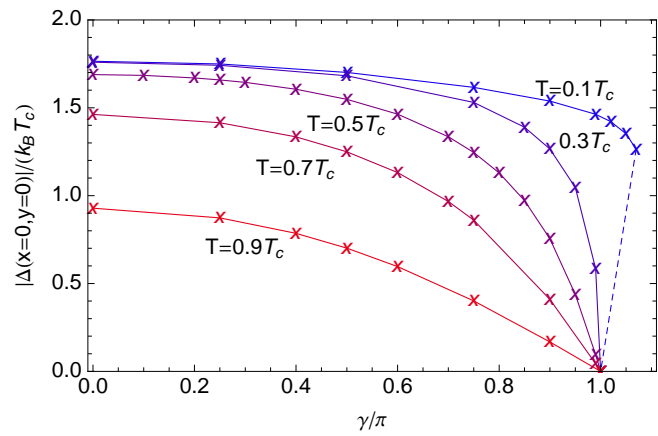
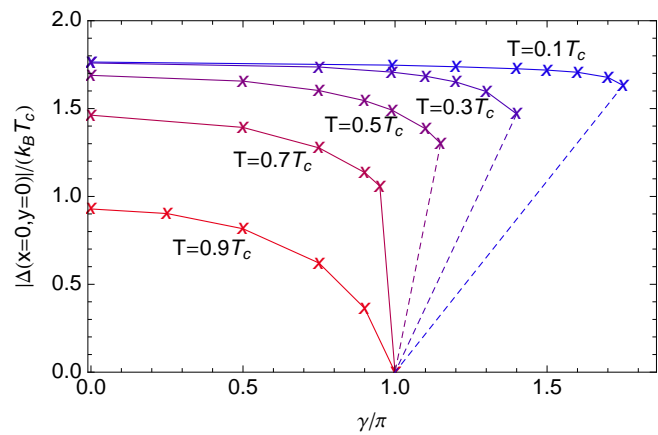
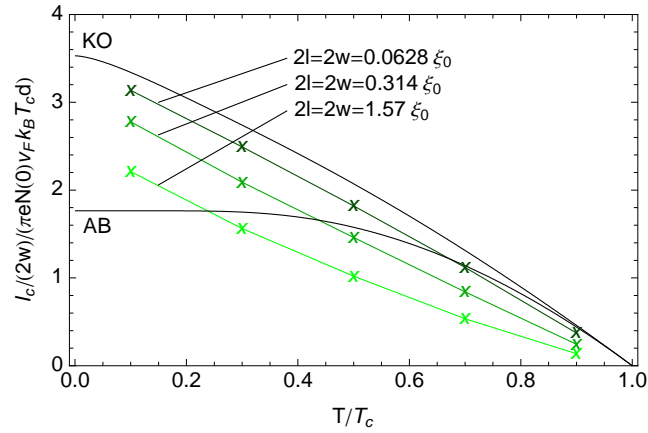
(a) $2l = 2w = 0.0628 \xi_0$ (b) $2l = 2w = 0.314 \xi_0$ (c) $2l = 2w = 1.57 \xi_0$ 

Abbildung 4.10: Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle für drei verschiedene Ausdehnungen der Engstelle bei verschiedenen Temperaturen. Darstellung und sonstige Parameter entsprechend Abbildung 4.9.

(a) selbstkonsistente Ergebnisse



(b) S-N-S-Modell

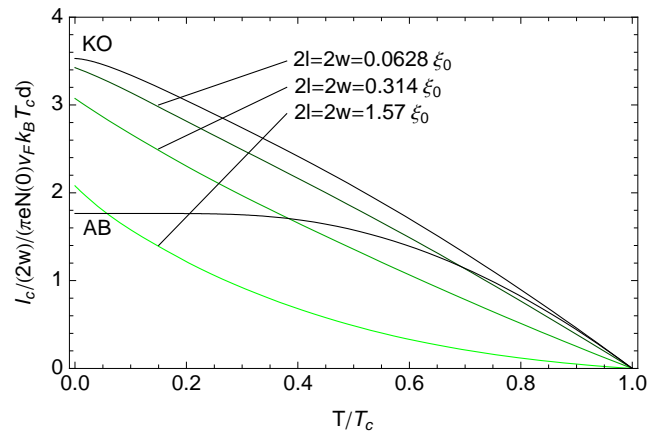


Abbildung 4.11: Kritische Stromdichte in Abhängigkeit der Temperatur T für die drei Abmessungen aus den Abbildungen 4.9 und 4.10, in (a) aus den selbstkonsistenten Rechnungen sowie in (b) im Rahmen des S-N-S-Modells (4.2). Zum Vergleich sind die Ergebnisse nach Ambegaokar und Baratoff für einen Tunnelkontakt (markiert mit AB, aus Abschnitt 2.3.1) sowie für eine Mikrobrücke im sauberen Grenzfall nach Kulik und Omelyanchouk (KO, aus Abschnitt 2.3.3) dargestellt.

In Abbildung 4.12 ist die lokale Zustandsdichte für die Abmessungen $2l = 2w = 0.314\xi$ für die Temperaturen $T = 0.1 T_c$, $0.5 T_c$ sowie $0.9 T_c$ dargestellt. Mit zunehmender Phasendifferenz und damit zunehmenden Transportströmen über die Engstelle entstehen ausgeprägte gebundene Andreev-Zustände, deren Energie mit zunehmender Phasendifferenz abnimmt. Bei den Temperaturen $T = 0.9 T_c$ und $0.5 T_c$ befindet sich der gebundene Andreev-Zustand für die Phasendifferenz $\gamma = \pi$ bei der Temperatur $E_{BS} = 0$, was den eindeutigen Strom-Phasen-Beziehungen entspricht. Bei der tiefsten betrachteten Temperatur ($T = 0.1 T_c$) liegt der gebundene Andreev-Zustand auf dem stabilen Ast auch bei $\gamma = \pi$ noch bei einer endlichen Energie; hier spiegelt sich die Mehrdeutigkeit der entsprechenden Strom-Phasen-Beziehung wider.

Nahe der kritischen Temperatur folgt die Energie der gebundenen Zustände in sehr guter Näherung der Abhängigkeit $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ (siehe Abb. 4.12(c), rechts). Bei tieferen Temperaturen treten deutliche Abweichungen von diesem Verhalten auf, die die Mehrdeutigkeit der Strom-Phasen-Beziehung widerspiegeln (siehe Abb. 4.12(a) und (b), rechts).

Vor allem bei tiefen Temperaturen weisen die gebundenen Andreev-Zustände zusätzliche Strukturen bei Energien oberhalb des Hauptmaximums auf. Diese resultieren aus Mehrfachreflexionen der Quasiteilchen in der Engstelle. Betrachtet man das Zentrum der Engstelle und misst den Winkel der Trajektorien θ bezüglich der x -Achse der Geometrie, so tritt eine zusätzliche Reflexion der Trajektorien in der Engstelle jeweils bei den Winkeln θ_n mit

$$\tan(\theta_n) = (2n + 1) \frac{w}{l}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.8)$$

auf. Die Intervalle zwischen den Winkeln θ_n entsprechen jeweils einem lokalen Maximum des gebundenen Zustandes. Mit jeder zusätzlichen Reflexion fällt die Phasendifferenz sprunghaft über einem längeren Weg ab und der effektive Phasengradient entlang der Trajektorie wird folglich sprunghaft kleiner. Daraus resultiert ein Beitrag zur lokalen Zustandsdichte bei einer größeren Energie, weshalb die Nebenmaxima der gebundenen Zustände alle bei Energien oberhalb der Energie des Hauptmaximums liegen.

Im Fall des S-N-S-Modells weisen die gebundenen Andreev-Zustände keine weitere Struktur auf (siehe Abb. 4.7(b)). Dies resultiert direkt aus dem S-N-S-Modell für das Paarpotential, Gleichung (4.2). In diesem Modell spielen Mehrfachreflexionen innerhalb der Engstelle keine Rolle, da die Phasendifferenz lokalisiert am linken bzw. rechten Ende der Engstelle abfällt. Eine wachsende Anzahl an Mehrfachreflexionen führt damit nicht zu einem sprunghaft veränderten effektiven Phasengradienten entlang der Trajektorie und es ergibt sich im Mittel ein einziges ausgeprägtes lokales Maximum in der Zustandsdichte.

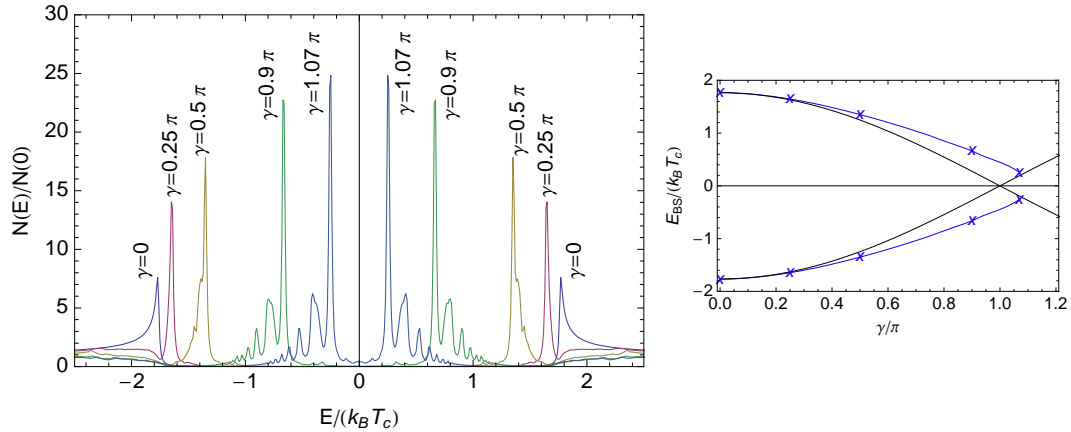
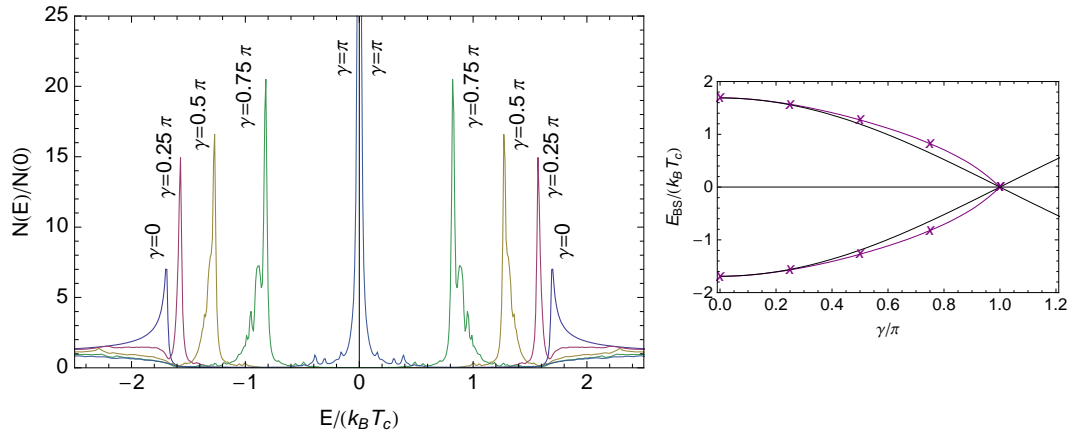
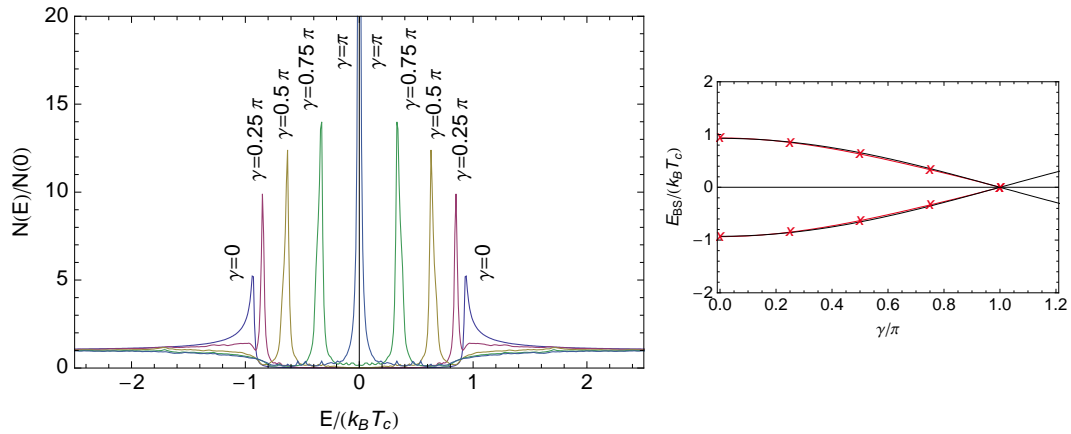
(a) $T = 0.1 T_c$ (b) $T = 0.5 T_c$ (c) $T = 0.9 T_c$ 

Abbildung 4.12: Lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0, y = 0$) bei verschiedenen Werten der Phasendifferenz γ für die Abmessungen $2l = 2w = 0.314 \xi_0$; in (a) ist die Temperatur $T = 0.1 T_c$, in (b) $T = 0.5 T_c$ sowie $T = 0.9 T_c$ in (c). In den Abbildungen rechts der Zustandsdichten ist die Energie der gebundenen Zustände E_{BS} bei der jeweiligen Temperatur (farbige Linien) sowie zum Vergleich die Abhängigkeit $E_{BS} = \pm \Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ (schwarze Kurven) abgebildet; die Punkte zu den Abbildungen links sind durch die Markierung (x) hervorgehoben.

4.3 Einfluss geometrischer Parameter

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der geometrischen Parameter der Mikrobrücke auf den Josephson-Effekt untersucht. Dazu werden die Länge der Engstelle $2l$ sowie ihre Breite $2w$ entsprechend Abbildung 4.1 bei einer festen Temperatur von $T = 0.5 T_c$ unabhängig variiert. Magnetfelder werden dabei nicht betrachtet ($B_0 = 0$, $\kappa = \infty$).

In Abbildung 4.13(a) und (b) sind Strom-Phasen-Beziehungen sowie die entsprechenden Amplituden des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle für verschiedene Werte der Länge der Engstelle $2l$ dargestellt. Der kritische Strom, der als das Maximum der Strom-Phasen-Beziehungen folgt, ist in Teilabbildung (c) abgebildet.

Mit zunehmender Länge der Engstelle wird die Kopplung der beiden Elektroden schwächer und die Amplitude des Paarpotentials wird auf einer längeren Strecke unterdrückt. Dadurch fließen schwächere Ströme über den Kontakt und der kritische Strom nimmt mit zunehmender Länge der Engstelle ab. Mit zunehmender Länge der Engstelle nimmt gleichzeitig die Relevanz der Selbstkonsistenz zu. Nur eine selbstkonsistente Lösung kann die in einem zunehmenden Bereich mehrdeutigen Strom-Phasen-Beziehungen und damit den richtigen kritischen Strom liefern.

Für sehr große Längen $l \rightarrow \infty$ wird die Amplitude des Paarpotentials in der Mikrobrücke unabhängig von den Elektroden und konstant, ebenso wie der Gradient der Phase. In diesem speziellen Fall liegt in der Mikrobrücke ein homogener Stromfluss und eine homogene Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials vor. Folglich kann die in Abschnitt 3.8 beschriebene Doppler-Shift-Methode verwendet werden, um den kritischen Strom im Grenzfall $l \rightarrow \infty$ zu berechnen. Dieses asymptotische Ergebnis ist für die verwendete Temperatur von $T = 0.5 T_c$ in Abbildung 4.13(c) eingezeichnet.

Abbildung 4.13(c) zeigt, dass bei einer sehr kurzen Mikrobrücke aufgrund des Anschlusses an die ausgedehnten Elektroden, in denen nahezu keine Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials auftritt, ein erhöhter Strom fließen kann. In diesem Fall ist der kritische Strom gegenüber der einfachen Abschätzung für den kritischen Strom einer Mikrobrücke, die der kritischen Stromdichte im *bulk* multipliziert mit der Querschnittsfläche entspricht, mehr als zweifach überhöht. Im Fall einer sehr langen Mikrobrücke wird diese einfache Abschätzung aber aufgrund der mit der Länge der Mikrobrücke zunehmenden Unabhängigkeit von den Elektroden asymptotisch korrekt.

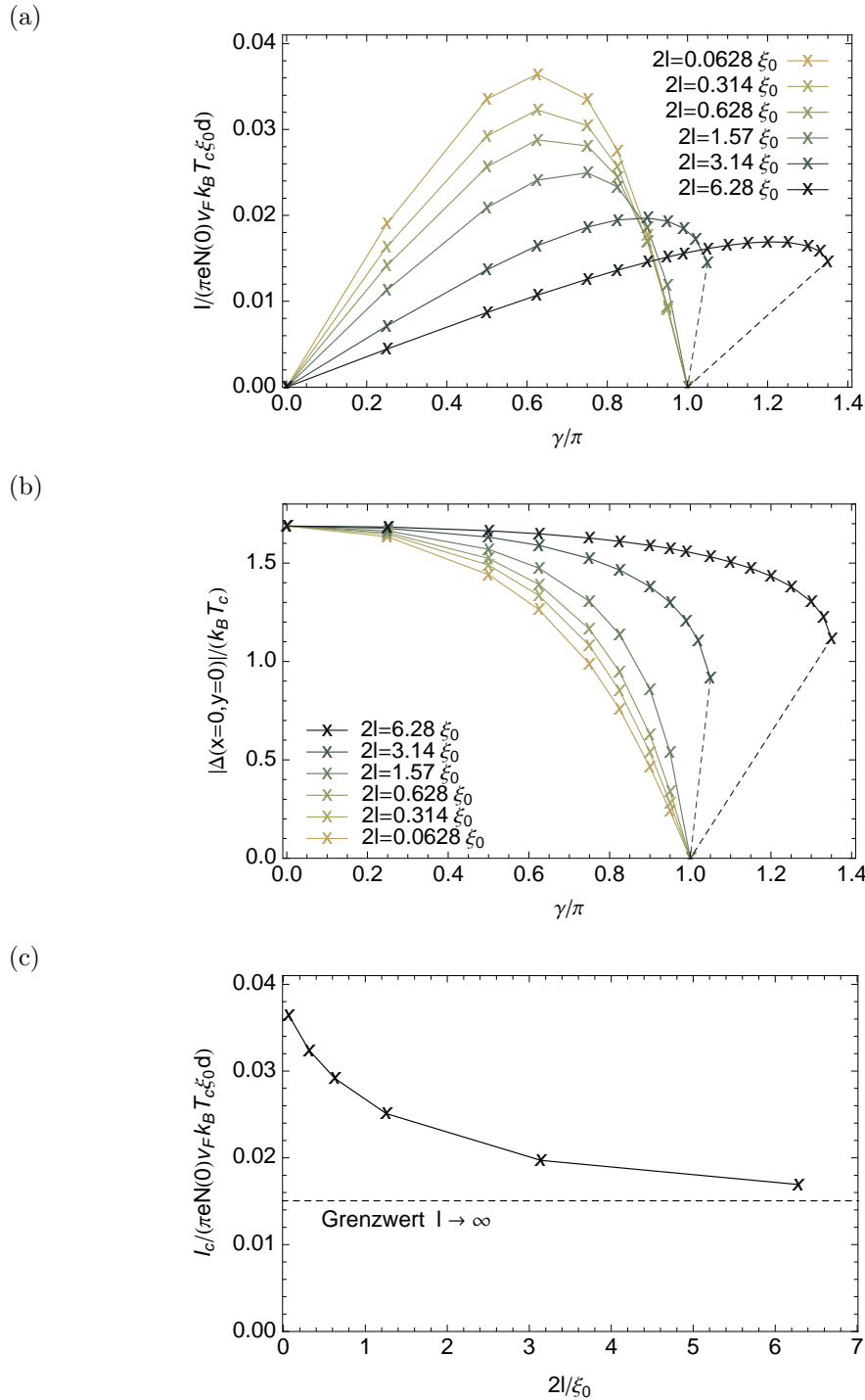


Abbildung 4.13: Strom-Phasen-Beziehung (a) und Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle (b) für verschiedene Werte der Länge der Engstelle $2l$ bei festem $w = 0.0314 \xi_0$. In (c) ist der kritische Strom als Funktion der Länge der Engstelle $2l$ dargestellt. Länge und Breite des Abschnittes des Kanals, für den die Rechnungen durchgeführt wurden, sind mit $L = 12.6 \xi_0$ sowie $W = 6.28 \xi_0$ gewählt.

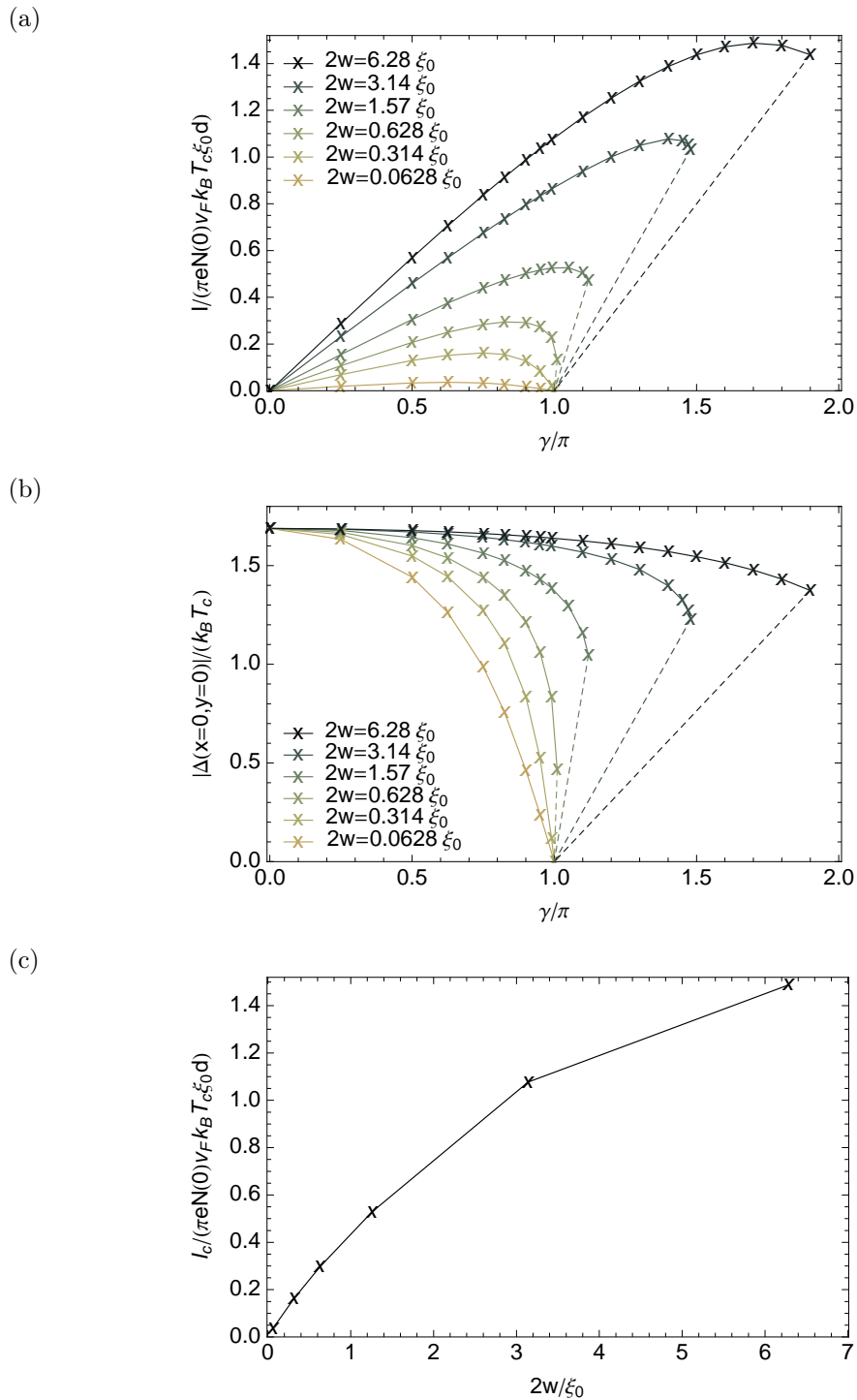


Abbildung 4.14: Strom-Phasen-Beziehung (a) und Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle (b) für verschiedene Werte der Breite der Engstelle $2w$ bei festem $l = 0.0314 \xi_0$. In (c) ist der kritische Strom als Funktion der Breite der Engstelle $2w$ dargestellt. Länge und Breite des Abschnittes des Kanals, für den die Rechnungen durchgeführt wurden, sind mit $L = 12.6 \xi_0$ sowie $W = 6.28 \xi_0$ gewählt.

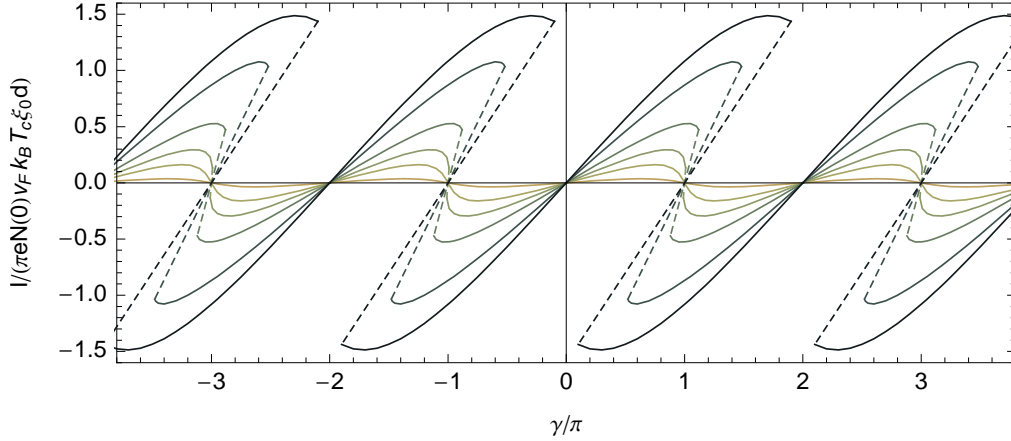


Abbildung 4.15: Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 4.14(a), wobei zur Veranschaulichung mehrere Perioden der Kurven dargestellt sind. Durchgezogene Linien zeigen die stabilen, gestrichelte Linien die instabilen Äste. Farben entsprechend Abbildung 4.14(a).

Die Grenzfälle einer sehr kurzen bzw. einer sehr langen Mikrobrücke wurden von Kulik und Omelyanchouk mit Ginzburg-Landau-Theorie untersucht [99]. Später wurden von Zareyan *et al.* mit mikroskopischer Theorie Ausdrücke für den kritischen Strom in Abhängigkeit der Länge der Mikrobrücke für Temperaturen nahe T_c abgeleitet [36]. Diese wurden in Abschnitt 2.3.4 dargestellt und enthalten die Ergebnisse von Kulik und Omelyanchouk. Die numerisch selbstkonsistent berechneten Ergebnisse aus Abbildung 4.13 sind konsistent mit den Ergebnissen von Kulik und Omelyanchouk sowie Zareyan *et al.*. Ausgehend von einem endlichen Wert fällt der kritische Strom zunächst linear, für große Längen mit $1/l$ ab und nähert sich einem konstanten Grenzwert für $l \rightarrow \infty$. Die Methode der vorliegenden Arbeit ist in ihrer Gültigkeit jedoch nicht auf Temperaturen nahe T_c beschränkt.

In Abbildung 4.14 sind die Strom-Phasen-Beziehungen und die entsprechenden Werte der Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle sowie die kritischen Ströme für verschiedene Werte der Breite der Engstelle $2w$ dargestellt. Die Breite der Engstelle beeinflusst den Josephson-Effekt erwartungsgemäß stark. Bei einer sehr schmalen Engstelle ist die Kopplung der beiden Elektroden sehr schwach und die Strom-Phasen-Beziehung ist in guter Näherung sinusförmig. Mit zunehmender Breite der Engstelle wird die Kopplung der Elektroden stärker und die Strom-Phasen-Beziehungen werden in einem wachsenden Bereich mehrdeutig.

Da die Breite des Kanals, in den die Engstelle eingebettet ist, für die gezeigten Daten mit $W = 6.28 \xi_0$ gewählt ist, ist für die Kurve mit der größten Breite $2w$ in Abbildung 4.14 keine Einengung des Kanals mehr vorhanden ($W = 2w$). Damit zeigt diese Abbildung gleichzeitig den Übergang vom Josephson-Effekt an einer Engstelle zum Stromfluss in einem Supraleiter mit konstantem Querschnitt. Für kleine Breiten der Engstelle $2w$ ist die Kopplung der Elektroden schwach und die Strom-Phasen-Beziehungen sind näherungsweise sinusförmig. Im Fall eines Supraleiters mit konstantem Querschnitt ist die Strom-Phasen-Beziehung hingegen mehrdeutig und hat mehrere stabile Äste. Zur Veranschaulichung des Übergangs vom Josephson-Effekt an einer Engstelle zum Stromfluss in einem Supraleiter mit konstantem Querschnitt sind die Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 4.14(a) in Abbildung 4.15 für mehrere Perioden dargestellt.

4.4 Abschirmungseffekte

In diesem Abschnitt wird der Einfluss des Parameters $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ auf den Josephson-Effekt an einer Engstelle untersucht⁵. Dazu werden in diesem Abschnitt Ergebnisse unter Berücksichtigung von Magnetfeldern präsentiert, wobei es sich um die Magnetfelder handelt, die von den in der Struktur fließenden Strömen hervorgerufen werden.

In den vorangehenden Abschnitten wurden die Magnetfelder, die durch die Ströme hervorgerufen werden, vernachlässigt. Wie in Abschnitt 3.6.6 bereits erwähnt, entspricht dies dem Grenzfall $\kappa = \infty$. Da die lateralen Abmessungen der betrachteten Strukturen in der Größenordnung einiger Kohärenzlängen liegen, sind keine wesentlichen Änderungen zu erwarten, solange $\kappa \gtrsim 1$. Für kleinere Werte von κ ist jedoch mit einer drastischen Veränderung der Stromverteilungen und der resultierenden Magnetfelder zu rechnen.

In Abbildung 4.16 ist die Stromdichte in der Umgebung der Engstelle beim kritischen Strom für $\kappa = 1$ sowie $\kappa = 0.1$ dargestellt. Für die Berechnung dieser Konfigurationen ist, wie für den gesamten Abschnitt, $T = 0.5 T_c$ sowie $2l = 2w = 0.314 \xi_0$ gewählt. In Abbildung 4.16(a) mit $\kappa = 1$ ist die Stromdichte über den Querschnitt des Kanals nahezu konstant. In der Engstelle wird der Strom jedoch stark konzentriert. Für $\kappa = 0.1$, dargestellt in Abbildung 4.16(b), fließen die Ströme konzentriert an den Oberflächen der Probe und die Stromverteilung im Kanal, in einiger Entfernung der Engstelle, ist vollständig verändert. Da die Eindringtiefe $\lambda_L = \kappa \xi_0$ jedoch näherungsweise der halben Breite der Engstelle entspricht, ist die Stromverteilung in der Engstelle nahezu unverändert und nach wie vor homogen.

Die entsprechenden Magnetfeldverteilungen der Stromverteilungen aus Abbildung 4.16 sind in Abbildung 4.17 dargestellt. Die starke Konzentration der Ströme an den Oberflächen der Probe für $\kappa = 0.1$ führt zu einem verringerten Eindringen der Magnetfelder in das Innere der Probe. Folglich entspricht die Konzentration der Ströme an den Oberflächen der Abschirmung der Felder, die durch die Ströme selbst hervorgerufen werden. In der direkten Umgebung der Engstelle, wo die Stromverteilung für $\kappa = 0.1$ gegenüber größeren Werten für κ nahezu unverändert ist, ist auch die Magnetfeldverteilung unverändert. Es ist also zu erwarten, dass der Josephson-Effekt an einem Engstellen-Kontakt unverändert bleibt, so lange die Eindringtiefe größer als die Abmessungen der Engstelle ist ($\lambda_L \gtrsim l, w$).

Die in Abbildung 4.18 dargestellten Strom-Phasen-Beziehungen für $\kappa = \infty, 1, 0.1$ bestätigen die Vermutung, dass der Josephson-Kontakt unbeeinflusst bleibt, solange die Eindringtiefe nicht wesentlich kleiner als die Abmessungen der Engstelle ist. Die Strom-Phasen-Beziehung ist für $\kappa = 0.1$ gegenüber dem Grenzfall für große Werte von κ nahezu unverändert, ebenso wie das Verhalten der Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle.

In Abbildung 4.19 ist die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle für die in diesem Abschnitt verwendeten Parameter ($T = 0.5 T_c$, $2l = 2w = 0.314 \xi_0$) für $\kappa = 1$ und $\kappa = 0.1$ für verschiedene Werte der eichinvarianten Phasendifferenz γ dargestellt. Die inhomogenen Stromverteilungen, die mit inhomogenen Verteilungen der Phase des Paarpotentials und des Vektorpotentials verknüpft sind, spiegeln sich in einer Aufspaltung der gebundenen Zustände für kleine Werte von κ wider. Anhand des gebundenen Zustandes für den Fall $\kappa = 0.1$ und $\gamma = 0.74 \pi$ wird diese Aufspaltung exemplarisch diskutiert (siehe die Bezeichnungen 1 und 2 der lokalen Maxima des gebundenen Zustandes für $\gamma = 0.74 \pi$ in Abbildung 4.19(b)).

Um zu verstehen, wie die Aufspaltung zustande kommt, kann die lokale Zustandsdichte winkelaufgelöst betrachtet werden. Es zeigt sich, dass der mit 1 bezeichnete Anteil von Trajektorien herrührt, die parallel zur x -Achse orientiert sind und damit einem Bereich mit schwacher Stromdichte entstammen. Der mit 2 bezeichnete Anteil hingegen wird von Trajektorien hervorgerufen, die in den unteren ($y < 0$) sowie oberen ($y > 0$) Bereich des Kanals reflektiert werden, also in Bereiche mit stärkerer Stromdichte. Damit führt die Konzentration der Ströme an den Oberflächen der Geometrie zu einer Aufspaltung der gebundenen Andreev-Zustände in der Engstelle, ohne die Strom-Phasen-Beziehung wesentlich zu modifizieren.

⁵Wie in Abschnitt 3.6.6 diskutiert, ist das temperaturunabhängige Verhältnis $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ proportional zum Ginzburg-Landau-Parameter $\kappa_{GL}(T) = \lambda_{\text{eff}}(T)/\xi(T)$ bei $T = T_c$.

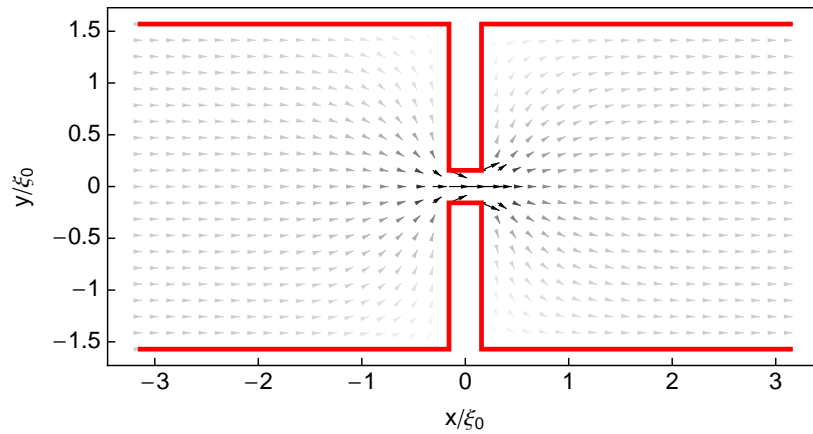
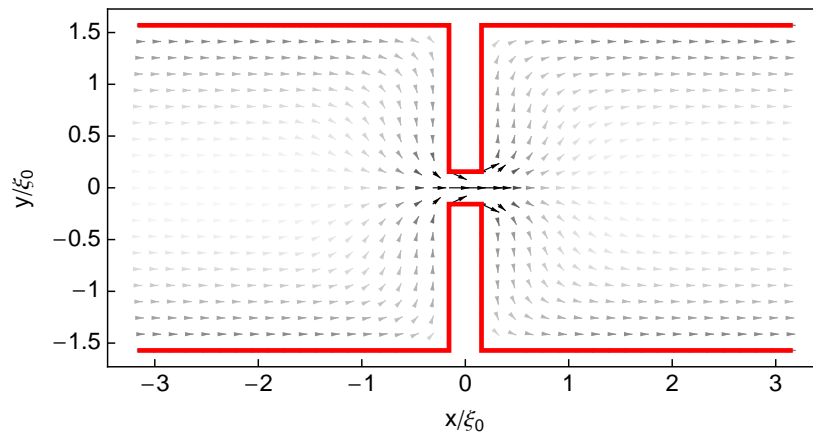
(a) $\kappa = 1$ (b) $\kappa = 0.1$ 

Abbildung 4.16: Stromdichte beim kritischen Strom für $\kappa = 1$ in (a) sowie für $\kappa = 0.1$ in (b). Die Graustufung ist proportional zum Betrag der Stromdichte. Es ist in jeder Raumrichtung nur jeder fünfte tatsächlich berechnete Gitterpunkt eingezeichnet.

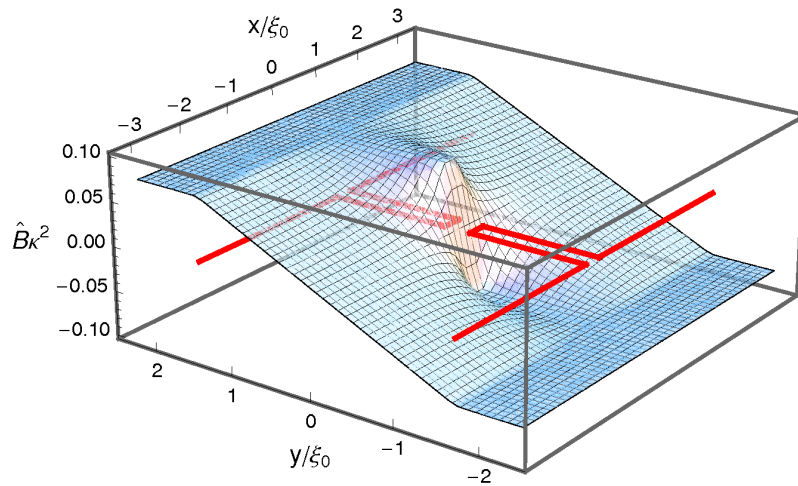
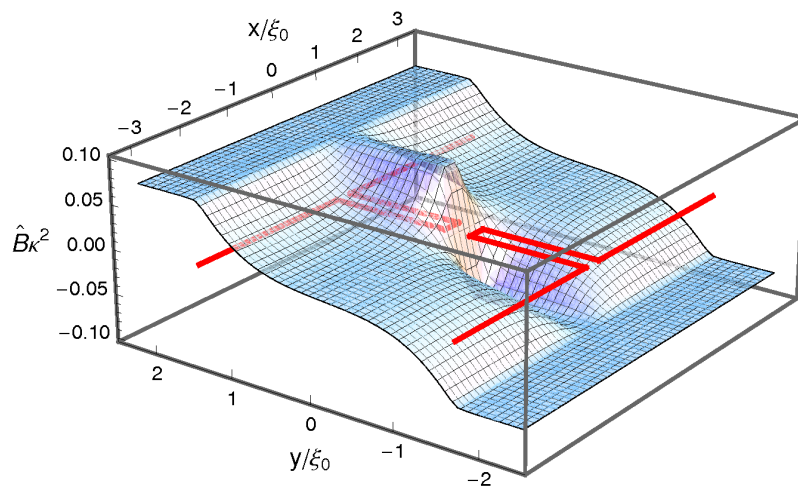
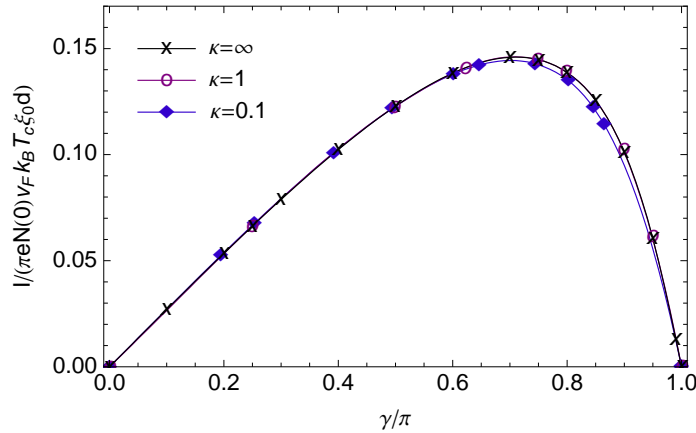
(a) $\kappa = 1$ (b) $\kappa = 0.1$ 

Abbildung 4.17: Magnetfeldverteilung $\mathbf{B} = B\hat{e}_z$ beim kritischen Strom für $\kappa = 1$ in (a) sowie für $\kappa = 0.1$ in (b), hervorgerufen durch die Stromverteilungen in Abbildung 4.16. Die Werte des Magnetfeldes sind mit κ^2 multipliziert, um eine gleiche Skalierung der vertikalen Achse zu erhalten.

(a)



(b)

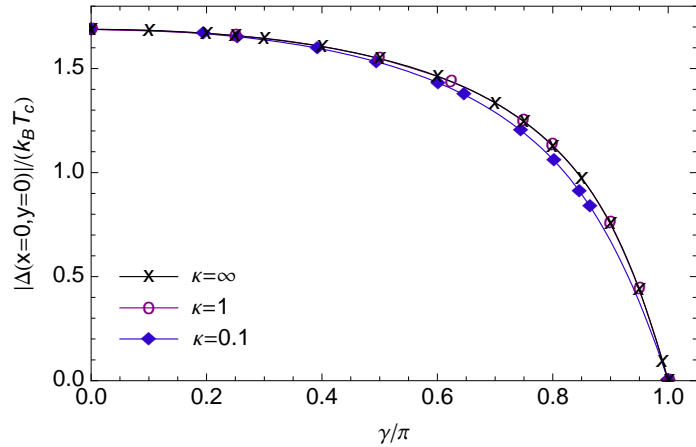


Abbildung 4.18: Strom-Phasen-Beziehung in (a) und Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle ($x = 0, y = 0$) in (b) für verschiedene Werte des Verhältnisses $\kappa = \lambda_L/\xi_0$. Die interpolierten Kurven verbinden die tatsächlich berechneten Werte.

4.5 Einfluss eines externen Magnetfeldes

In diesem Abschnitt wird der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes auf den Josephson-Effekt an einem Engstellen-Kontakt untersucht. Dazu wird eine feste Geometrie mit $2l = 2w = 0.157 \xi_0$ verwendet sowie des Weiteren ein festes Verhältnis $\kappa = \lambda_L/\xi_0 = 1$ von Eindringtiefe und Kohärenzlänge. Im ersten Teil des Abschnittes werden repräsentative Ergebnisse bei $T = 0.5 T_c$ diskutiert, während abschließend am Ende des Abschnittes der kritische Strom in Abhängigkeit von Temperatur und Magnetfeld angegeben wird.

Für die Betrachtungen in diesem Abschnitt müssen die Randbedingungen am linken und rechten Ende des Abschnittes, für den die Eilenberger-Gleichungen selbstkonsistent gelöst werden, modifiziert werden. Beschränkt man die Rechnungen auf schwache äußere Magnetfelder, so kann ohne weiteres die beschriebene periodische Fortsetzung zur Realisierung der Randbedingungen bei $|x| = \pm L/2$ verwendet werden. Sollen jedoch auch starke Magnetfelder, die zu einer Unterdrückung der Supraleitung führen, untersucht werden, so würde das Verhalten des breiteren Kanals (Bildung von Vortizes etc.) die Ergebnisse beeinflussen.

Um das Verhalten des Josephson-Effektes an der Engstelle auch bei hohen äußeren Magnetfeldstärken untersuchen zu können, werden folglich modifizierte Randbedingungen verwendet. Diese Randbedingungen müssen eine Unterdrückung der Amplitude des Paarpoten-

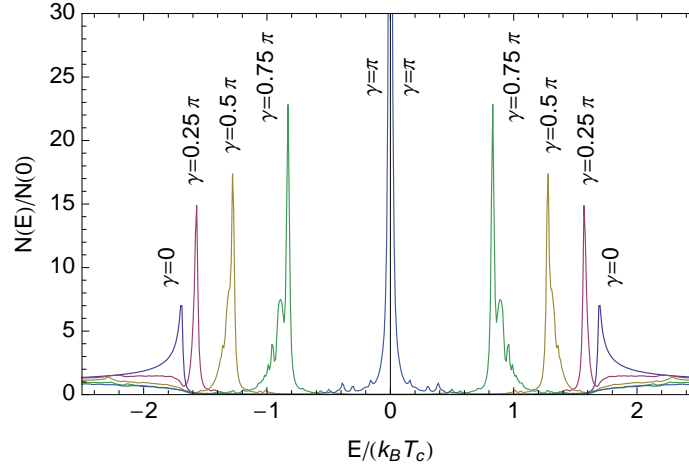
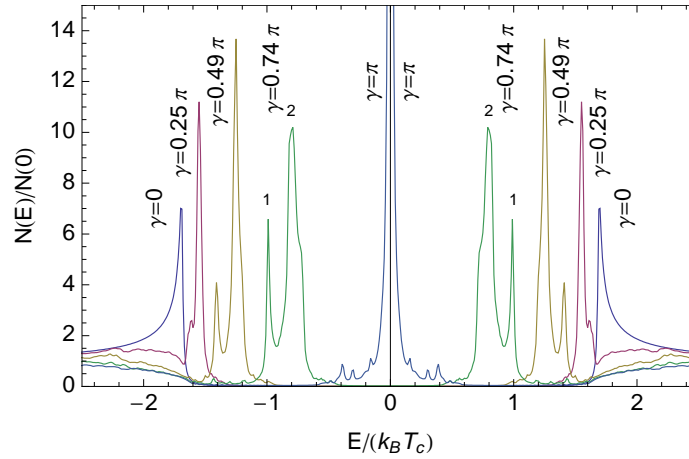
(a) $\kappa = 1$ (b) $\kappa = 0.1$ 

Abbildung 4.19: Lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0$, $y = 0$) für $\kappa = 1$ in (a) sowie für $\kappa = 0.1$ in (b).

tials im Kanal, die durch das äußere Magnetfeld hervorgerufen wird, ermöglichen. Dazu wird in zwei Schritten vorgegangen. Für einen gegebenen Wert des äußeren Magnetfeldes wird zunächst ohne Transportströme ($\gamma = 0$) und ohne die Vorgabe von Randbedingungen für die Phase das Paarpotential selbstkonsistent bestimmt. Dies liefert die korrekte Verteilung des Paarpotentials mit Abschirmströmen, aber ohne Transportströme, und eine mögliche Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials ist enthalten. Im zweiten Schritt wird das so bei $|x| = \pm L/2$ erhaltene Paarpotential als Randbedingung für die Rechnungen mit $\gamma \neq 0$ verwendet. Dazu wird die im ersten Schritt berechnete Phase am linken Ende um $-\Delta\phi/2$ verschoben, und entsprechend am rechten Ende um $+\Delta\phi/2$, wohingegen die Amplitude des Paarpotentials beibehalten wird. Die Amplitude kann hierbei beibehalten werden, da die Transportströme durch den kritischen Strom des Josephson-Kontaktes limitiert sind und zu einer vernachlässigbaren Unterdrückung des Paarpotentials im breiteren Kanal führen. Mit diesem zweistufigen Verfahren, das für jeden Wert des äußeren Magnetfeldes wiederholt werden muss, wird die Unterdrückung des Paarpotentials im Kanal korrekt berücksichtigt.

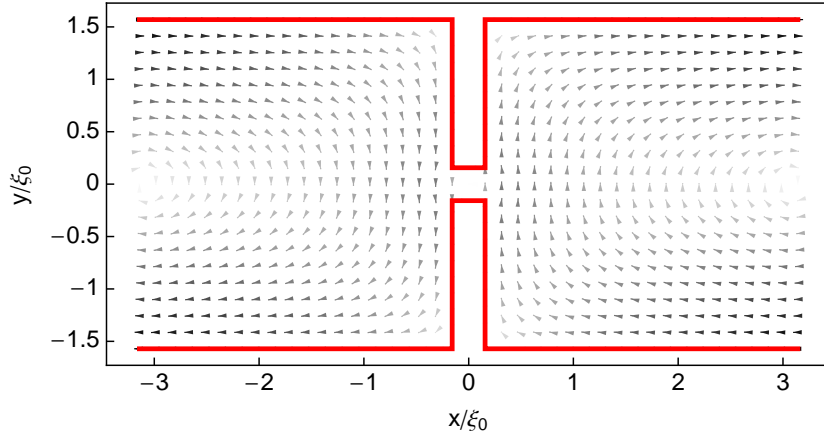
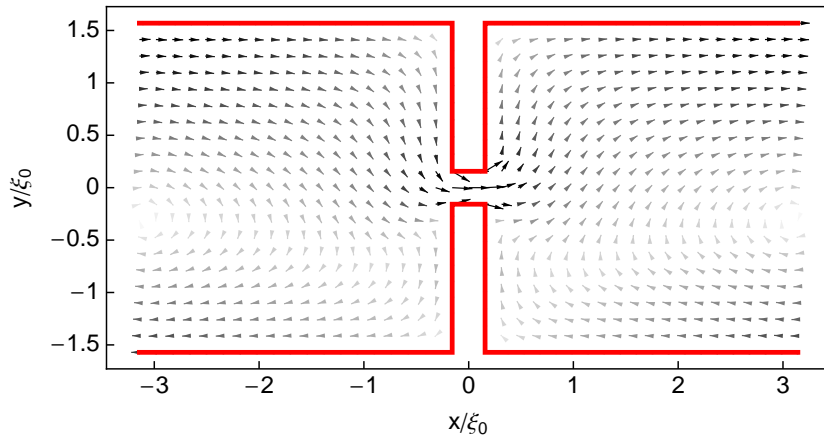
(a) $\gamma = 0$ (b) $\gamma = 0.74 \pi$ 

Abbildung 4.20: Stromdichte bei einem äußeren Feld ($\kappa = 1$, $\hat{B}_0 = 2$) ohne Transportströme über den Kontakt ($\gamma = 0$, in (a)) sowie beim kritischen Strom ($\gamma = 0.74 \pi$, in (b)). Die Graustufung ist proportional zum Betrag der Stromdichte. Es ist in jeder Raumrichtung nur jeder fünfte tatsächlich berechnete Gitterpunkt eingezeichnet.

Vor der Darstellung der Ergebnisse soll kurz die verwendete Normierung für das Magnetfeld diskutiert und in Bezug zum oberen kritischen Feld B_{c2} gestellt werden. Folgt man der in den Referenzen [100, 101] sowie [102] verwendeten Methode, so kann das obere kritische Feld B_{c2} mit Hilfe der Eilenberger-Gleichungen berechnet werden. Für Supraleiter mit einer zylindrischen Fermi-Fläche und für ein äußeres Magnetfeld, das parallel zur Zylinderachse orientiert ist, folgt die Bestimmungsgleichung

$$\ln \frac{T}{T_c} = \int_0^\infty \frac{du}{\sinh u} \left(e^{-u^2 \left(\frac{1.764}{8\pi^2} \right) \hat{B}_{c2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^2} - 1 \right) \quad (4.9)$$

Hierbei wurden für das obere kritische Feld bereits die in dieser Arbeit verwendeten Einheiten eingesetzt. Für die Temperatur $T = 0.5 T_c$ folgt nach Gleichung (4.9) ein Zahlenwert von $\hat{B}_{c2} = 4.51$, oder, ausgedrückt durch die Steigung des oberen kritischen Feldes bei $T = T_c$, ein Wert von $B_{c2} = -0.424 (dB_{c2}/dT|_{T_c T_c})$.

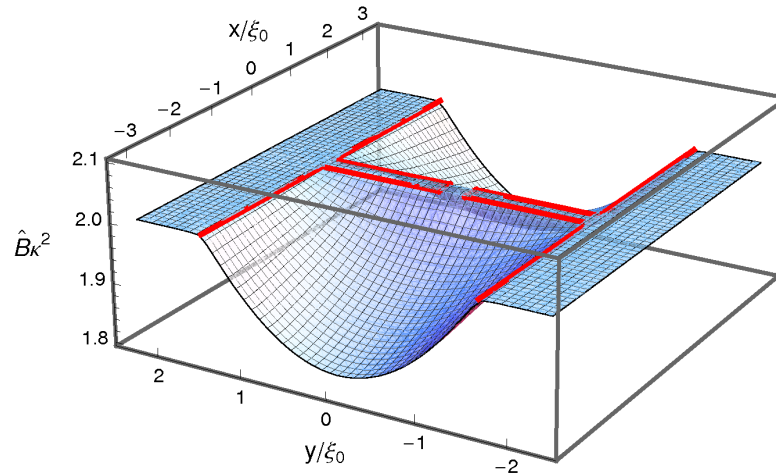
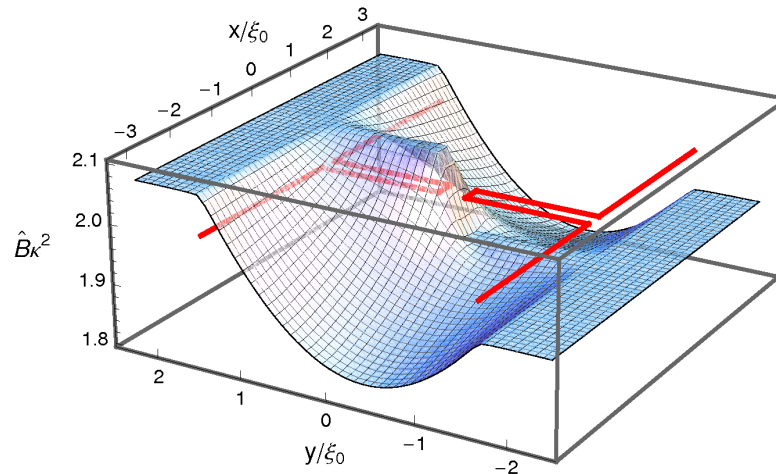
(a) $\gamma = 0$ (b) $\gamma = 0.74 \pi$ 

Abbildung 4.21: Magnetfeldverteilung $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{e}}_z$ bei einem äußeren Feld ($\kappa = 1$, $\hat{B}_0 = 2$) ohne Transportströme über den Kontakt ($\gamma = 0$, in (a)) sowie beim kritischen Strom ($\gamma = 0.74 \pi$, in (b)), hervorgerufen durch die Stromverteilungen in Abbildung 4.20.

Ein äußeres Magnetfeld führt zu Abschirmströmen, die an der Oberfläche des Supraleiters fließen. Im vorliegenden Fall enthält die Stromdichte, die aus den Eilenberger-Gleichungen folgt, also sowohl Anteile, die für die Abschirmung des äußeren Magnetfeldes sorgen, als auch Transportströme über die Engstelle. In Abbildung 4.20 ist die Stromdichte für ein äußeres Magnetfeld von $\hat{B}_0 = 2$ dargestellt. Dabei ist in Abbildung 4.20(a) der Fall ohne Transportströme ($\gamma = 0$) realisiert, während in Teilabbildung (b) der kritische Strom über den Kontakt fließt ($\gamma = 0.74 \pi$). In Abbildung 4.21 sind die entsprechenden Magnetfeldverteilungen $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{e}}_z$ für die beiden Situationen abgebildet.

Ohne Transportströme fließen Abschirmströme an den Oberflächen der Geometrie, und das Magnetfeld im Inneren des Supraleiters ist entsprechend verringert. Da die Breite des Kanals im gleichen Größenbereich liegt wie die Eindringtiefe ($\lambda_L = \kappa\xi_0$ mit $\kappa = 1$), ist das Magnetfeld im Inneren nicht vollständig unterdrückt. Die Abmessungen der Engstelle sind kleiner als die Eindringtiefe und folglich fließen die Abschirmströme nicht über die Engstelle. Durch die rechtwinklige Geometrie fließt in der Engstelle ein schwacher Strom mit umgekehrter Zirkulationsrichtung und das Magnetfeld ist lokal leicht erhöht (*antiscreening*).

Mit einer endlichen Phasendifferenz zwischen den Enden der Geometrie fließt zusätzlich zu den Abschirmströmen ein Transportstrom über den Josephson-Kontakt. Dadurch wird die in Abbildung 4.20(a) erkennbare vierfache Symmetrie gebrochen und eine kombinierte Stromkonfiguration mit Abschirm- und Transportströmen folgt (siehe Abb. 4.20(b)). Folglich wird auch die Magnetfeldverteilung asymmetrisch: das Magnetfeld ist für $y < 0$ abgeschwächt und für $y > 0$ verstärkt. Weit entfernt von der Geometrie wird das äußere Magnetfeld wieder erreicht, aber dies geschieht auf einer größeren Längenskala und ist in Abbildung 4.21 kaum erkennbar.

In Abbildung 4.22(a) und (b) sind die Strom-Phasen-Beziehungen sowie die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle für verschiedene Werte des äußeren Magnetfeldes bei einer Temperatur von $T = 0.5 T_c$ dargestellt. Bei niedrigen Magnetfeldern wird die Stärke der Ströme langsam verringert, genauso wie die Amplitude des Paarpotentials in der Engstelle. Die Form der Strom-Phasen-Beziehung ist für schwache Magnetfelder zunächst nahezu unverändert. Bei sehr starken Magnetfeldern hingegen werden die Transportströme sehr klein und die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle bleibt bei Variation der Phasendifferenz γ konstant. Dabei verschwindet der in Abbildung 4.22(c) dargestellte kritische Strom.

Der Grund für das Verschwinden des Josephson-Effektes bei starken äußeren Magnetfeldern ist, dass in dem Kanal, in den die Engstelle eingebettet ist, mit zunehmender Feldstärke stärkere Abschirmströme fließen, die zu Paarbrechung führen, und das Paarpotential wird unterdrückt. Aufgrund der kleinen Abmessungen im Vergleich zur Eindringtiefe fließen die Abschirmströme nicht über die Engstelle, und das Paarpotential wird in der Engstelle und ihrer direkten Umgebung weniger stark unterdrückt. Wenn jedoch das Paarpotential bereits im breiteren Kanal vollständig unterdrückt ist, so können auch keine Transportströme über die Engstelle fließen, und der Josephson-Effekt tritt nicht auf. Der Effekt eines starken Magnetfeldes besteht also im Wesentlichen in der Unterdrückung der Supraleitung im breiteren Kanal.

Das äußere Magnetfeld, bei dem der Josephson-Effekt bei der für Abbildung 4.22 gewählten Temperatur von $T = 0.5 T_c$ verschwindet, ist wesentlich höher als der zuvor angegebene Wert des oberen kritischen Feldes. Da die untersuchte Geometrie in z -Richtung translationsinvariant ist, kann dieses überraschend hohe Magnetfeld im Sinne des dritten kritischen Feldes B_{c3} verstanden werden [103–105]. Das dritte kritische Feld beschreibt das Einsetzen der Oberflächennukleation bei äußeren Feldern, die parallel zur Oberfläche des Supraleiters orientiert sind. Im Rahmen der Ginzburg-Landau-Theorie folgt nahe T_c ein Wert von $B_{c3} = 1.695 B_{c2}$. Dies bedeutet, dass bei Feldstärken bis zu B_{c3} eine supraleitende Oberflächenschicht der Dicke $\sim \xi(T)$ existieren kann, wohingegen tief im Inneren des Supraleiters das Paarpotential verschwindet. Besteht die Geometrie aus zwei koplanaren Oberflächen mit geringem Abstand d oder beinhaltet Ecken, so wächst das Nukleationsfeld B_{c3} mit $\sim 1/d$ und kann noch weitaus größer sein als der Näherungswert der Ginzburg-Landau-Theorie für eine einzelne Oberfläche (siehe dazu [104] sowie [106, 107]). Da die Breite des Kanals im vorliegenden Fall im Bereich weniger ξ_0 liegt, können die hohen Feldstärken, bei denen der Josephson-Effekt unterdrückt wird, im Sinne des dritten kritischen Feldes verstanden werden. In der Engstelle und ihrer direkten Umgebung ist der Abstand der Oberflächen noch wesentlich geringer und die vollständige Unterdrückung der Supraleitung findet hier bei noch höheren Feldstärken statt.

Bei einer Probe, die aus einem dünnen Film besteht, ist das für die Unterdrückung der Supraleitung relevante kritische Feld das obere kritische Feld B_{c2} . Das Auftreten von B_{c3} in den vorliegenden Ergebnissen resultiert einzig aus der Annahme der Translationsinvarianz in z -Richtung. Aus Abbildung 4.22(c) kann man sehen, dass der kritische Strom mit zunehmendem Magnetfeld bis zum oberen kritischen Feld monoton abnimmt und keine Wirbel im Kontakt auftreten.

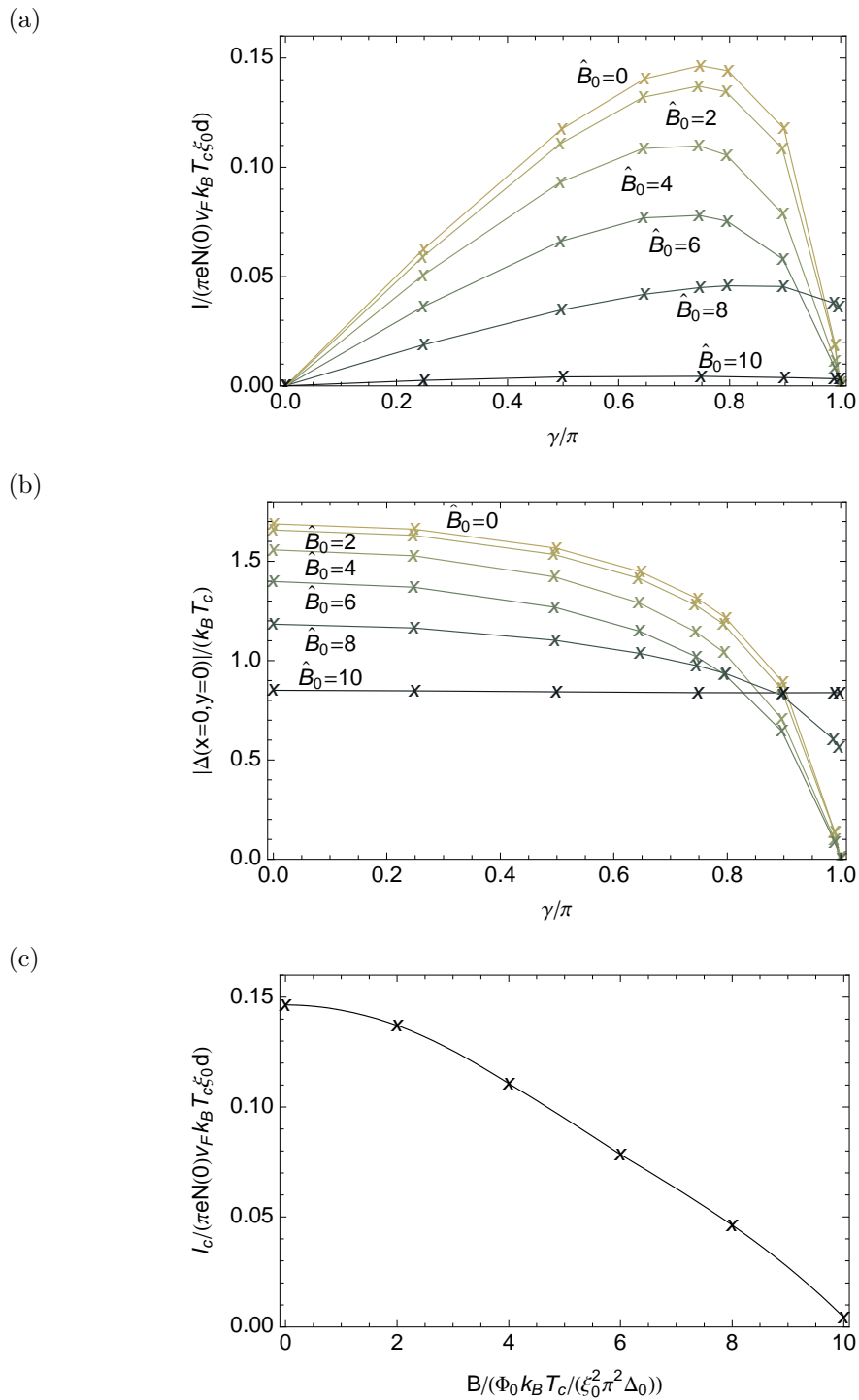


Abbildung 4.22: Strom-Phasen-Beziehung in (a) und die Amplitude des Paarpotentials im Zentrum der Engstelle in (b) für verschiedene Werte des äußeren Magnetfeldes B_0 bei $T = 0.5 T_c$. In (c) ist der entsprechende kritische Strom als Funktion des äußeren Magnetfeldes B_0 dargestellt.

In Abbildung 4.23 ist die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle für drei verschiedene Werte des äußeren Feldes dargestellt. Bei einem Feld mittlerer Stärke sind die gebundenen Andreev-Zustände bereits etwas aufgespalten, aber ihre Position ist gegenüber der Situation ohne äußeres Feld nahezu unverändert. Es liegen auch weiterhin eine ausgeprägte Energielücke sowie gebundene Zustände für endliche Phasendifferenzen $\gamma \neq 0$ vor. Bei $\gamma = \pi$ hat der gebundene Zustand eine Energie von $E_{BS} = 0$ und der Josephson-Effekt ist vorhanden.

Bei sehr hoher Stärke des äußeren Feldes ist die Zustandsdichte stark verändert. Auch bei verschwindender Phasendifferenz $\gamma = 0$ ist die Energielücke teilweise gefüllt. Eine endliche Phasendifferenz führt weiterhin zu gebundenen Zuständen, aber deren spektrales Gewicht ist stark verringert. Bei $\gamma = \pi$ hat der gebundene Zustand eine endliche Energie und der Josephson-Effekt ist unterdrückt.

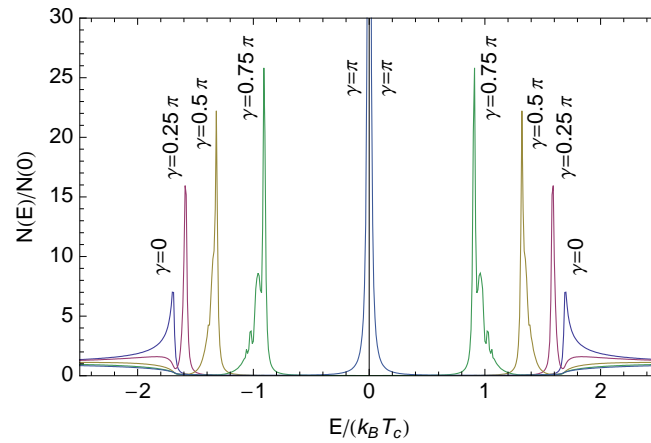
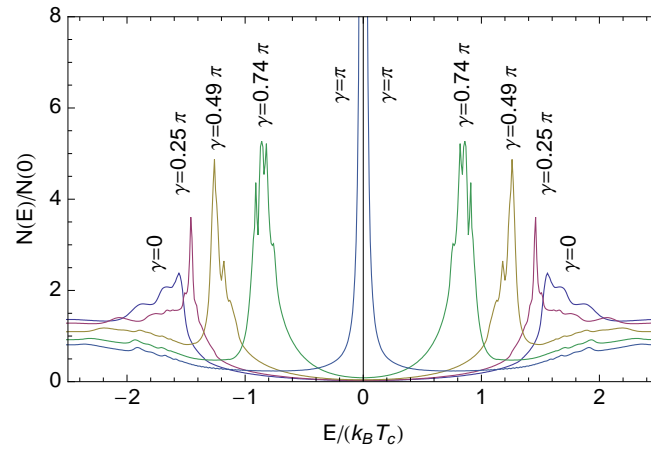
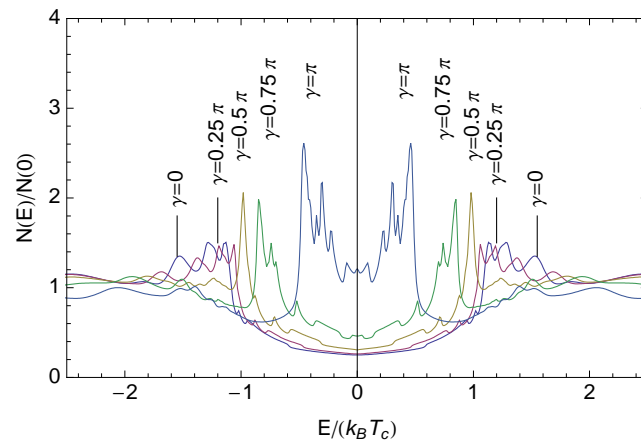
(a) $\hat{B}_0 = 0$ (b) $\hat{B}_0 = 4$ (c) $\hat{B}_0 = 8$ 

Abbildung 4.23: Lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0$, $y = 0$) für drei verschiedene Werte des äußeren Feldes: $\hat{B}_0 = 0$ in (a), $\hat{B}_0 = 4$ in (b) und $\hat{B}_0 = 8$ in (c).

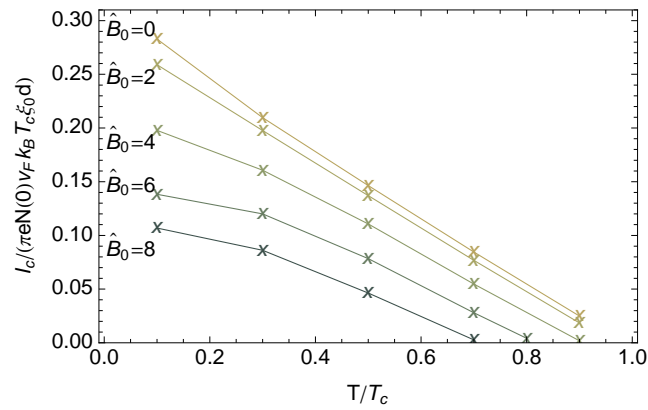


Abbildung 4.24: Der kritische Strom als Funktion der Temperatur für verschiedene Werte des äußeren Magnetfeldes B_0 .

In Abbildung 4.24 werden die Betrachtungen dieses Abschnittes auf den Einfluss der Temperatur erweitert. Die Abbildung zeigt den kritischen Strom als Funktion der Temperatur T für verschiedene Werte des äußeren Magnetfeldes B_0 . Es zeigt sich, dass die Steigung nahe der kritischen Temperatur T_c , die für kleine Ausdehnungen der Engstelle ($l, w \rightarrow 0$) und ohne äußeres Magnetfeld durch das Ergebnis von Kulik und Omelyanchouk aus Abschnitt 2.3.3 gegeben ist, auch bei einem äußeren Magnetfeld bestehen bleibt. Die Unterdrückung des kritischen Stromes mit zunehmendem Magnetfeld ist weiterhin bei allen Temperaturen eine monotone Funktion und es tritt im Fall kleiner Abmessungen der Engstelle ($l, w \leq \lambda_L$) kein Fraunhofer-Muster auf.

Kapitel 5

d -Wellen-Supraleiter: Mikrobrücke

In diesem Kapitel wird ein Engstellen-Josephson-Kontakt, der aus einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie des Paarpotentials besteht, betrachtet. Im Fall der d -Wellen-Symmetrie weist der impulsabhängige Anteil der Faktorisierung des Paarpotentials (3.7) die Abhängigkeit

$$\chi(\mathbf{p}_F) = \cos(2\theta - 2\alpha) \quad (5.1)$$

vom Fermi-Impuls \mathbf{p}_F auf und das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F)$ ist sowohl vom Ort als auch vom Impuls abhängig. Damit tritt im Fall der d -Wellen-Symmetrie mit der Orientierung der d -Welle α ein zusätzlicher geometrischer Parameter auf.

Die untersuchte Geometrie besteht wie im vorhergehenden Kapitel aus einer rechtwinkligen Mikrobrücke entsprechend Abbildung 5.1. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden exemplarische selbstkonsistente Ergebnisse gezeigt, anhand derer die prinzipiellen Unterschiede zwischen dem Fall des Supraleiters mit s -Wellen-Symmetrie (wie im vorhergehenden Kapitel untersucht) und dem Fall des d -Wellen-Supraleiters aufgezeigt werden. Im Folgenden wird der Einfluss der Temperatur untersucht (Abschnitt 5.2) und der Zusammenhang zwischen dem Verhalten des Josephson-Kontaktes und der lokalen Zustandsdichte in der Mikrobrücke aufgezeigt (Abschnitt 5.3). Weiter wird der Einfluss der Breite der Engstelle (Abschnitt 5.4), ihrer Länge (Abschnitt 5.5) sowie des Orientierungswinkels der d -Welle (Abschnitt 5.6) untersucht. Abschließend werden die Ergebnisse in Form von 0 - π -Phasendiagrammen zusammengefasst (Abschnitt 5.7).

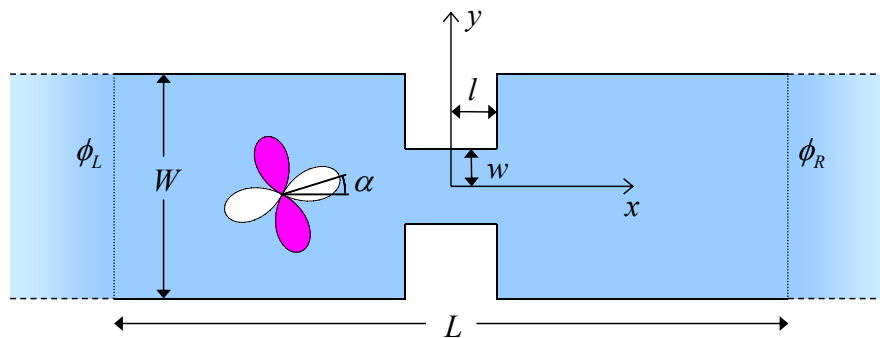


Abbildung 5.1: Modellgeometrie zur Untersuchung eines Engstellen-Josephson-Kontaktes in einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie des Paarpotentials. Zusätzlich zu Länge $2l$ und Breite $2w$ der Engstelle tritt der Orientierungswinkel der d -Welle α als neuer geometrischer Parameter auf.

In diesem Kapitel werden durchweg Mikrobrücken ohne den Einfluss eines äußeren Magnetfeldes untersucht ($B_0 = 0$). Für das Verhältnis $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ wird der Grenzfall $\kappa = \infty$ angenommen, was bedeutet, dass elektromagnetische Selbstkonsistenz vernachlässigt wird. Für alle bekannten Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie stellt dies keine Einschränkung dar, da bei diesen Materialien typischerweise ein Wert von $\kappa = 30 \dots 200$ vorliegt¹. Wie sich im vorhergehenden Kapitel gezeigt hat, sind die Korrekturen durch die elektromagnetische Selbstkonsistenz für derart große Werte von κ vernachlässigbar.

5.1 Exemplarische selbstkonsistente Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden exemplarische selbstkonsistente Ergebnisse für eine Mikrobrücke bestehend aus einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie präsentiert, anhand derer die prinzipiellen Unterschiede des Verhaltens von Supraleitern mit s - und d -Wellen-Symmetrie bei einer Engstellen-Geometrie aufgezeigt werden.

Ein Orientierungswinkel von $\alpha = 0$ bedeutet, dass der Normalenvektor aller Oberflächen der rechtwinkligen Geometrie in Richtung des Maximums der Keulen der d -Welle orientiert ist. Für derart orientierte Oberflächen führt die Symmetrie der d -Welle zu keiner Veränderung des Paarpotentials entlang reflektierter Trajektorien. Folglich ist das Verhalten des Paarpotentials gegenüber dem Fall der s -Wellen-Symmetrie nur schwach modifiziert. Die einzige wesentliche Änderung besteht in einem erhöhten Wert des Betrages des Ordnungsparameters im Fall der d -Welle. Bei $T = 0$ gilt beispielsweise $\Delta_0 = 1.764 k_B T_c$ im Fall der s -Wellen-Symmetrie, im Fall der d -Wellen-Symmetrie aber $\Delta_0 = 2.140 k_B T_c$.

In den Abbildung 5.2 und 5.3 sind Amplitude und Phase des Paarpotentials sowie die Stromdichte für die beiden extremen Orientierungen der d -Welle $\alpha = 0$ sowie $\alpha = \pi/4$ dargestellt. In Abbildung 5.2, bei der $\alpha = 0$ ist, zeigt sich ein Verhalten ähnlich dem Fall der s -Wellen-Symmetrie (vgl. die Abbildungen 4.2 und 4.3).

Für den Orientierungswinkel $\alpha = \pi/4$ verändert sich das Verhalten des Paarpotentials vollständig. Der Normalenvektor aller Oberflächen der Geometrie ist nun in Richtung eines Knotens der d -Wellen-Symmetrie orientiert. Folglich wechselt das Vorzeichen des Paarpotentials bei jeder Reflexion einer Trajektorie an einer Oberfläche. Dies entspricht bei jeder Reflexion einem Phasensprung von $\delta\phi = \pi$ und es resultieren gebundene Andreev-Zustände² bei der Energie $E = 0$ sowie eine vollständige Unterdrückung des Paarpotentials an allen Oberflächen. In Abbildung 5.3(a) ist dieses Verhalten deutlich zu erkennen. Da die Engstelle im Vergleich zur Kohärenzlänge ξ_0 nur wenig ausgedehnt ist, ist die Amplitude des Paarpotentials innerhalb der Engstelle fast vollständig unterdrückt. Dadurch sind die beiden Elektroden, die durch den breiteren Kanal gebildet werden, bereits bei einer verschwindenden Phasendifferenz nahezu vollständig entkoppelt. Bei der exemplarisch dargestellten Phasendifferenz von $\gamma = 0.5\pi$ macht sich dies durch eine starke Variation der Phase innerhalb der Engstelle sowie eine vernachlässigbare Variation im Bereich des breiteren Kanals bemerkbar (siehe Abb. 5.3(b)).

Bei einer Orientierung der d -Welle von $\alpha = \pi/4$ fließen an den Oberflächen der Geometrie Ströme, die entgegen den üblichen Transportströmen gerichtet sind. Diese Ströme entsprechen den anomalen Meissner-Strömen, die bei einem äußeren Magnetfeld auftreten und von den gebundenen Andreev-Zuständen getragen werden³. Im vorliegenden Fall ist bei einer positiven Phasendifferenz $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L > 0$ der Transportstrom von „links“ ($x < 0$) nach „rechts“ ($x > 0$) gerichtet; im Fall einer Orientierung von $\alpha = \pi/4$ fließen folglich an den Oberflächen Ströme von „rechts“ nach „links“. Dieses Verhalten ist in Abbildung 5.3(c) zu erkennen. Insgesamt ergeben sich damit zusammen mit den Transportströmen komplexe Stromverteilungen mit stark variierenden Stromrichtungen und -dichten sowie lokalen (nicht

¹Für eine Übersicht siehe z. B. Referenz [98].

²Zu gebundenen Andreev-Zuständen an Oberflächen von d -Wellen-Supraleitern siehe u.a. [108–116].

³Die anomalen Meissner-Ströme wurden in Referenz [110] durch eine Tieftemperatur-Anomalie der magnetischen Eindringtiefe von $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Filmen nachgewiesen.

quantisierten) Wirbeln.

Die Orientierungswinkel $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi/4$ stellen die extremen Fälle aller möglichen Orientierungen der d -Welle dar. Bei $\alpha = 0$ ist das Paarpotential an den Oberflächen nicht unterdrückt, bei $\alpha = \pi/4$ hingegen vollständig. Bei den dazwischen liegenden Winkeln liegt eine teilweise Unterdrückung vor und die rückfließenden Oberflächenströme sind schwächer. Aus dem Zusammenspiel von Josephson-Effekt und dem speziellen Verhalten bei d -Wellen-Symmetrie ergeben sich interessante Effekte, die sich von denen im Fall der s -Wellen-Symmetrie auf spektakuläre Art und Weise unterscheiden. Die Orientierung der d -Welle führt für $\alpha \neq 0$ zu gebundenen Andreev-Zuständen an den Oberflächen und den beschriebenen rückfließenden Oberflächenströmen. Das relative Gewicht von normalen Transportströmen und rückfließenden Oberflächenströmen bestimmt den Gesamtstrom und damit den kritischen Strom, der bei geeigneten Parameterkombinationen negativ werden kann.

Im Folgenden wird der Einfluss der Geometrie der Engstelle, der Orientierung der d -Welle sowie der Temperatur im Detail untersucht. Dazu wird das bereits im letzten Kapitel eingeführte S-N-S-Modell verwendet. Es hatte sich dabei gezeigt, dass dieses Modell die Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen sehr gut approximiert.

Im Fall der d -Wellen-Symmetrie folgt für dieses Modell:

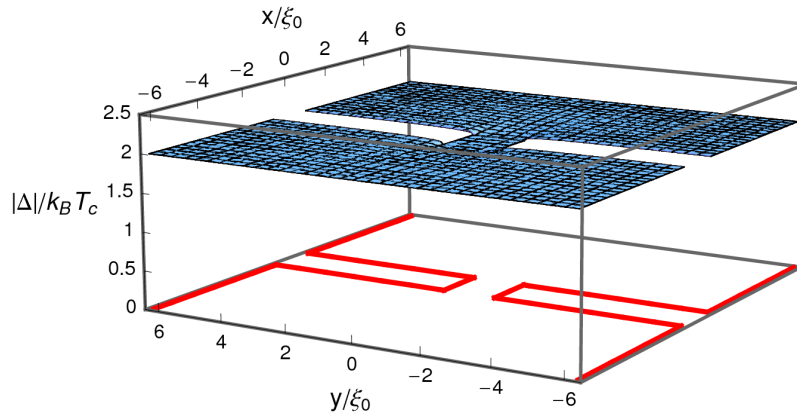
$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \begin{cases} \Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{-i\gamma/2}, & x \leq -l \\ 0, & |x| < l \\ \Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{+i\gamma/2}, & x \geq +l \end{cases} \quad (5.2)$$

Für Orientierungen $\alpha \neq 0$ verbessert sich die Genauigkeit dieses S-N-S-Modells sogar weiter im Vergleich zum Fall des s -Wellen-Supraleiters. In den selbstkonsistent berechneten Ergebnissen führt die Unterdrückung des Paarpotentials an den Oberflächen des Supraleiters zu einer starken Unterdrückung innerhalb der Engstelle, auch für verschwindende Phasendifferenz (vgl. Abb. 5.3(a)). Dies entspricht genau den Annahmen des S-N-S-Modells.

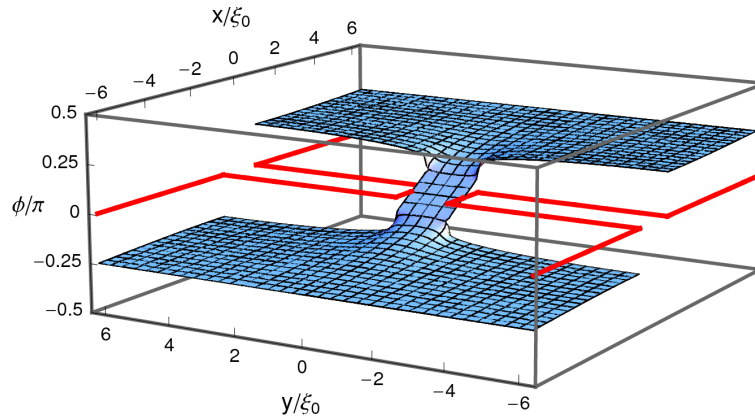
Das S-N-S-Modell kann auch im Fall der d -Wellen-Symmetrie analytisch gelöst werden. Allerdings wird die Lösung gegenüber dem Fall des Supraleiters mit s -Wellen-Symmetrie komplizierter, da ein konstantes Paarpotential im Fall der d -Welle nur für Abschnitte der Trajektorien zwischen zwei Reflexionen vorliegt (vgl. Abb. 5.4). Bei jeder Reflexion ändert sich der Winkel der Trajektorie θ und damit der d -Wellen-Faktor $\cos(2\theta - 2\alpha)$. Die analytischen Lösungen für die Riccati-Amplituden bei konstanten Koeffizienten aus Anhang D können also jeweils nur für einen Abschnitt der Trajektorie zwischen zwei Reflexionen verwendet werden. Folglich müssen für das stückweise konstante Paarpotential entlang jeder reflektierten Trajektorie die Lösungen durch eine Abfolge von Lösungen entsprechend den Gleichungen (4.3) und (4.4) zusammengesetzt werden.

Die Lösungen des S-N-S-Modells für den d -Wellen-Supraleiter unterscheiden sich in einem weiteren Punkt von denen für einen s -Wellen-Supraleiter. Im Fall des s -Wellen-Supraleiters waren die Ergebnisse für die Stromdichte über den Querschnitt der Engstelle konstant. Dies ist im Fall des d -Wellen-Supraleiters nicht gegeben, da die Stromdichte durch die rückfließenden Oberflächenströme im Allgemeinen über den Querschnitt variiert. Folglich muss die Stromgleichung auf dem gesamten Querschnitt der Engstelle bei $x = 0$ ausgewertet werden. Der Gesamtstrom über den Kontakt folgt dann durch die Integration der Stromdichte über diesen Querschnitt.

(a)



(b)



(c)

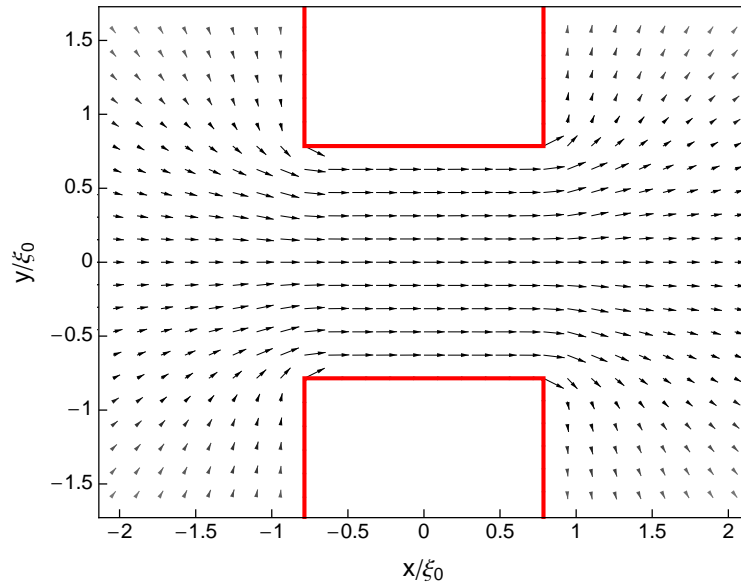
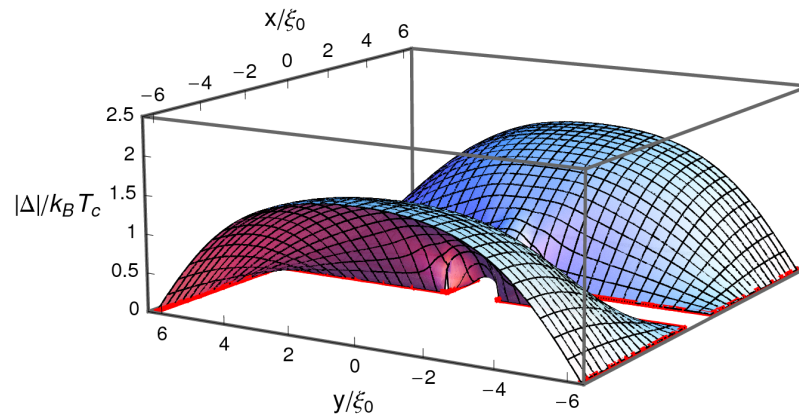
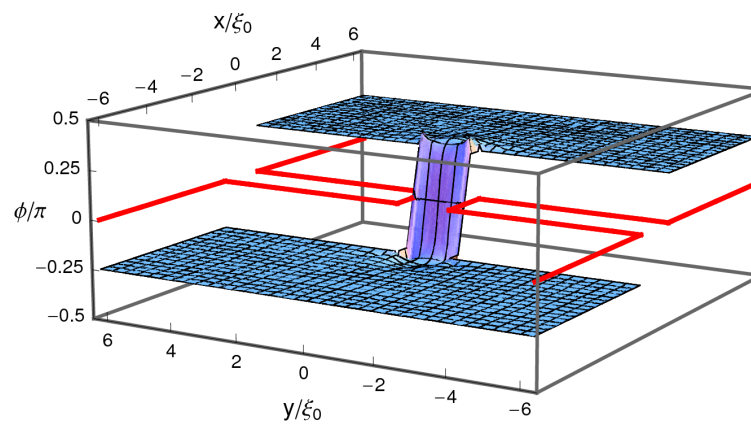


Abbildung 5.2: Amplitude und Phase des Paarpotentials (in (a) und (b)) sowie die Stromdichte (in (c)) für die Orientierung der d -Welle $\alpha = 0$ bei einer Phasendifferenz von $\gamma = 0.5\pi$. Die Geometrie der Engstelle ist jeweils durch die roten Linien ersichtlich. In (c) ist die Abbildung auf die direkte Umgebung der Engstelle beschränkt und die Graustufung ist proportional zur Stromdichte. Es wurden die Abmessungen $2l = 2w = 1.57\xi_0$ sowie $L = W = 12.6\xi_0$ verwendet. Weiterhin ist $T = 0.5T_c$.

(a)



(b)



(c)

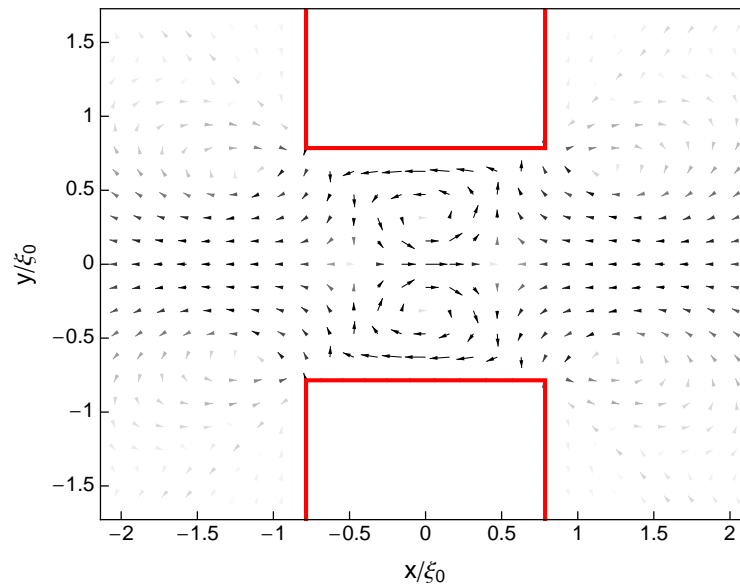


Abbildung 5.3: Amplitude und Phase des Paarpotentials (in (a) und (b)) sowie die Stromdichte (in (c)) für die Orientierung der d -Welle $\alpha = \pi/4$. Darstellung und sonstige Parameter entsprechend Abbildung 5.2.

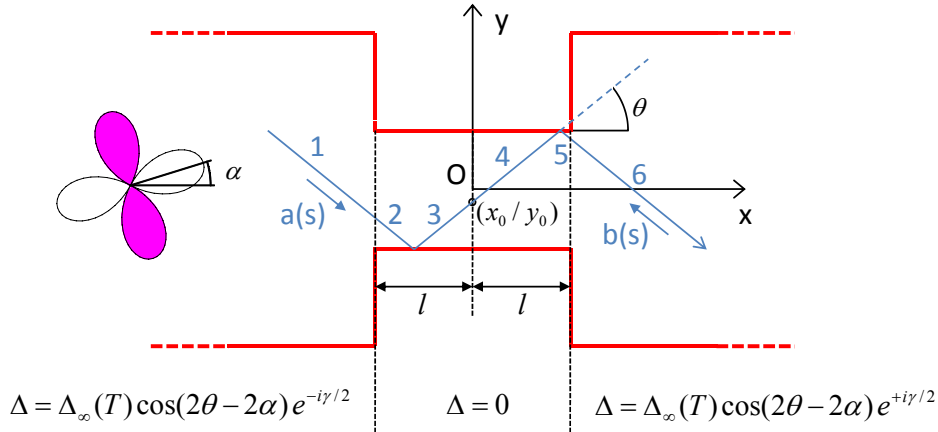


Abbildung 5.4: Skizze zum S-N-S-Modell für das Paarpotential im Fall des d -Wellen-Supraleiters. Für eine exemplarische Trajektorie ausgehend vom Aufpunkt $(x_0 = 0, y_0)$ mit dem Orientierungswinkel θ sind die Richtungen angedeutet, in denen die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ integriert werden müssen. Die sechs Abschnitte der Trajektorie, für die jeweils eine Lösung für stückweise konstante Koeffizienten berechnet werden muss, sind durch die blauen Ziffern gekennzeichnet.

Die Eigenschaften der Mikrobrücke bestehend aus einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie hängen stark von den geometrischen Parametern und der Temperatur ab. Damit existieren mit der Länge der Engstelle $2l$, der Breite $2w$, der Orientierung der d -Welle α sowie der Temperatur T vier relevante Parameter, von denen die Strom-Phasen-Beziehungen und folglich die kritischen Ströme abhängen. In den folgenden Abschnitten 5.2-5.5 wird der Einfluss der Temperatur, der Breite der Engstelle sowie ihrer Länge getrennt untersucht und es werden jeweils Ergebnisse für drei exemplarische Orientierungen der d -Welle ($\alpha = 0, \pi/8, \pi/4$) angegeben. In Abschnitt 5.6 wird der Einfluss der Orientierung der d -Welle im Detail untersucht. In Abschnitt 5.7 werden die Ergebnisse für alle relevanten Parameterkombinationen übersichtlich und zusammenfassend in Form von 0 - π -Phasendiagrammen dargestellt.

5.2 Einfluss der Temperatur

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Temperatur auf die Eigenschaften der Mikrobrücke untersucht. In Abbildung 5.5 sind für die drei Orientierungen $\alpha = 0, \alpha = \pi/8$ und $\alpha = \pi/4$ jeweils für verschiedene Werte der Breite der Engstelle der kritische Strom, sowie in Abbildung 5.6 für eine repräsentative Breite einige Strom-Phasen-Beziehungen in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt.

Für den Orientierungswinkel $\alpha = 0$ unterscheidet sich das Verhalten der Mikrobrücke bestehend aus einem d -Wellen-Supraleiter bereits deutlich vom Fall des s -Wellen-Supraleiters. Auch für sehr kleine Ausdehnungen der Engstelle entspricht die Abhängigkeit des kritischen Stromes von der Temperatur nicht dem Resultat von Kulik und Omelyanchouk (vgl. Abb. 2.4). Im Rahmen der Ergebnisse von Kulik und Omelyanchouk wird der Anstieg des kritischen Stromes mit abnehmender Temperatur schwächer. Dieses Ergebnis wurde im Fall des s -Wellen-Supraleiters, wie im letzten Kapitel gezeigt, im Grenzfall eines Punktkontaktes reproduziert (vgl. Abb. 4.11). Für den Fall des s -Wellen-Supraleiters folgt nur für eine ausgedehnte Mikrobrücke ein stärkerer Anstieg des kritischen Stromes mit abnehmender Temperatur. Im vorliegenden Fall des d -Wellen-Supraleiters hingegen steigt der kritische Strom unabhängig von der Ausdehnung der Mikrobrücke mit abnehmender Temperatur stärker an. Die in Abbildung 5.6(a) exemplarisch für eine Breite von $2w = 0.942 \xi_0$ gezeigten Strom-

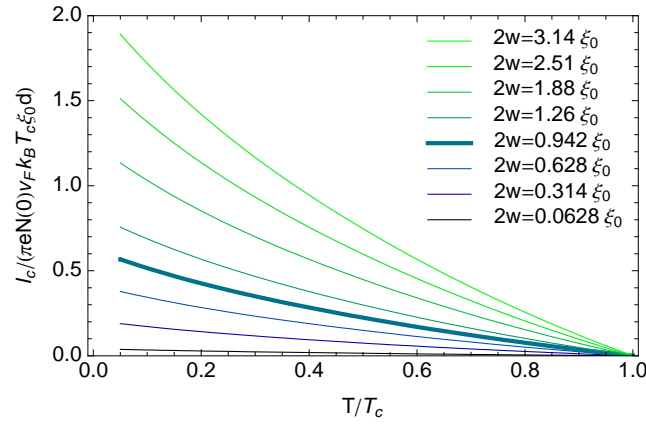
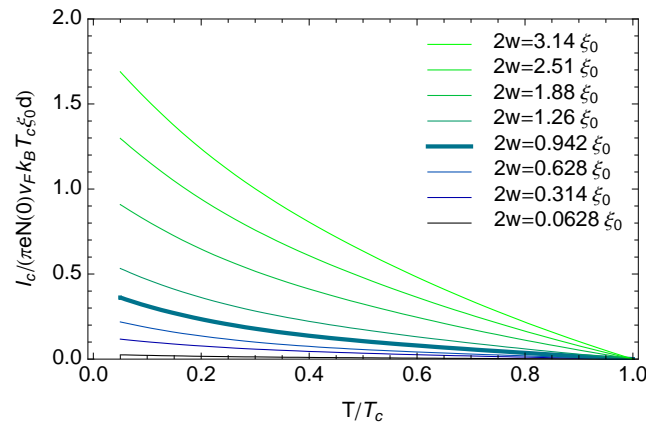
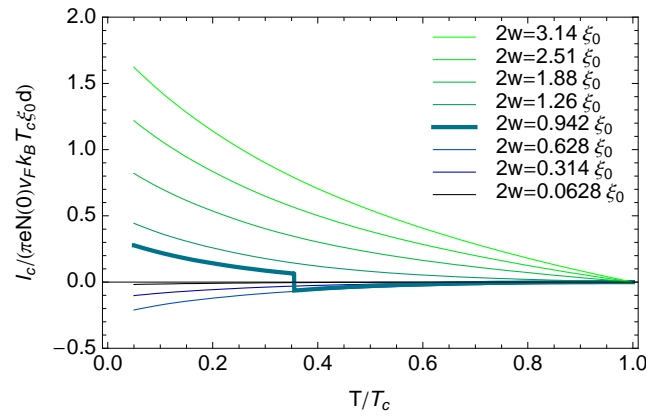
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.5: Einfluss der Temperatur auf die Eigenschaften der Mikrobrücke. Für drei Orientierungen der d -Welle ($\alpha = 0$ in (a), $\alpha = \pi/8$ in (b) sowie $\alpha = \pi/4$ in (c)) ist jeweils der kritische Strom in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Breiten der Engstelle dargestellt. Für die gesamte Abbildung ist $l = 0.628 \xi_0$.

Phasen-Beziehungen für die Orientierung $\alpha = 0$ unterscheiden sich nicht prinzipiell von denen im Fall des s -Wellen-Supraleiters. Für Temperaturen nahe T_c folgt ein nahezu sinusförmiges Verhalten, während für tiefe Temperaturen ein Übergang zur Abhängigkeit $\sin(\gamma/2)$ erfolgt. Allerdings steigen die Ströme für tiefere Temperaturen stärker an als im s -Wellen-Fall.

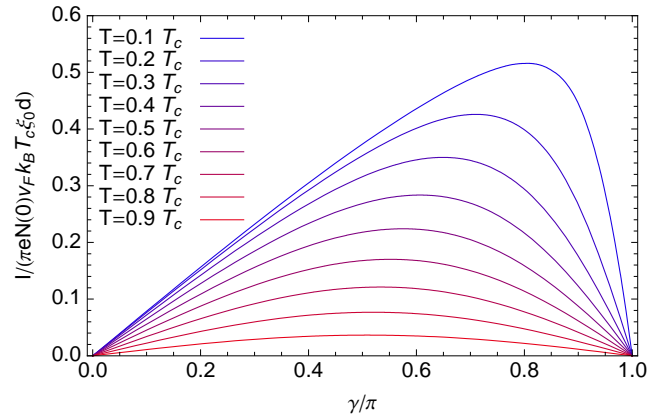
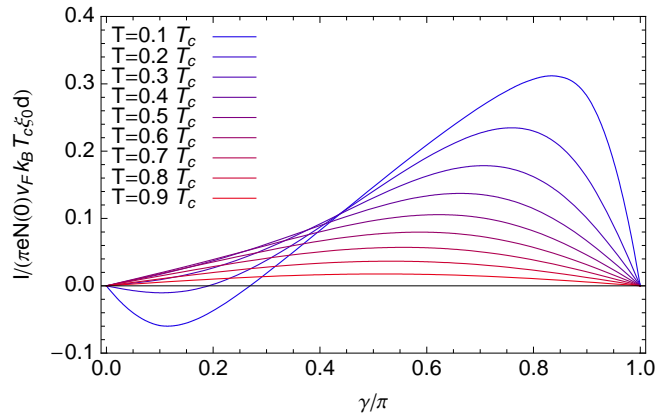
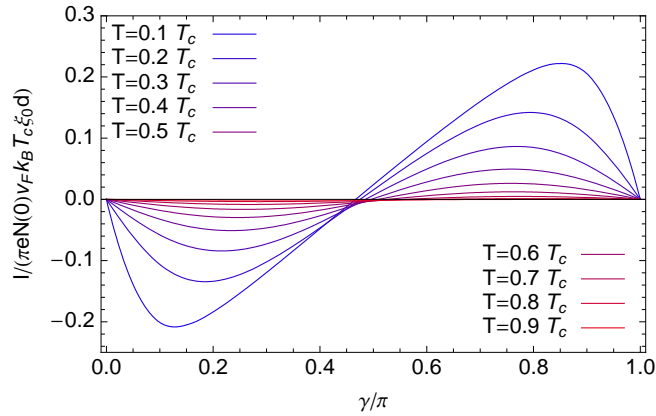
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.6: Für einige Punkte auf den fett hervorgehobenen Kurven aus Abbildung 5.5 zu den drei Orientierungswinkeln $\alpha = 0, \pi/8$ und $\pi/4$ sind die Strom-Phasen-Beziehungen dargestellt. Entsprechend Abbildung 5.5 ist $l = 0.628 \xi_0$.

Im Fall der Orientierung $\alpha = \pi/8$ ist die (positive) Krümmung der Abhängigkeit des kritischen Stromes von der Temperatur stärker ausgeprägt als im Fall der Orientierung $\alpha = 0$ (siehe Abb. 5.5(b)). Die exemplarisch gezeigten Strom-Phasen-Beziehungen in Abbildung 5.6(b) zeigen aber ein vollständig neues Verhalten, das weder im Fall des s -Wellen-Supraleiters noch im Fall des d -Wellen-Supraleiters mit Orientierung $\alpha = 0$ möglich ist. Für

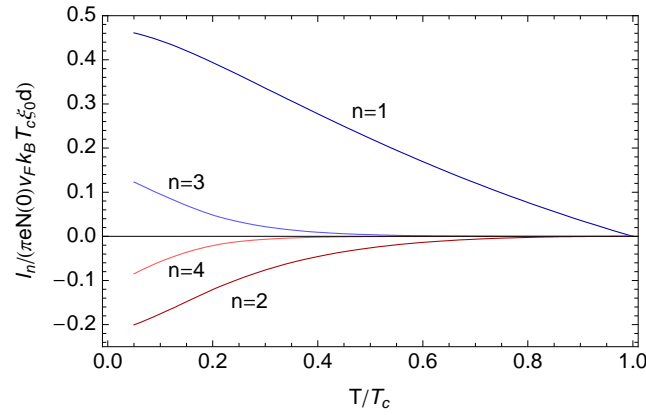
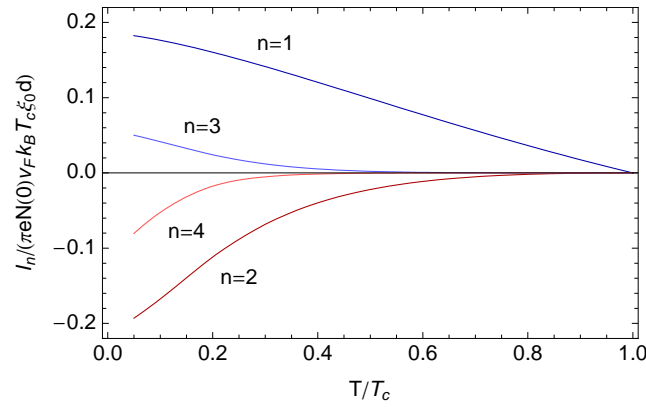
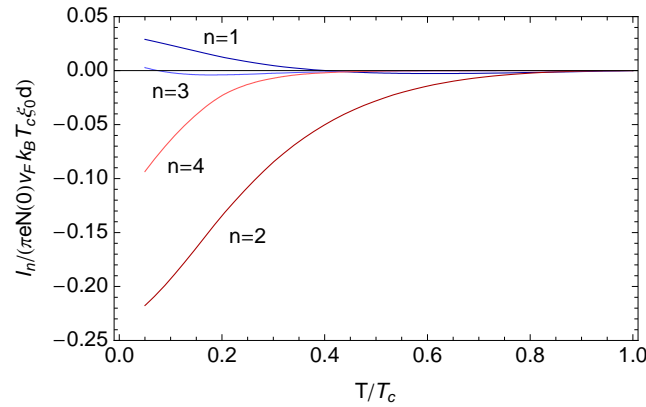
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.7: Die ersten vier Koeffizienten I_n , $n = 1..4$ der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.6 in eine Sinus-Reihe entsprechend Gleichung (5.3).

gewisse Phasendifferenzen γ nimmt der Gesamtstrom über die Mikrobrücke negative Werte an. Dies resultiert aus der Dominanz der rückfließenden Oberflächenströme, die im Fall des d -Wellen-Supraleiters mit einer Orientierung der d -Welle von $\alpha \neq 0$ auftreten. Die negativen Gesamtströme sind bei tiefen Temperaturen ausgeprägter und verschwinden nahe der kritischen Temperatur T_c . Das absolute Maximum der Strom-Phasen-Beziehung, das den kritischen Strom bestimmt, liegt aber für $\alpha = \pi/8$ bei allen Temperaturen bei positiven Werten des Stromes.

Bei der Orientierung $\alpha = \pi/4$ ändert sich das Verhalten der Mikrobrücke auf spektakuläre Art und Weise: für kleine Breiten geht der kritische Strom von positiven zu negativen Werten über. Dies resultiert aus der maximalen Ausprägung der rückfließenden Oberflächenströme bei dieser Orientierung. Ist die Engstelle hinreichend schmal, so dominieren die rückfließenden Oberflächenströme und es resultiert insgesamt ein negativer Gesamtstrom. Dominiert der negative Beitrag zum Gesamtstrom die Strom-Phasen-Beziehung, ist also ihr absolutes Maximum durch einen negativen Strom gegeben, so resultiert insgesamt ein negativer kritischer Strom. Für einen geringen Breitenbereich kann zudem ein Übergang zwischen positivem und negativem kritischem Strom durch eine Variation der Temperatur hervorgerufen werden (im vorliegenden Fall beispielsweise für die Breite $2w = 0.942 \xi_0$).

Für eine Orientierung der d -Welle von $\alpha = \pi/4$ ist der Beitrag der normalen Transportströme sowie der rückfließenden Oberflächenströme je nach Temperatur und Breite der Engstelle von ähnlicher Stärke. Für die exemplarisch für die Strom-Phasen-Beziehungen in Abbildung 5.6(c) verwendete Breite von $2w = 0.942 \xi_0$ dominiert bei hohen Temperaturen der negative Beitrag der rückfließenden Oberflächenströme. Für niedrigere Temperaturen wächst jedoch der Beitrag der positiven (normalen) Transportströme und der kritische Strom wechselt das Vorzeichen. In diesem Bereich sind die Strom-Phasen-Beziehungen näherungsweise von der Form $\sin(2\gamma)$ und damit prinzipiell verändert gegenüber dem Fall des s -Wellen-Supraleiters.

Anhand der Strom-Phasen-Beziehungen wird deutlich, dass der Übergang zwischen negativem und positivem kritischem Strom immer mit einer Unstetigkeit der funktionalen Abhängigkeit $I_c = I_c[l, w, \alpha, T]$ verbunden ist. Da das absolute Maximum der Strom-Phasen-Beziehung für den kritischen Strom relevant ist, müssten die Ströme im Übergang von positivem zu negativem kritischem Strom ansonsten für alle Phasendifferenzen γ verschwinden, was nicht gegeben ist. Somit kann der Betrag des kritischen Stromes bestenfalls ein lokales Minimum annehmen, eine Nullstelle kann aber nicht vorliegen.

Entsprechend der in Abschnitt 2.1 genannten allgemeingültigen Eigenschaften kann jede Strom-Phasen-Beziehung in eine Sinus-Reihe entwickelt werden:

$$I(\gamma) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n \sin(n\gamma) \quad (5.3)$$

Zur genaueren Diskussion der Abhängigkeit der Strom-Phasen-Beziehungen von den geometrischen Parametern und der Temperatur wird für die in Abbildung 5.6 gezeigten Strom-Phasen-Beziehungen eine Entwicklung in eine Sinus-Reihe durchgeführt. In Abbildung 5.7 sind entsprechende Ergebnisse für die vier ersten Koeffizienten $I_1..I_4$ dargestellt.

Bei einer Orientierung von $\alpha = 0$ zeigt die Reihenentwicklung, dass der Beitrag der ersten Harmonischen die Strom-Phasen-Beziehung dominiert. Im Bereich tiefer Temperaturen wachsen die Beiträge der höheren Harmonischen. Das Vorzeichen der ersten Harmonischen ist für $\alpha = 0$ bei allen Temperaturen positiv, und entsprechend auch der kritische Strom.

Für $\alpha = \pi/8$ ist der Beitrag von $\sin(\gamma)$ gegenüber der Orientierung $\alpha = 0$ verringert. Ansonsten unterscheiden sich die Koeffizienten der Reihenentwicklung der Strom-Phasen-Beziehung kaum von denen für $\alpha = 0$.

Bei der Orientierung $\alpha = \pi/4$ dominiert die zweite Harmonische bei Temperaturen unterhalb von etwa $\sim 0.8 T_c$. Die erste Harmonische ist bei tiefen Temperaturen positiv und bei höheren Temperaturen negativ. Dieser Vorzeichenwechsel spiegelt das Vorzeichen des kritischen Stromes wider.

Die Dominanz der zweiten Harmonischen für $\alpha = \pi/4$ zeigt deutlich, dass die entsprechenden Strom-Phasen-Beziehungen zu Parameterkombinationen gehören, die nahe am Übergang zwischen positiven und negativen kritischen Strömen liegen. Wenn eine $\sin(2\gamma)$ -Komponente in der Strom-Phasen-Beziehung vorliegt (und höhere Harmonische verschwinden), existiert nach Referenz [12] ein weiteres Extremum der Energie bei $\gamma = \varphi$ mit

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{I_1}{2I_2}\right) \quad (5.4)$$

zusätzlich zu den beiden Punkten $\gamma = 0$ und $\gamma = \pi$. Dieses Extremum der Energie entspricht nach Gleichung (3.38) einer Nullstelle der Strom-Phasen-Beziehung, $I(\gamma = \varphi) = 0$. Für das Vorliegen eines stabilen energetischen Minimums gilt weiterhin das Stabilitätskriterium (3.39). Folglich besteht nahe dem Übergang zwischen negativen und positiven kritischen Strömen die Möglichkeit einer intrinsischen Phasendifferenz γ_0 mit $0 < \gamma_0 < \pi$ und damit eines φ -Josephson-Kontaktes.

Aus Gleichung (5.4) folgt, dass bei einer Strom-Phasen-Beziehung, bei der nur I_1 und I_2 endliche Werte aufweisen und höhere Harmonische verschwinden, zusätzliche Stabilitätsbedingungen für das Auftreten einer intrinsischen Phasendifferenz von $0 < \gamma_0 < \pi$ gelten. Für das Argument des Arcus Cosinus muss $|I_1/(2I_2)| < 1$ gefordert werden. In erster Näherung kann man sich bei den Ergebnissen in Abbildung 5.7 auf die ersten beiden Harmonischen beschränken. Die Bedingung $|I_1/(2I_2)| < 1$ ist dann nach Abbildung 5.7 bei tiefen Temperaturen sowohl für die Orientierung $\alpha = \pi/8$ als auch für $\alpha = \pi/4$ erfüllt. Die Parameterbereiche, für die ein φ -Josephson-Kontakt realisiert wird, werden in Abschnitt 5.7 in Form von 0 - π -Phasendiagrammen im Detail diskutiert.

5.3 Lokale Zustandsdichte und intrinsische Phasendifferenz

Um die Ursache für die rückfließenden Oberflächenströme besser verstehen zu können, ist die Betrachtung der lokalen Zustandsdichte essentiell. In Abbildung 5.8 ist die lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0, y = 0$) für die drei zuvor verwendeten Orientierungen der d -Welle für einige Werte der Phasendifferenz γ sowie die Energie der gebundenen Zustände für alle Werte von γ dargestellt. In der folgenden Abbildung 5.9 ist in der gleichen Darstellung die Zustandsdichte am Rand der Engstelle ($x = 0, y = w$) abgebildet.

Bei der Orientierung $\alpha = 0$ liegt für verschwindende Phasendifferenz $\gamma = 0$ sowohl im Zentrum der Engstelle wie auch am Rand die bekannte Zustandsdichte eines Supraleiters mit d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung mit dem typischen linearen Anstieg der Zustandsdichte bei kleinen Energien vor (siehe die Abbildungen 5.8(a) und 5.9(a)). Die geringfügige Aufspaltung der Kohärenzpeaks resultiert aus dem S-N-S-Modell, bei dem das Paarpotential lokal in der Engstelle unterdrückt ist; dies führt zu einer verringerten Energielücke, die sich allerdings durch die Winkelabhängigkeit der d -Welle bei der Mikrobrückengeometrie nicht für alle Impulsrichtungen gleich stark auswirkt, woraus die Aufspaltung resultiert. Für endliche Phasendifferenzen $\gamma > 0$ entstehen analog zum Fall des s -Wellen-Supraleiters gebundene Andreev-Zustände innerhalb der Energielücke, die den Strom über die Mikrobrücke tragen. Die Energie dieser gebundenen Zustände nimmt näherungsweise mit $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ ab und verschwindet für $\gamma = \pi$. Für die Orientierung $\alpha = 0$ unterscheidet sich die lokale Zustandsdichte am Rand der Engstelle nicht von der im Zentrum.

Bei der Orientierung mit maximaler Ausprägung der rückfließenden Ströme, $\alpha = \pi/4$, unterscheidet sich die Zustandsdichte im Zentrum und am Rand der Engstelle vollständig (siehe die Abbildungen 5.8(c) und 5.9(c)). Im Zentrum, wo die normalen, in positiver Richtung orientierten Ströme fließen, gleicht das prinzipielle Verhalten der Zustandsdichte zur Orientierung $\alpha = 0$. Die Aufspaltung der Peaks liegt aufgrund der um $\pi/4$ gedrehten d -Welle nicht vor. Die Energie der gebundenen Andreev-Zustände folgt hier in sehr guter Näherung der Abhängigkeit $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$.

Am Rand der Engstelle zeigt sich ein hierzu komplementäres Bild. Für verschwindende Phasendifferenz $\gamma = 0$ liegt ein gebundener Andreev-Zustand mit Energie $E_{BS} = 0$ vor. Mit zunehmender Phasendifferenz $\gamma > 0$ wächst dessen Energie an, wobei sie in sehr guter Näherung der Abhängigkeit $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \sin(\gamma/2)$ folgt. Bei $\gamma = \pi$ geht die Zustandsdichte am Rand der Engstelle in die *bulk*-Zustandsdichte eines d -Wellen-Supraleiters über.

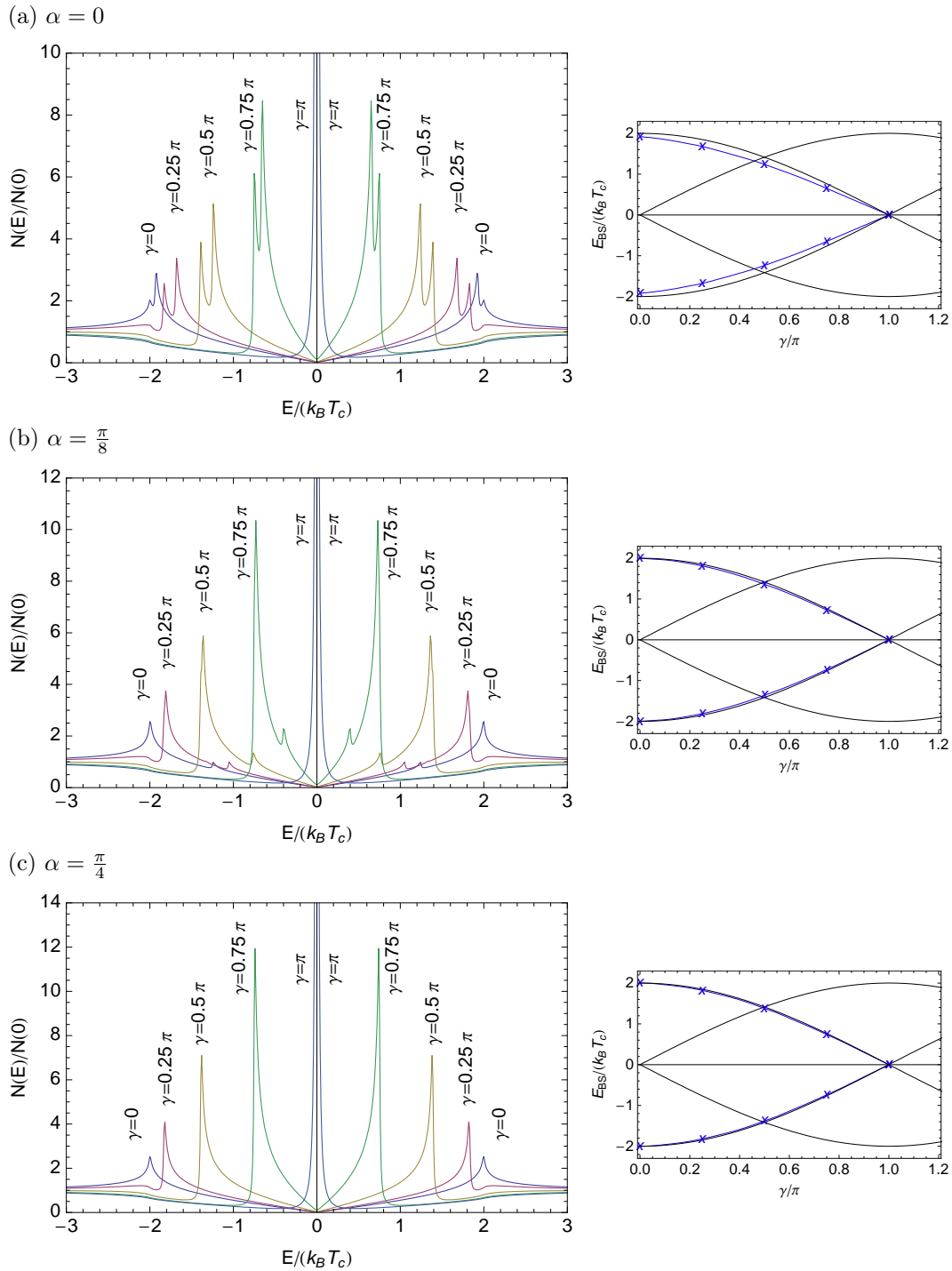


Abbildung 5.8: Lokale Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle ($x = 0$, $y = 0$) für die drei Orientierungen der *d*-Welle ($\alpha = 0$ in (a), $\alpha = \pi/8$ in (b) sowie $\alpha = \pi/4$ in (c)). In den Abbildungen rechts ist jeweils die Energie der gebundenen Zustände dargestellt (blaue Kurven) sowie zum Vergleich die Abhängigkeiten $E_{BS} = \pm\Delta_{\infty}(T) \cos(\gamma/2)$ und $E_{BS} = \pm\Delta_{\infty}(T) \sin(\gamma/2)$ (schwarze Kurven); die Energien der gebundenen Zustände für die links gezeigten Zustandsdichten sind durch die Markierungen (x) hervorgehoben. Für diese Abbildung ist $2l = 0.0628 \xi_0$ und $2w = 0.314 \xi_0$ sowie $T = 0.5 T_c$.

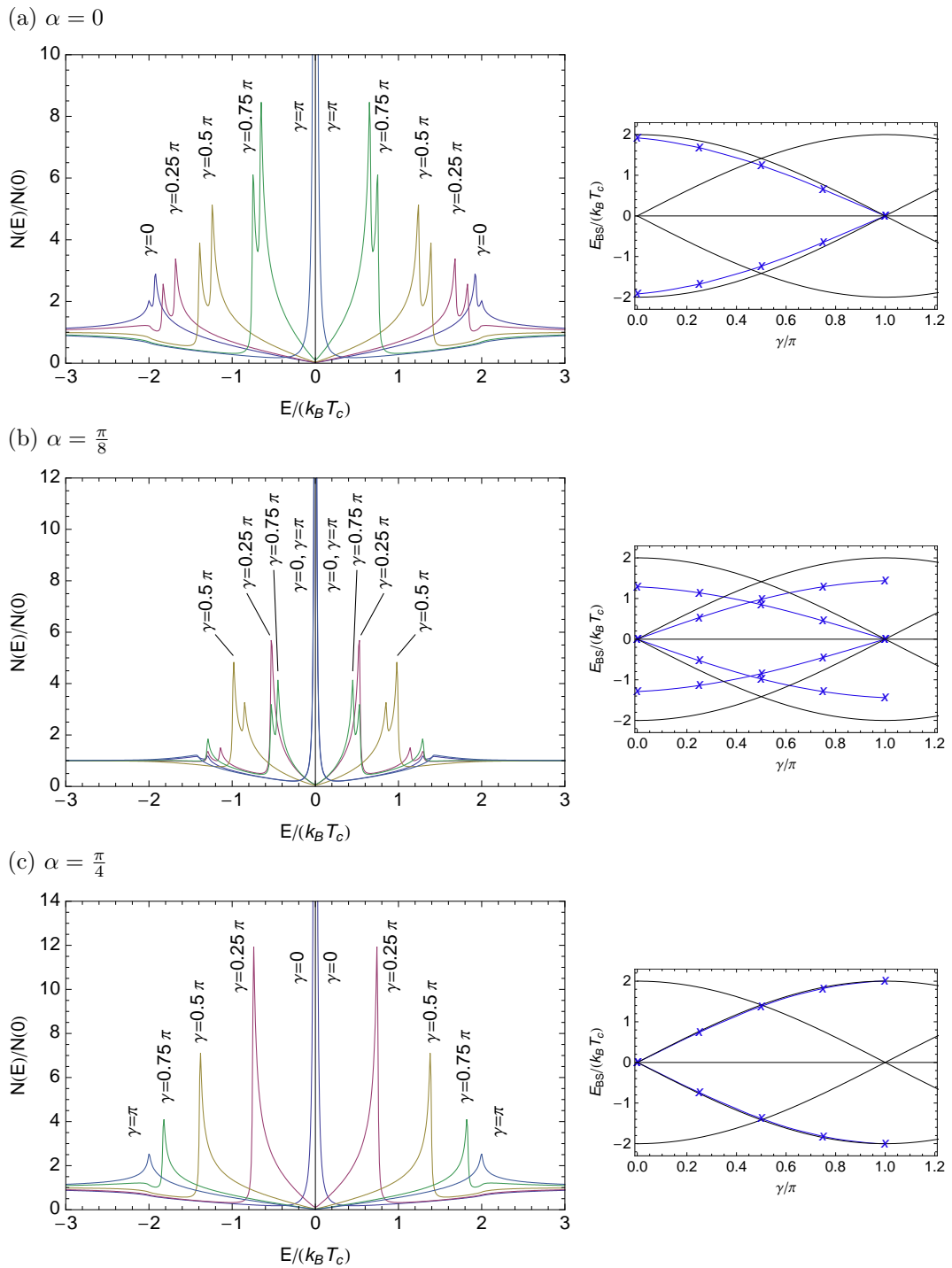
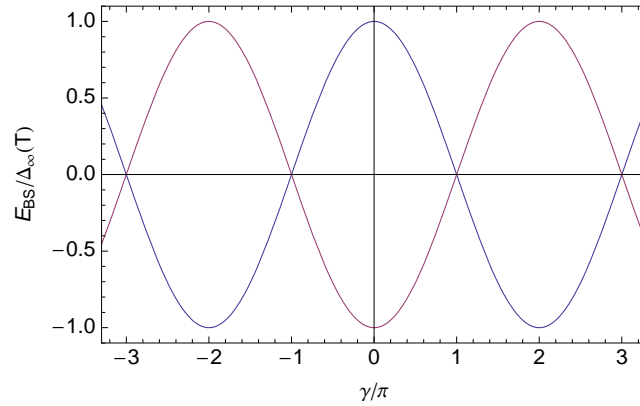


Abbildung 5.9: Lokale Zustandsdichte am Rand der Engstelle ($x = 0$, $y = w$) für die drei Orientierungen der d -Welle ($\alpha = 0$ in (a), $\alpha = \pi/8$ in (b) sowie $\alpha = \pi/4$ in (c)). Darstellung und sonstige Parameter entsprechend Abbildung 5.8

(a)



(b)

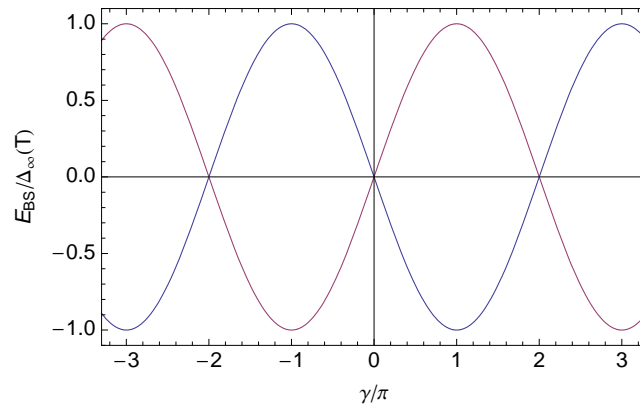


Abbildung 5.10: Schematische Darstellung der Energie E_{BS} der gebundenen Zustände im Josephson-Kontakt. In (a) der Fall eines normalen Josephson-Kontaktes, in (b) der Fall eines π -Josephson-Kontaktes.

Für die zwischen den beiden Extrema liegende Orientierung $\alpha = \pi/8$ überlagert sich das Verhalten der Orientierungen $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi/4$ (siehe die Abbildungen 5.8(b) und 5.9(b)). Im Zentrum der Engstelle folgt die Energie der gebundenen Andreev-Zustände der Abhängigkeit $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ in sehr guter Näherung. Die zusätzlichen lokalen Maxima in der Zustandsdichte bei allen Werte der Phasendifferenz γ sind ein Charakteristikum der Orientierung $\alpha = \pi/8$ in der Nähe einer Oberfläche, das aus der Winkelabhängigkeit der d -Welle und dem Reflexionsverhalten folgt. Am Rand der Engstelle liegen bei der Orientierung $\alpha = \pi/8$ für alle Werte der Phasendifferenz γ (mindestens) zwei lokale Maxima vor. Verfolgt man die Hauptmaxima, so ergibt sich das gleichzeitige Vorhandensein eines gebundenen Zustandes mit einer näherungsweisen Abhängigkeit $E_{BS} \propto \cos(\gamma/2)$ sowie eines zweiten gebundenen Zustandes mit der näherungsweisen Abhängigkeit $E_{BS} \propto \sin(\gamma/2)$. Insbesondere durch das gleichzeitige Auftreten gebundener Andreev-Zustände bei diesen beiden Energien wird die erwähnte Überlagerung des Verhaltens der beiden extremen Orientierungen $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi/4$ deutlich.

Durch die gesonderte Betrachtung der lokalen Zustandsdichte im Zentrum der Engstelle (bei $(x = 0/y = 0)$) und am Rand der Engstelle (bei $(x = 0/y = w)$) sowie durch den Vergleich mit den Ergebnissen für die Mikrobrücke bestehend aus einem s -Wellen-Supraleiter kann die Ursache für die rückfließenden Ströme, die bei genügender Stärke für einen negativen kritischen Strom und damit für eine endliche intrinsische Phasendifferenz $\gamma_0 \neq 0$ des Kontaktes sorgen, identifiziert werden.

Liegen ohne Phasendifferenz keine gebundenen Andreev-Zustände vor, so fließt der Strom über den Kontakt bei einer positiven Phasendifferenz $\gamma > 0$ in positiver Richtung. Der Strom wird dabei von gebundenen Zuständen mit der Energie $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ getragen, die einen Strom phasenkohärenter Quasiteilchen beschreiben.

Liegen bei verschwindender Phasendifferenz im Josephson-Kontakt bereits gebundene Andreev-Zustände bei der Energie $E_{BS} = 0$ vor, so entspricht dies einer intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$ im Sinne einer Energie der gebundenen Zustände von $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2 + \pi) = \mp\Delta_\infty(T) \sin(\gamma/2)$. Wird nun eine endliche Phasendifferenz $\gamma > 0$ betrachtet, so schneiden die beiden Äste der Relation $E_{BS} = \mp\Delta_\infty(T) \sin(\gamma/2)$ bereits bei $\gamma = 0$ die γ -Achse und elektronenartige und lochartige Quasiteilchenanregungen vertauschen ihre Rollen. Daraus resultiert ein Strom in negativer Richtung, der von niederenergetischen Quasiteilchenanregungen getragen wird.

In Abbildung 5.10 ist die Energie der gebundenen Zustände für den normalen Josephson-Kontakt und den Josephson-Kontakt mit einer intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$ (π -Josephson-Kontakt) schematisch dargestellt. In (a) sind für den Fall eines normalen Josephson-Kontaktes die beiden Äste $E_{BS} = \pm\Delta_\infty(T) \cos(\gamma/2)$ eingezeichnet. In (b) ist der Fall eines π -Josephson-Kontaktes abgebildet, bei dem bereits bei verschwindender Phasendifferenz $\gamma = 0$ gebundene Zustände bei $E_{BS} = 0$ vorhanden sind. Dies entspricht einer relativen Phasenverschiebung von $\gamma_0 = \pi$ der Energie der gebundenen Zustände gegenüber dem normalen Josephson-Kontakt. Folglich liegt der blaue Ast, der in (a) für $0 < \gamma < \pi$ im Bereich positiver Energien liegt, in (b) im Bereich negativer Energien. Entsprechend liegt der rote Ast, der in (a) für $0 < \gamma < \pi$ im Bereich negativer Energien lag, in (b) im Bereich positiver Energien. Damit vertauschen elektronenartige und lochartige Quasiteilchenanregungen ihre Rollen. Aus dieser Vertauschung der Rollen von elektronenartigen und lochartigen Quasiteilchenanregungen folgt der in umgekehrter Richtung fließende Strom des π -Josephson-Kontaktes.

Im Fall der Mikrobrücke, die aus einem d -Wellen-Supraleiter mit der Orientierung $\alpha = \pi/4$ besteht, werden die gebundenen Andreev-Zustände mit der Energie $E_{BS} = 0$ durch die Auswirkungen der Symmetrie der d -Welle auf die Reflexionen der Quasiteilchen an Oberflächen der Geometrie hervorgerufen⁴. Ist das relative Gewicht der gebundenen Zustände im Josephson-Kontakt ausreichend groß, so dominieren die in negativer Richtung fließenden Ströme und es folgt ein negativer kritischer Strom bzw. eine endliche intrinsische Phasendifferenz $\gamma_0 \neq 0$ des gesamten Josephson-Kontaktes.

⁴Detaillierte Untersuchungen zur lokalen Zustandsdichte an Oberflächen von d -Wellen Supraleitern sind u. a. in den Referenzen [115,116] zu finden.

5.4 Einfluss der Breite der Mikrobrücke

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Breite der Mikrobrücke auf die Strom-Phasen-Beziehungen und die kritischen Ströme untersucht. Dazu sind in Abbildung 5.11 bei einer festen Temperatur von $T = 0.5 T_c$ für die drei Orientierungen der d -Welle $\alpha = 0$, $\alpha = \pi/8$ und $\alpha = \pi/4$ für verschiedene Längen der Mikrobrücke die kritischen Ströme in Abhängigkeit der Breite $2w$ dargestellt. Zusätzlich sind in Abbildung 5.12 für alle drei Orientierungen der d -Welle für eine repräsentative Länge die Strom-Phasen-Beziehungen für einige Breiten der Mikrobrücke abgebildet.

Bei einer Orientierung von $\alpha = 0$ gibt es keine rückfließenden Oberflächenströme und die kritischen Ströme sind direkt proportional zur Breite der Engstelle (siehe Abb. 5.11(a)). Dieses Verhalten ist nicht durch die Länge der Mikrobrücke beeinflusst. Die Länge der Mikrobrücke führt für diese Orientierung der d -Welle nur zu einer Variation der absoluten Werte der kritischen Ströme: mit zunehmender Länge der Mikrobrücke nehmen die kritischen Ströme ab. Der Einfluss der Länge wird im nächsten Abschnitt genauer untersucht. Für die in Abbildung 5.11(a) fett hervorgehobene Kurve sind in Abbildung 5.12(a) für einige exemplarische Breiten die Strom-Phasen-Beziehungen abgebildet. Für die verwendeten Werte für die Parameter $2l$, $2w$ und T sind die Strom-Phasen-Beziehungen näherungsweise sinusförmig. Die Variation der Breite der Mikrobrücke $2w$ verändert die funktionale Form der Strom-Phasen-Beziehung nicht, sondern skaliert einzig die Amplitude. Hieraus wird der lineare Anstieg des kritischen Stromes mit zunehmender Breite der Mikrobrücke ersichtlich.

Bei einer Orientierung der d -Welle von $\alpha = \pi/8$ modifizieren die rückfließenden Oberflächenströme das Verhalten des kritischen Stromes. Für kleine Breiten der Engstelle wächst der kritische Strom bei allen Längen schwächer als linear an. Dieser schwächere Anstieg geht näherungsweise bei $2w \simeq 2l$ in einen linearen Anstieg über. Der schwächere Anstieg bei kleinen Breiten der Mikrobrücke entsteht durch den Einfluss der rückfließenden Oberflächenströme, die den in positiver Richtung fließenden Gesamtstrom verringern. Bei großen Breiten wächst der kritische Strom linear an, da der Beitrag der rückfließenden Oberflächenströme ab einer bestimmten Breite konstant bleibt und nicht weiter anwächst.

Die Strom-Phasen-Beziehungen sind im Fall der Orientierung $\alpha = \pi/8$ gegenüber der Orientierung $\alpha = 0$ verändert. Der Einfluss der rückfließenden Oberflächenströme führt bei geringen Breiten der Mikrobrücke zu einer positiven Krümmung der Strom-Phasen-Beziehung für kleine Phasendifferenzen. Für große Breiten der Mikrobrücke sind die Strom-Phasen-Beziehungen gegenüber der Orientierung $\alpha = 0$ kaum verändert.

Bei einer Orientierung von $\alpha = \pi/4$ sind bei kleinen Breiten der Mikrobrücke die rückfließenden Oberflächenströme dominant und es resultiert ein negativer kritischer Strom. Mit zunehmender Länge der Mikrobrücke wird der Bereich der Breite, für den der kritische Strom negativ ist, größer. Der Einfluss der Länge der Mikrobrücke wird im nächsten Abschnitt genauer untersucht.

Im Fall der Orientierung $\alpha = \pi/4$ weisen die Strom-Phasen-Beziehungen, je nach Breite der Mikrobrücke, Bereiche mit negativem Strom auf. Bei kleinen Werten der Breite der Engstelle ist auch das absolute Maximum der Strom-Phasen-Beziehung und damit der kritische Strom negativ.

Auch für die in Abbildung 5.12 gezeigten Strom-Phasen-Beziehungen wurde eine Entwicklung in eine Sinus-Reihe durchgeführt. Entsprechende Ergebnisse für die ersten beiden Koeffizienten I_1 und I_2 sind in Abbildung 5.13 dargestellt. Bei allen drei verwendeten Orientierungen der d -Welle liefert der Koeffizienten mit $n = 2$ einen unveränderten Beitrag, der negativ ist und dessen Betrag linear mit zunehmender Breite anwächst. Der Koeffizient der ersten Harmonischen I_1 spiegelt bei allen Orientierungen direkt das Verhalten des kritischen Stromes wider. Bei einem positiven Koeffizienten I_1 ist auch der kritische Strom positiv. Ein Vorzeichenwechsel von I_1 entspricht einem Vorzeichenwechsel von I_c . Die Koeffizienten zu höheren Harmonischen sind für die verwendete Temperatur von $T = 0.5 T_c$ vernachlässigbar klein (vgl. Abb. 5.7).

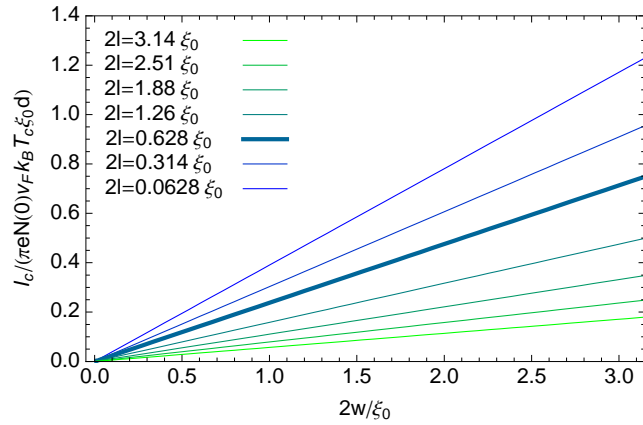
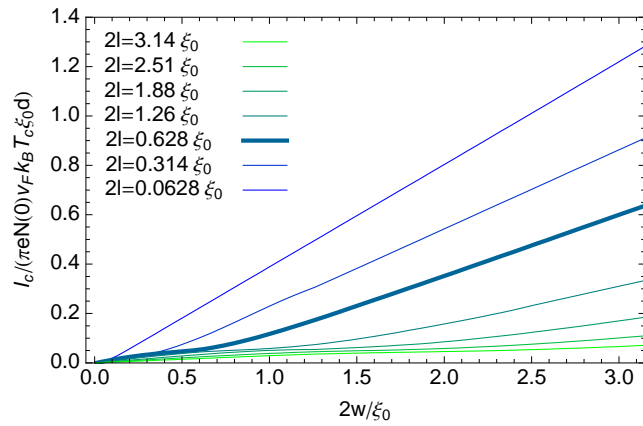
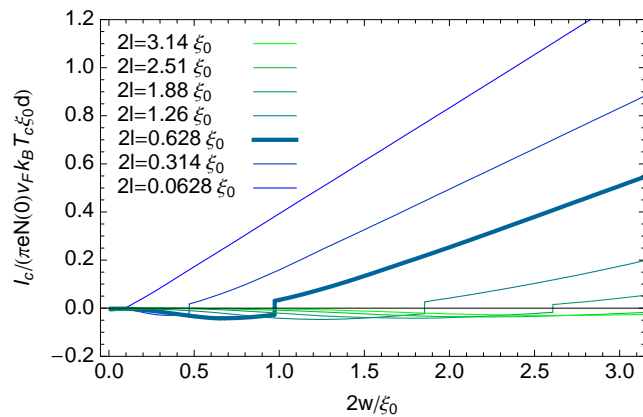
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.11: Einfluss der Breite der Mikrobrücke. Für drei Orientierungen der d -Welle ($\alpha = 0$ in (a), $\alpha = \pi/8$ in (b) sowie $\alpha = \pi/4$ in (c)) ist jeweils der kritische Strom in Abhängigkeit der Breite $2w$ der Mikrobrücke für verschiedene Längen $2l$ dargestellt. Für die gesamte Abbildung ist $T = 0.5 T_c$.

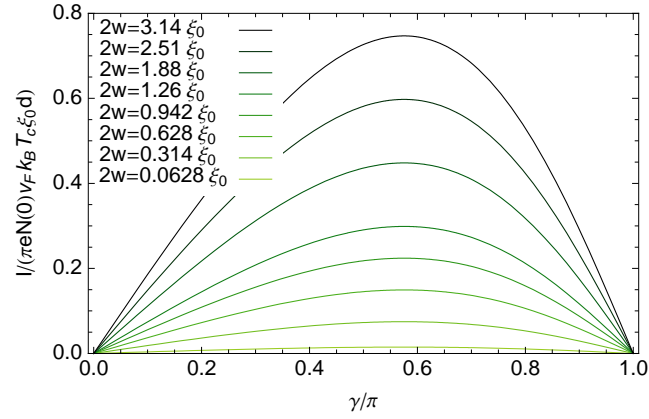
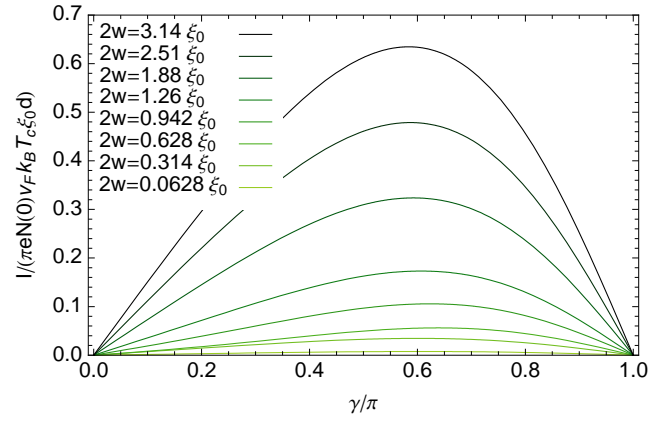
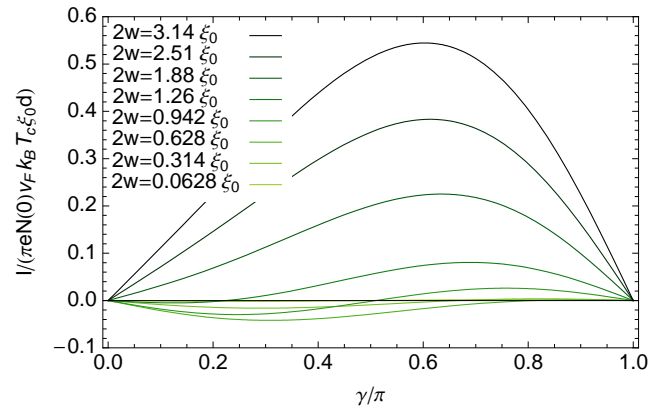
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.12: Für einige Punkte auf den fett hervorgehobenen Kurven aus Abbildung 5.11 zu den Orientierungswinkeln $\alpha = 0$, $\pi/8$ und $\pi/4$ sind die Strom-Phasen-Beziehungen dargestellt. Entsprechend Abbildung 5.11 ist $T = 0.5 T_c$.

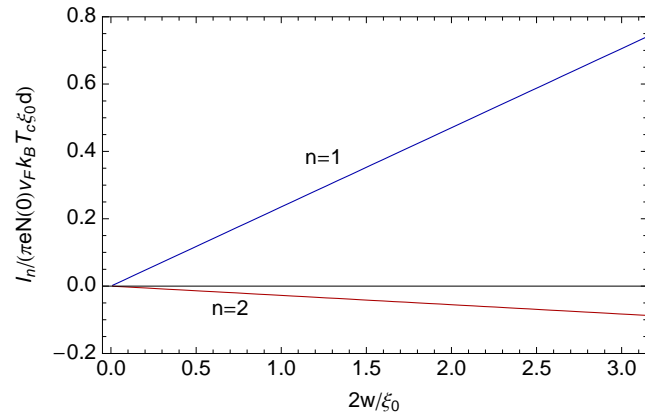
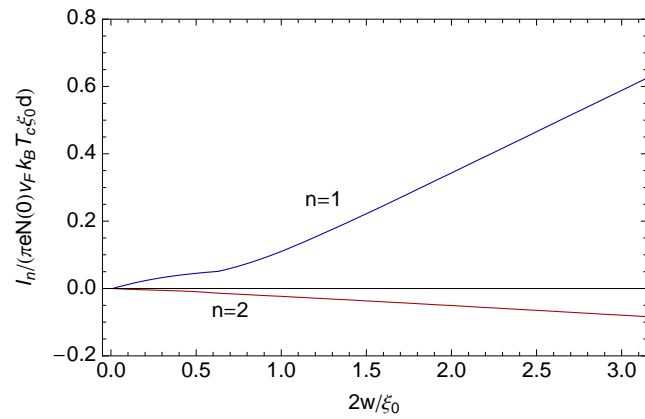
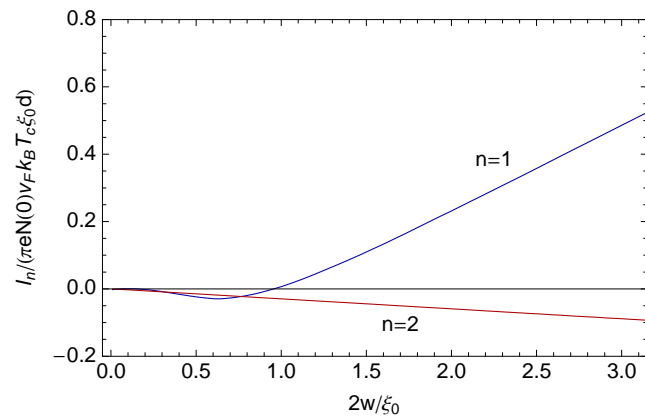
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.13: Die ersten beiden Koeffizienten I_n , $n = 1, 2$ der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.12 in eine Sinus-Reihe entsprechend Gleichung (5.3). Höhere Koeffizienten sind für die verwendete Temperatur von $T = 0.5 T_c$ bereits irrelevant.

5.5 Einfluss der Länge der Mikrobrücke

In diesem Abschnitt steht der Einfluss der Länge der Mikrobrücke auf die Strom-Phasen-Beziehungen und den kritischen Strom im Mittelpunkt. In Abbildung 5.14 sind dazu für eine feste Temperatur von $T = 0.5 T_c$ für die drei Orientierungen $\alpha = 0, \pi/8$ und $\pi/4$ für verschiedene Breiten der Mikrobrücke die kritischen Ströme in Abhängigkeit der Länge $2l$ dargestellt. Zusätzlich sind in Abbildung 5.15 für eine repräsentative Breite die Strom-Phasen-Beziehungen für verschiedene Werte der Länge der Mikrobrücke abgebildet.

Bei der Orientierung $\alpha = 0$ fällt der kritische Strom für alle Breiten mit zunehmender Länge der Engstelle ab und verschwindet im Grenzfall $l \rightarrow \infty$. Das Verschwinden des kritischen Stromes für asymptotisch große Längen der Mikrobrücke ist eine Eigenschaft des S-N-S-Modells, die im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen für den s -Wellen-Supraleiter nicht gefunden wurde (siehe Abb. 4.13). Dennoch liefert das S-N-S-Modell korrekt das Abfallen des kritischen Stromes mit zunehmender Länge. Wie bereits erwähnt, wird das S-N-S-Modell für Orientierungen $\alpha \neq 0$ besser, da die zusätzliche Unterdrückung des Paarpotentials an den Oberflächen zu einer Unterdrückung des Paarpotentials in der Engstelle führt, die im S-N-S-Modell enthalten ist.

Die Strom-Phasen-Beziehungen für die Orientierung $\alpha = 0$ sind für die verwendeten Werte für w und T in guter Näherung sinusförmig. Mit zunehmender Länge der Engstelle nimmt ihre Amplitude ab und der kritische Strom wird kleiner.

Im Fall der Orientierung $\alpha = \pi/8$ fällt der kritische Strom mit zunehmender Länge schneller ab als für $\alpha = 0$. Dies weist darauf hin, dass die rückfließenden Oberflächenströme mit zunehmender Länge der Mikrobrücke im Vergleich zu den in positiver Richtung fließenden normalen Transportströmen zunehmend an relativem Gewicht gewinnen. Der kritische Strom bleibt aber bei der Orientierung $\alpha = \pi/8$ für alle Längen positiv. Die Strom-Phasen-Beziehungen sind entsprechend gegenüber der Orientierung $\alpha = 0$ nur wenig verändert.

Bei der Orientierung $\alpha = \pi/4$ fällt der kritische Strom mit zunehmender Länge der Mikrobrücke noch schneller ab als für $\alpha = \pi/8$ und wird ab einer bestimmten Länge für alle Breiten negativ. Dieses Verhalten bestätigt die Beobachtung, dass mit zunehmender Länge der Mikrobrücke die rückfließenden Oberflächenströme den Gesamtstrom dominieren. Dies impliziert, dass die rückfließenden Oberflächenströme robuster gegen eine Unterdrückung des Paarpotentials sind als die normalen Transportströme.

Die Strom-Phasen-Beziehungen zeigen bei der Orientierung $\alpha = \pi/4$ mit zunehmender Länge deutlichere negative Bereiche, die ab dem unstetigen Übergang zu einem negativen kritischen Strom dominieren. Bei weiterem Anwachsen der Länge der Mikrobrücke fällt aber auch der Beitrag der rückfließenden Oberflächenströme ab und der Betrag der negativen kritischen Ströme wird kleiner.

Die Koeffizienten der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.15 in eine Sinus-Reihe sind in Abbildung 5.16 dargestellt. Es ergibt sich ein ähnliches Bild wie bei der Untersuchung des Einflusses der Breite der Mikrobrücke. Der erste Koeffizient spiegelt direkt das Verhalten des kritischen Stromes wider. Ein Vorzeichenwechsel von I_1 entspricht direkt einem Vorzeichenwechsel des kritischen Stromes, und sowohl I_1 als auch I_c fallen mit zunehmender Länge der Mikrobrücke schnell ab. Der zweite Koeffizient ist nahezu unabhängig von der Orientierung und fällt ebenfalls schnell mit zunehmender Länge ab. Koeffizienten zu höheren Harmonischen sind bei der verwendeten Temperatur von $T = 0.5 T_c$ für alle drei Orientierungen vernachlässigbar klein.

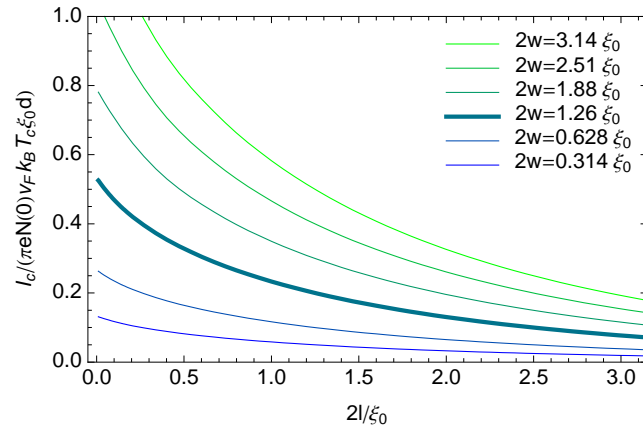
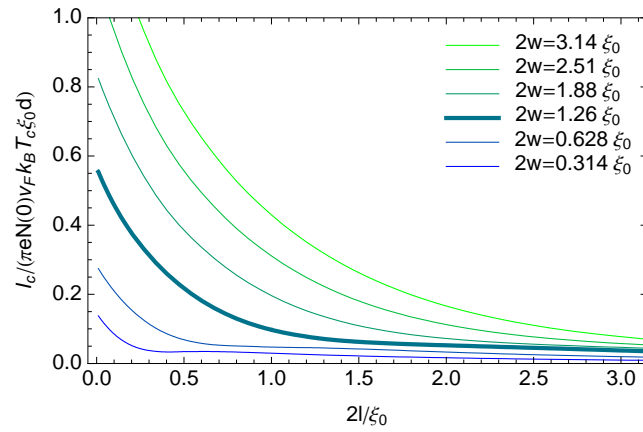
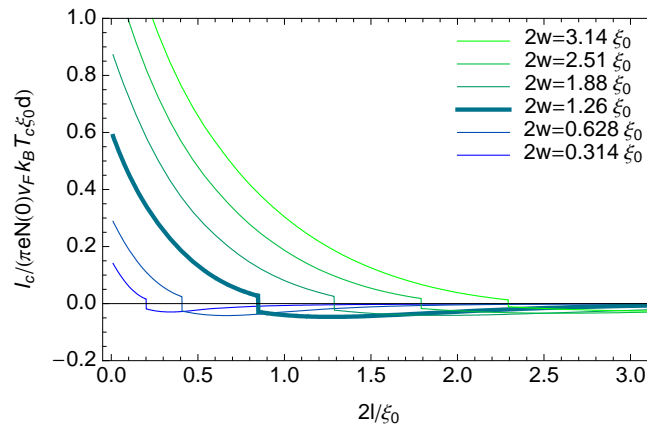
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.14: Einfluss der Länge der Mikrobrücke. Für drei Orientierungen der d -Welle ($\alpha = 0$ in (a), $\alpha = \pi/8$ in (b) sowie $\alpha = \pi/4$ in (c)) ist jeweils der kritische Strom in Abhängigkeit der Länge $2l$ der Mikrobrücke für verschiedene Breiten $2w$ dargestellt. Für die gesamte Abbildung ist $T = 0.5 T_c$.

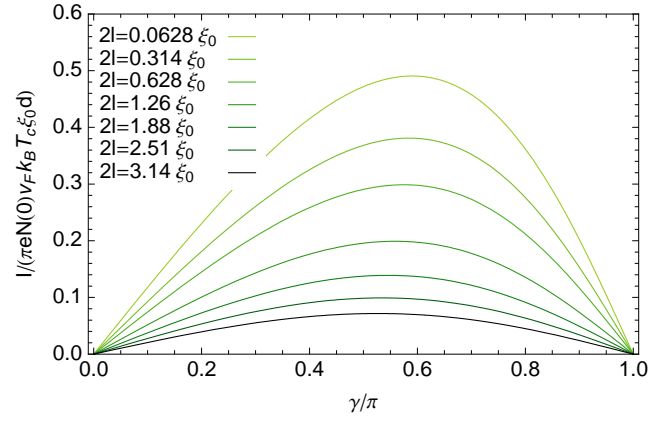
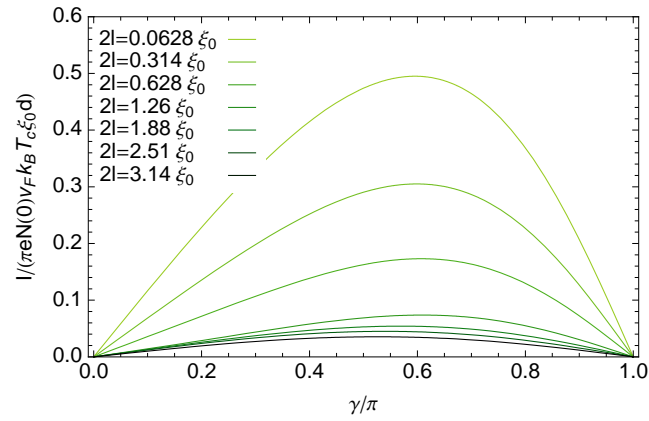
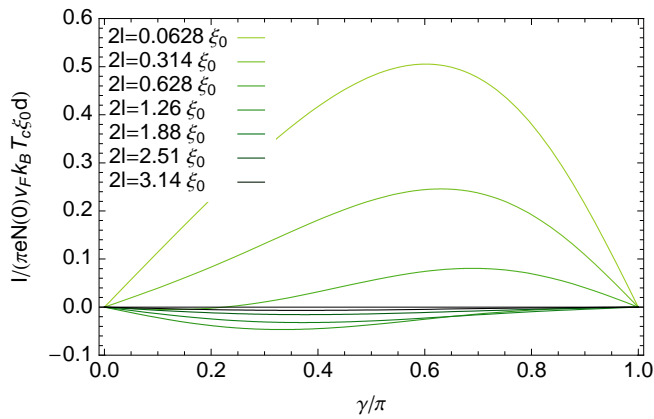
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.15: Für einige Punkte auf den fett hervorgehobenen Kurven aus Abbildung 5.14 zu den Orientierungswinkeln $\alpha = 0, \pi/8$ und $\pi/4$ sind die Strom-Phasen-Beziehungen dargestellt. Entsprechend Abbildung 5.14 ist $T = 0.5 T_c$.

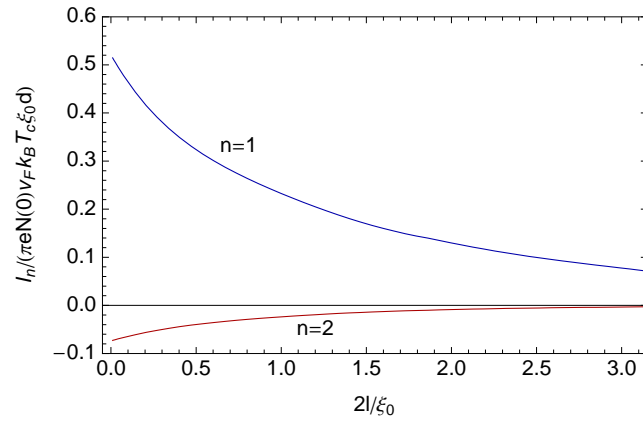
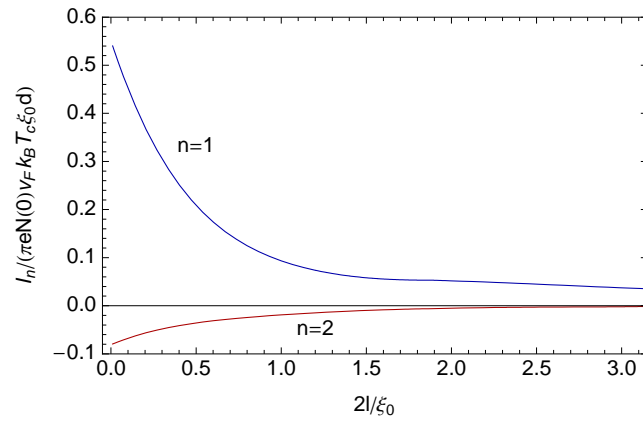
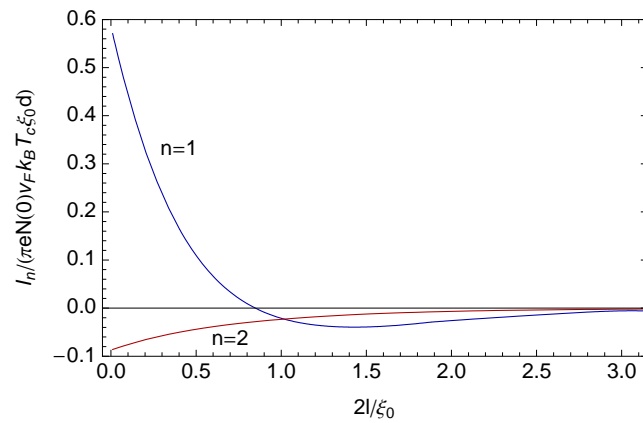
(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = \frac{\pi}{8}$ (c) $\alpha = \frac{\pi}{4}$ 

Abbildung 5.16: Die ersten beiden Koeffizienten I_n , $n = 1, 2$ der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.15 in eine Sinus-Reihe entsprechend Gleichung (5.3). Höhere Koeffizienten sind für die verwendeten Parameter vernachlässigbar klein.

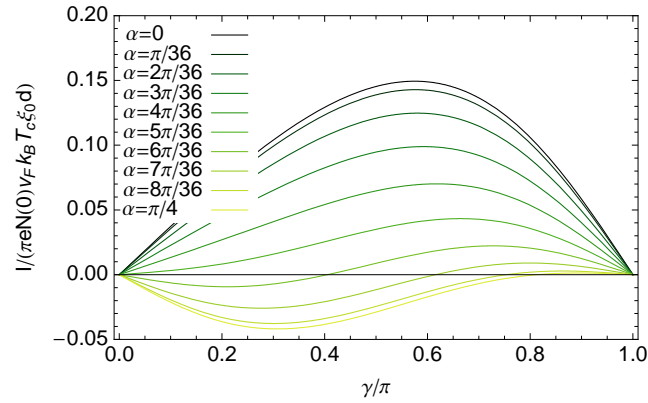
5.6 Einfluss der Orientierung der d -Welle

Zur Untersuchung des Einflusses der Orientierung der d -Welle auf die Strom-Phasen-Beziehungen und den kritischen Strom wird in diesem Abschnitt für eine exemplarische Geometrie ($2l = 2w = 0.628 \xi_0$) bei einer festen Temperatur von $T = 0.5 T_c$ der Orientierungswinkel α variiert. Der Einfluss von α bei verschiedenen Geometrien und Temperaturen wird im nächsten Abschnitt mit Hilfe von 0 - π -Phasendiagrammen diskutiert.

In Abbildung 5.17(a) sind Strom-Phasen-Beziehungen für Orientierungswinkel zwischen $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi/4$ dargestellt. Bei $\alpha = 0$ ist die Strom-Phasen-Beziehung nahezu sinusförmig. Mit wachsendem Winkel α wächst der Beitrag der negativen Ströme und die Strom-Phasen-Beziehungen weichen zunehmend von der näherungsweise sinusförmigen Abhängigkeit ab. Wie in Teilabbildung (b) zu sehen ist, nimmt das absolute Maximum der Strom-Phasen-Beziehung, das den kritischen Strom angibt, entsprechend ab. Der Übergang zu einem negativen kritischen Strom ist unstetig, da das absolute Maximum der Strom-Phasen-Beziehung unstetig von positiven zu negativen Werten springt. In der Umgebung des Überganges zu einem negativen kritischen Strom nehmen die Strom-Phasen-Beziehungen näherungsweise die Form $I = I_c \sin(2\gamma)$ an. Bei einer weiteren Erhöhung des Winkels α wächst der negative Beitrag zum Strom an und der Betrag des negativen kritischen Stromes nimmt zu.

Die Ergebnisse einer Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.17(a) in eine Sinus-Reihe sind in Abbildung 5.18 dargestellt. Der Koeffizient der zweiten Harmonischen I_2 ist nahezu unabhängig von der Orientierung. Der Koeffizient der ersten Harmonischen I_1 hingegen bestimmt das Verhalten des kritischen Stromes. Der Vorzeichenwechsel von I_1 gibt direkt den Vorzeichenwechsel des kritischen Stromes an. In der direkten Umgebung des Vorzeichenwechsels von I_1 wird der Beitrag von I_2 dominant und der kritische Strom wechselt unstetig das Vorzeichen.

(a)



(b)

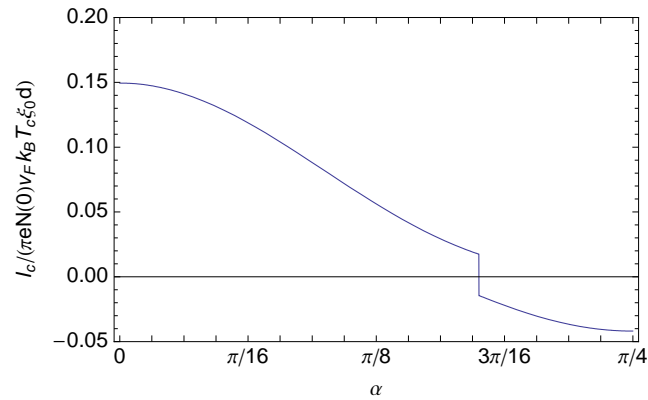


Abbildung 5.17: Einfluss der Orientierung der d -Welle für $2l = 2w = 0.628 \xi_0$ und $T = 0.5 T_c$. In (a) sind die Strom-Phasen-Beziehungen für verschiedene Werte von α dargestellt, in (b) die entsprechenden kritischen Ströme.

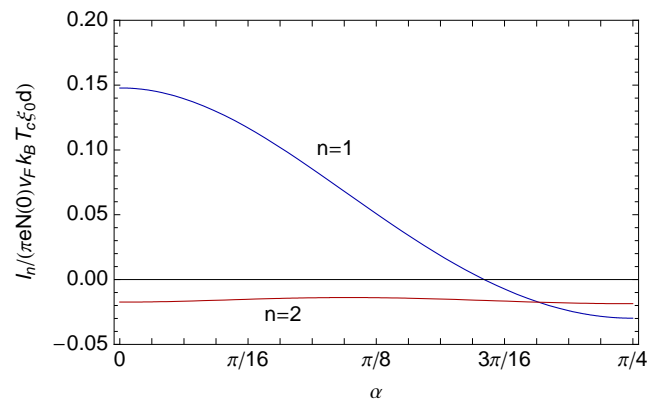


Abbildung 5.18: Die ersten beiden Koeffizienten I_n , $n = 1, 2$ der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 5.17(a) in eine Sinus-Reihe entsprechend Gleichung (5.3).

5.7 0- π -Phasendiagramme

Da die Strom-Phasen-Beziehungen und der kritische Strom der Mikrobrücke im Fall des d -Wellen-Supraleiters von vier Parametern abhängen, ist eine übersichtliche Darstellung der Ergebnisse in zusammenfassenden Abbildungen äußerst nützlich. In den vorhergehenden Abschnitten wurden die vier Parameter, gegeben durch die drei geometrischen Parameter, Länge $2l$, Breite $2w$ und Orientierungswinkel α , sowie die Temperatur T , einzeln variiert, während die anderen Parameter festgehalten wurden. Die Darstellung lässt sich jedoch übersichtlicher fassen, wenn man sich auf das Vorzeichen des kritischen Stromes sowie die Existenz von Nullstellen der Strom-Phasen-Beziehung beschränkt. Diese Charakterisierung eines Josephson-Kontaktes fußt auf der Änderung der Freien Energie $\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0)$ des Kontaktes durch eine Änderung der eichinvarianten Phasendifferenz γ ,

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma')$$

die bereits in Abschnitt 3.5 diskutiert wurde sowie in Anhang C aus dem mikroskopischen Eilenberger-Funktional abgeleitet wird. Die Existenz von Nullstellen γ_0 der Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ mit $dI(\gamma)/d\gamma|_{\gamma=\gamma_0} > 0$ bestimmt, ob im Grundzustand eine endliche Phasendifferenz $\gamma_0 \neq 0$ vorliegt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit treten keine Strom-Phasen-Beziehungen mit mehr als einer Nullstelle im Intervall $0 < \gamma < \pi$ auf. Folglich lassen sich durch die Betrachtung der zwei genannten Kriterien, dem Vorzeichen des kritischen Stromes sowie der Existenz einer Nullstelle der Strom-Phasen-Beziehungen im Intervall $0 < \gamma < \pi$ mit der notwendigen Stabilitätseigenschaft, vier unterschiedliche Zustände des Kontaktes unterscheiden:

- Ist der kritische Strom **positiv** und existiert im Intervall $0 < \gamma < \pi$ **keine Nullstelle** der Strom-Phasen-Beziehung, so ist im Grundzustand die intrinsische Phasendifferenz $\gamma_0 = 0$ und folglich liegt ein „normaler“ oder 0-Josephson-Kontakt vor.
- Ist der kritische Strom **positiv** und es existiert im Intervall $0 < \gamma < \pi$ eine **Nullstelle** der Strom-Phasen-Beziehung bei $\gamma = \gamma_0$ mit $dI(\gamma)/d\gamma|_{\gamma=\gamma_0} > 0$, so folgt im Grundzustand eine intrinsische Phasendifferenz von γ_0 . Folglich liegt ein φ -Josephson-Kontakt vor.
- Ist der kritische Strom **negativ** und es existiert im Intervall $0 < \gamma < \pi$ **keine Nullstelle** der Strom-Phasen-Beziehung, so ist die intrinsische Phasendifferenz im Grundzustand $\gamma_0 = \pi$ und folglich liegt ein π -Josephson-Kontakt vor.
- Ist der kritische Strom **negativ** und es existiert im Intervall $0 < \gamma < \pi$ eine **Nullstelle** der Strom-Phasen-Beziehung bei $\gamma = \gamma_0$ mit $dI(\gamma)/d\gamma|_{\gamma=\gamma_0} > 0$, so folgt im Grundzustand eine intrinsische Phasendifferenz von γ_0 . Damit liegt auch in diesem Fall ein φ -Josephson-Kontakt vor.

Trägt man die Abgrenzungen dieser vier Fälle über zwei der vier genannten Parameter ($2l$, $2w$, α , T) auf, so erhält man Phasendiagramme, die im Folgenden als 0- π -Phasendiagramme bezeichnet werden. Diese 0- π -Phasendiagramme stellen die Eigenschaften des Kontaktes, insbesondere das Vorzeichen des kritischen Stromes sowie die intrinsische Phasendifferenz γ_0 , zusammenfassend dar. Die in Anhang C mikroskopisch abgeleitete Verknüpfung zwischen der Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$ und der Änderung der Freien Energie $\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0)$ eines Josephson-Kontaktes stellt die 0- π -Phasendiagramme auf eine fundierte Basis.

In den vorhergehenden Abschnitten hat sich gezeigt, dass der kritische Strom für die Winkel $\alpha = 0$ und $\alpha = \pi/8$ nie negative Werte annimmt. Deshalb wird im ersten dargestellten 0- π -Phasendiagramm in Abbildung 5.19 zunächst der Orientierungswinkel mit $\alpha = \pi/4$ fixiert. In diesem Phasendiagramm werden die vier möglichen Zustände für eine feste Temperatur von $T = 0.5 T_c$ über den Parametern Länge und Breite der Mikrobrücke aufgetragen.

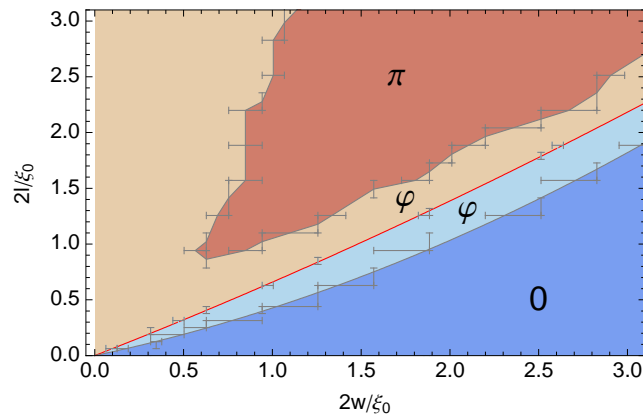


Abbildung 5.19: 0- π -Phasendiagramm bei einem festen Orientierungswinkel von $\alpha = \pi/4$ und einer festen Temperatur von $T = 0.5T_c$ für die Variation der Breite $2w$ sowie der Länge $2l$ der Mikrobrücke. Die rote Linie grenzt die Bereiche positiven kritischen Stromes (hellblau, dunkleres Blau) von den Bereichen negativen kritischen Stromes (helleres und dunkleres Braun) ab. Die tatsächlich berechneten Punkte sind grau eingezeichnet, wobei sich die Fehlerbalken aus dem Abstand der Längen und Breiten ergeben, für die das S-N-S-Modell (5.2) ausgewertet wurde.

Die rote Linie in Abbildung 5.19 grenzt die Bereiche positiven und negativen kritischen Stromes ab. In dunklerem Blau ist der Bereich eingezeichnet, in dem ein 0-Josephson-Kontakt realisiert wird. Der Bereich eines π -Josephson-Kontaktes ist in dunklerem Braun dargestellt. In den jeweils helleren Schattierungen sind die Bereiche gefärbt, in denen ein φ -Josephson-Kontakt auftritt.

Die Werte für den Übergang zwischen positivem und negativem kritischem Strom wurden aus den Abbildungen 5.11 und 5.14 extrahiert. Für die Abgrenzung der φ -Bereiche wurde eine große Anzahl an Strom-Phasen-Beziehungen berechnet und bezüglich des Auftretens einer Nullstelle untersucht. Es wird durch diese Darstellung deutlich, dass bei einer Orientierung von $\alpha = \pi/4$ bei großer Länge der Mikrobrücke (im Vergleich zur Breite) ab einer bestimmten Länge immer ein π -Josephson-Kontakt resultiert, während bei kleiner Länge der 0-Zustand eintritt. Des Weiteren zeigt sich, dass ein φ -Josephson-Kontakt in der Umgebung des Überganges zwischen positivem und negativem kritischem Strom auftritt. Zusätzlich zeigt dieses erste 0- π -Phasendiagramm, dass bei kleinen Breiten der Engstelle für alle Längen der φ -Zustand realisiert wird.

Im nächsten Schritt stellt sich die Frage, inwiefern dieses Verhalten von der Temperatur abhängt. Folglich wird in den nächsten vier gezeigten 0 - π -Phasendiagrammen in Abbildung 5.20 weiterhin der Orientierungswinkel mit $\alpha = \pi/4$ festgehalten, während jeweils die Breite der Engstelle $2w$ und die Temperatur T variiert werden. Die vier 0 - π -Phasendiagramme in Abbildung 5.20 beziehen sich dabei auf vier unterschiedliche Werte der Länge der Engstelle $2l$.

Betrachtet man die vier 0 - π -Phasendiagramme in Abbildung 5.20, so sieht man, dass die Temperatur nur einen sehr geringen Einfluss auf das Vorzeichen des kritischen Stromes hat. Nur für einen sehr engen Bereich an Breiten $2w$ liegt ein Übergang zwischen positivem und negativem kritischem Strom vor. Dieses Verhalten wurde auch schon in Abschnitt 5.2, in dem die Temperatur variiert wurde, festgestellt.

Bei allen vier 0 - π -Phasendiagrammen in Abbildung 5.20 zeigt sich, dass bei hohen Temperaturen aufgrund des Verschwindens höherer Harmonischer nur ein sehr schmaler φ -Bereich in der Umgebung des Überganges zwischen positivem und negativem kritischem Strom vorliegt. Allerdings tritt auch bei hohen Temperaturen bei sehr kleinen Breiten der Mikrobrücke ein φ -Josephson-Kontakt auf. Dies folgt aus der Geometrie der Mikrobrücke. Bei allen Breiten der Mikrobrücke $2w$ fließen bei einer Orientierung von $\alpha = \pi/4$ die rückfließenden Ströme an den Oberflächen der Geometrie (an den Seiten der Engstelle). Gleichzeitig fließen bei allen Breiten im Zentrum der Engstelle normale Transportströme. Folglich liegen bei der rechtwinkligen Mikrobrücke nie ausschließlich rückfließende Ströme vor und nur im Grenzfall $T \rightarrow T_c$ werden die Strom-Phasen-Beziehungen sinusförmig.

Bei tieferen Temperaturen verbreitert sich der φ -Bereich in der Umgebung des Überganges zwischen positivem und negativem kritischem Strom und der π -Bereich verschwindet. Dies zeigt deutlich, dass bei tiefen Temperaturen höhere Harmonische die Strom-Phasen-Beziehung dominieren. Diese Tatsache wurde bereits bei der Entwicklung der Strom-Phasen-Beziehungen in eine Sinus-Reihe festgestellt (vgl. Abb. 5.7).

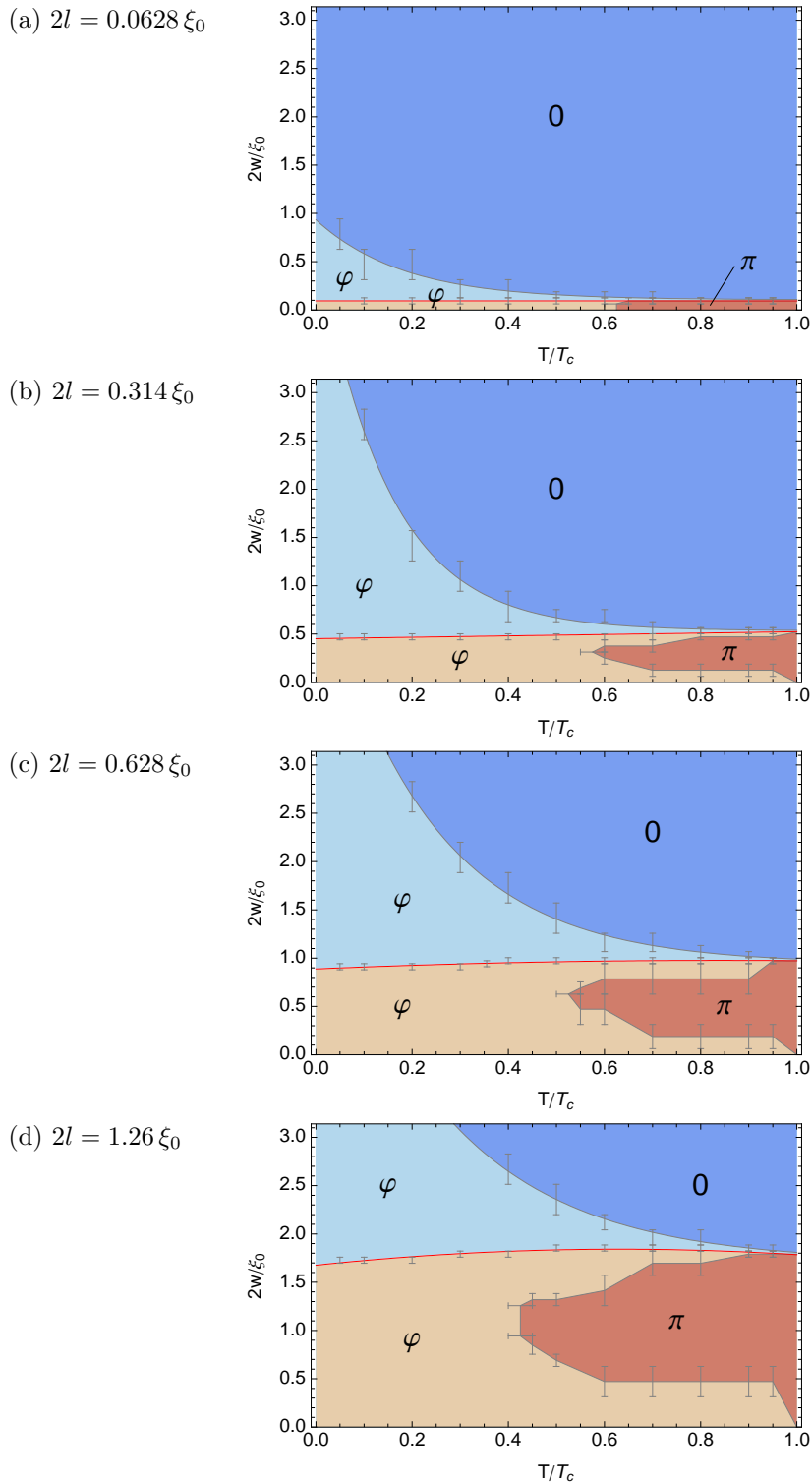


Abbildung 5.20: 0- π -Phasendiagramme bei einem festen Orientierungswinkel von $\alpha = \pi/4$ für die Variation der Breite der Engstelle $2w$ sowie der Temperatur T . Es sind vier Phasendiagramme für verschiedene Längen der Engstelle $2l$ abgebildet. Die rote Linie grenzt die Bereiche positiven kritischen Stromes (hellblau, dunkleres Blau) von den Bereichen negativen kritischen Stromes (helleres und dunkleres Braun) ab. Die tatsächlich berechneten Punkte sind grau eingezeichnet, wobei sich die Fehlerbalken aus dem Abstand der ausgewerteten Längen und Breiten ergeben.

Aus den $0-\pi$ -Phasendiagrammen für die Parameter Breite $2w$ und Temperatur T in Abbildung 5.20 sowie Abschnitt 5.2 ergibt sich, dass die Temperatur nur einen sehr schwachen Einfluss auf den Übergang zwischen positivem und negativem kritischem Strom hat. Deshalb werden in Abbildung 5.21 vier $0-\pi$ -Phasendiagramme gezeigt, bei denen für eine feste Temperatur von $T = 0.5T_c$ der Orientierungswinkel α variiert wird. Die vier gezeigten $0-\pi$ -Phasendiagramme beziehen sich dabei wieder, entsprechend der vorhergehenden Abbildung 5.20, auf vier unterschiedliche Längen der Mikrobrücke. Damit kann der Einfluss des Orientierungswinkels α genauer untersucht werden und es können zusammenfassende Ergebnisse gezeigt werden, die die exemplarische Darstellung zum Einfluss des Orientierungswinkels aus Abschnitt 5.6 verallgemeinern.

Bei einem Winkel von $\alpha = \pi/4$ zeigen die $0-\pi$ -Phasendiagramme in Abbildung 5.21 die Ergebnisse der vorherigen $0-\pi$ -Phasendiagramme aus Abbildung 5.20 bei der Temperatur von $T = 0.5T_c$. Für einen bestimmten Wert der Breite der Engstelle $2w$ wird der Bereich an Orientierungswinkeln α , für den der φ -Zustand realisiert wird, maximal. Für kleinere und größere Breiten $2w$ ist der φ -Bereich auf einen kleineren Winkelbereich nahe $\alpha = \pi/4$ eingeschränkt. Der φ -Bereich im $0-\pi$ -Phasendiagramm verschiebt sich mit zunehmender Länge der Engstelle $2l$ zu größeren Breiten wobei die Form des Bereiches näherungsweise erhalten bleibt.

Weitere Testrechnungen haben gezeigt, dass die $0-\pi$ -Phasendiagramme für die Parameter α und $2w$, die in Abbildung 5.21 für eine feste Temperatur von $T = 0.5T_c$ gezeigt wurden, nur sehr schwach von der Temperatur abhängen. Deshalb wird auf die Darstellung der entsprechenden Ergebnisse für verschiedene Temperaturen verzichtet.

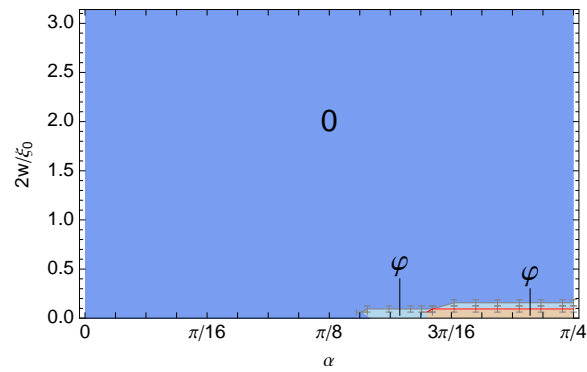
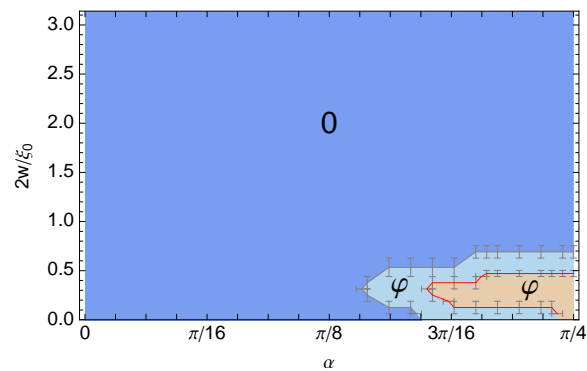
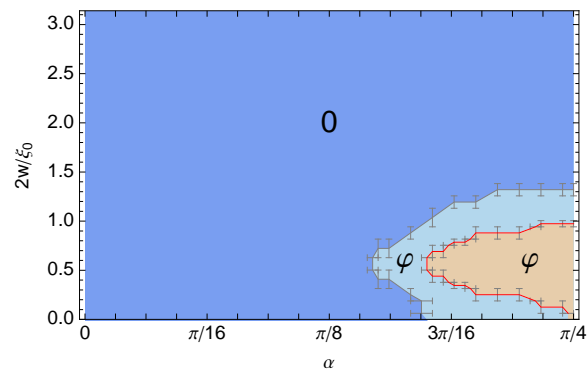
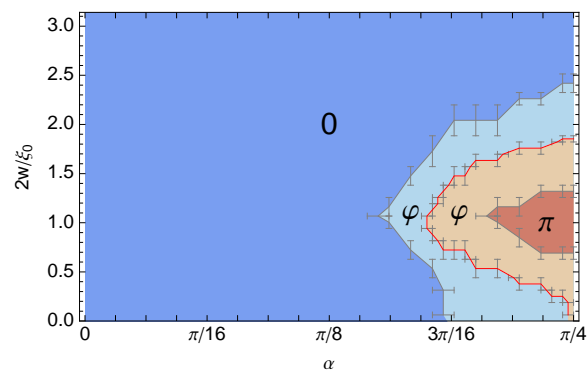
(a) $2l = 0.0628 \xi_0$ (b) $2l = 0.314 \xi_0$ (c) $2l = 0.628 \xi_0$ (d) $2l = 1.26 \xi_0$ 

Abbildung 5.21: 0- π -Phasendiagramme bei einer festen Temperatur von $T = 0.5T_c$ für die Variation der Breite der Engstelle $2w$ sowie des Orientierungswinkels α . Entsprechend Abbildung 5.20 sind vier Phasendiagramme für verschiedene Längen der Engstelle $2l$ abgebildet. Darstellung entsprechend Abbildung 5.20.

Kapitel 6

d -Wellen-Supraleiter: Geometrischer π -Josephson-Kontakt

Im letzten Kapitel wurde eine rechtwinklige Mikrobrücke bestehend aus einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung untersucht. Dabei hatte sich gezeigt, dass bei einer geeigneten Orientierung der d -Welle bezüglich der Geometrie der Mikrobrücke ein Josephson-Kontakt mit einer endlichen intrinsischen Phasendifferenz und einem negativen kritischen Strom folgt. Des Weiteren wurde der Zusammenhang zwischen dem Auftreten von gebundenen Andreev-Zuständen in der Engstelle und dem Auftreten von rückfließenden Oberflächenströmen nachgewiesen, die zu negativen kritischen Strömen führen. Allerdings tritt im Fall der rechtwinkligen Mikrobrücke eine endliche intrinsische Phasendifferenz nur für bestimmte geometrische Verhältnisse und bestimmte Temperaturen auf.

In diesem Kapitel wird eine spezielle Geometrie vorgeschlagen, bei der das Auftreten der intrinsischen Phasendifferenz wesentlich robuster ist und bei größeren Abmessungen der Engstelle auftritt (siehe Abb. 6.1). Dies wird durch eine Geometrie erreicht, bei der die Trajektorien, die die Engstelle passieren, bevorzugt an einer Oberfläche mit einer Orientierung der Oberflächennormalen bezüglich der d -Welle von $\alpha = \pi/4$ reflektiert werden und somit in der Engstelle für gebundene Andreev-Zustände bei der Energie $E = 0$ mit starkem Gewicht sorgen. Die Eigenschaften dieser speziellen Engstellen-Geometrie werden in diesem Kapitel sowohl anhand selbstkonsistenter Ergebnisse als auch mit einem nicht-selbstkonsistenten Modell für das Paarpotential untersucht.

Die zentralen Ergebnisse dieses Kapitels sind in den Referenzen [117–119] veröffentlicht.

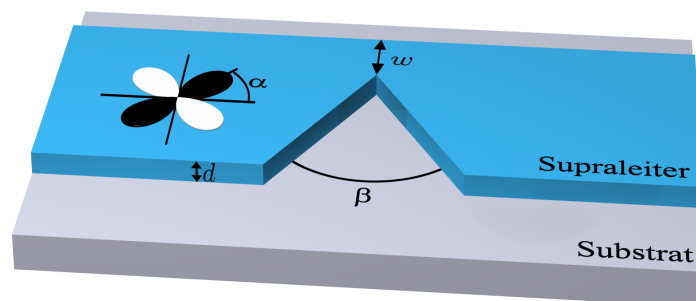


Abbildung 6.1: Geometrie des π -Josephson-Kontaktes bestehend aus einem Streifen eines epitaktisch aufgewachsenen dünnen Films eines Supraleiters mit d -Wellen-Symmetrie mit einer lateralen keilförmigen Einschnürung.

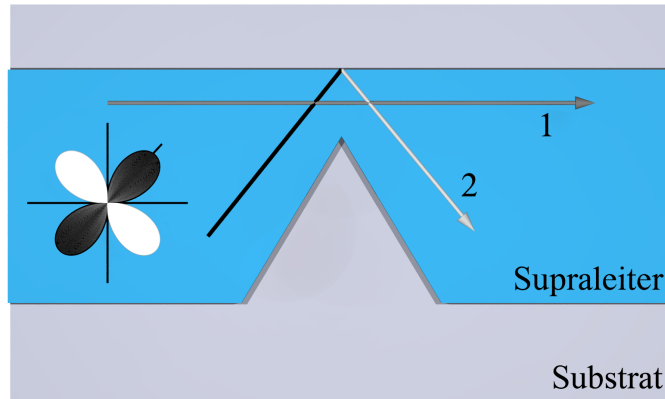


Abbildung 6.2: Zwei Typen von Trajektorien passieren die Engstelle: Trajektorien vom ersten Typ werden nicht reflektiert und durchqueren die Engstelle direkt, während Trajektorien vom zweiten Typ an der geraden Begrenzung der Engstelle reflektiert werden.

6.1 Konzept des geometrischen π -Josephson-Kontaktes

Das Grundkonzept des geometrischen π -Josephson-Kontaktes folgt aus der Feststellung, dass an einer Oberfläche eines Supraleiters mit d -Wellen-Symmetrie, die bezüglich der d -Welle eine Orientierung von $\alpha = \pi/4$ aufweist, starke gebundene Andreev-Zustände bei $E = 0$ vorliegen. Die starke Ausprägung der gebundenen Zustände bei der Energie $E = 0$ begründet sich damit, dass entlang aller Trajektorien, die an der Wand reflektiert werden, ein Vorzeichenwechsel des Paarpotentials vorliegt und somit alle Trajektorien zu den gebundenen Zuständen beitragen. Zudem entstammen die Trajektorien, die an der Oberfläche reflektiert werden, aus Bereichen tief im Inneren des Supraleiters, wo eine voll ausgebildete Energielücke vorliegt.

Die grundlegende Geometrie des aus dieser Überlegung resultierenden speziellen Engstellen-Josephson-Kontaktes besteht aus einem epitaktisch aufgewachsenen Streifen eines d -Wellen-Supraleiters mit \hat{c} -Achsen-Orientierung und einem Orientierungswinkel von $\alpha = \pi/4$ bezüglich der Seiten des Streifens. Engt man diesen Streifen von einer Seite keilförmig ein, so erhält man die gewünschte Geometrie des geometrischen π -Josephson-Kontaktes. Diese Geometrie ist in Abbildung 6.1 skizziert. Die drei definierenden Parameter sind folglich

1. die verbleibende Breite des Streifens w ,
2. die Orientierung der d -Welle α sowie
3. der Öffnungswinkel des Keils β .

Die Engstelle, die durch die keilförmige Einschnürung des Streifens erzeugt wird, bildet den Josephson-Kontakt. Bei geeigneter Wahl der Orientierung der d -Welle sowie einer hinreichend kleinen Breite w folgt ein π -Josephson-Kontakt.

Um die Funktionsweise des geometrischen π -Josephson-Kontaktes zu verstehen, ist es nützlich, die zwei möglichen Verläufe von Quasiteilchen-Trajektorien zu betrachten, die die Engstelle passieren (siehe Abb. 6.2). Die relevanten Trajektorien können die Engstelle entweder direkt (ohne Reflexion, Typ 1) oder mit einer Reflexion an der „oberen“ Kante des Streifens durchqueren (Typ 2).

Trajektorien des ersten Typs sind für $\alpha = \pi/4$ näherungsweise entlang einer Knotenlinie des Paarpotentials orientiert. Damit liegt entlang dieser Trajektorien ein konstantes (schwaches) Paarpotential vor. Folglich führen sie nicht zu gebundenen Andreev-Zuständen und tragen nicht zum Auftreten einer intrinsischen Phasendifferenz bei.

Trajektorien des zweiten Typs hingegen sind vor und nach der Reflexion, also links und rechts der Engstelle, in Richtung benachbarter Keulen der d -Welle orientiert. Damit unterliegen sie im Fall von $\alpha = \pi/4$ bei der Reflexion einem Vorzeichenwechsel des Paarpotentials. Dieser Vorzeichenwechsel führt an der Oberfläche, an der die Reflexion stattfindet, zu gebundenen Andreev-Zuständen bei der Energie $E = 0$.

Die entscheidende Beobachtung ist nun, dass bei hinreichend kleiner verbleibender Breite des Kanals w der Beitrag der reflektierten Trajektorien den Gesamtstrom über die Engstelle dominiert, womit eine endliche intrinsische Phasendifferenz des gesamten Kontaktes verbunden ist.

Die Dominanz der reflektierten Trajektorien wird durch die Ausgestaltung der Geometrie begünstigt. Mit dem Auftreten der gebundenen Andreev-Zustände an der geraden Begrenzung der Geometrie ist eine lokale Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials verbunden. An der Oberfläche verschwindet diese für $\alpha = \pi/4$ vollständig. Mit wachsendem Abstand von der Oberfläche steigt die Amplitude des Paarpotentials auf der Skala der Kohärenzlänge auf den *bulk*-Wert an. Trajektorien des ersten (nicht reflektierten) Typs sind entlang der geraden Begrenzung der Engstelle ausgerichtet. Folglich bewegen sie sich vornehmlich in einem Bereich mit einer unterdrückten Amplitude des Paarpotentials. Dies führt zu einem verringerten Gewicht der Trajektorien vom Typ 1 und damit zu einem verringerten Beitrag zum Gesamtstrom. Das relative Gewicht der reflektierten Trajektorien ist folglich erhöht.

6.2 Repräsentative selbstkonsistente Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden repräsentative selbstkonsistente Ergebnisse gezeigt, die die Eigenschaften der vorgeschlagenen Geometrie illustrieren. Diese repräsentativen Ergebnisse zeigen gleichzeitig nochmals deutlich die charakteristischen Eigenschaften von Supraleitern mit d -Wellen-Symmetrie auf.

Bei einer Orientierung der d -Welle von $\alpha = \pi/4$ und einem Öffnungswinkel des Keils von $\beta = 0$ ist der Normalenvektor aller Oberflächen der Geometrie entlang einer Knotenlinie der d -Welle orientiert (siehe Abb. 6.3). Dies führt zum Auftreten von gebundenen Andreev-Zuständen bei der Energie $E = 0$ und zu einer Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials an allen Oberflächen der Geometrie. In den Abbildungen 6.4(a) und 6.5(a) ist die selbstkonsistent berechnete Amplitude des Paarpotentials für $\alpha = \pi/4$ und $\beta = 0$ bei $T = 0.5 T_c$ bzw. $T = 0.1 T_c$ dargestellt. Die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials sowie der Anstieg auf den *bulk*-Wert auf der Skala der Kohärenzlänge sind deutlich zu erkennen. Gleichzeitig unterscheidet sich die Verteilung der Amplitude des Paarpotentials bei den beiden Temperaturen nur geringfügig.

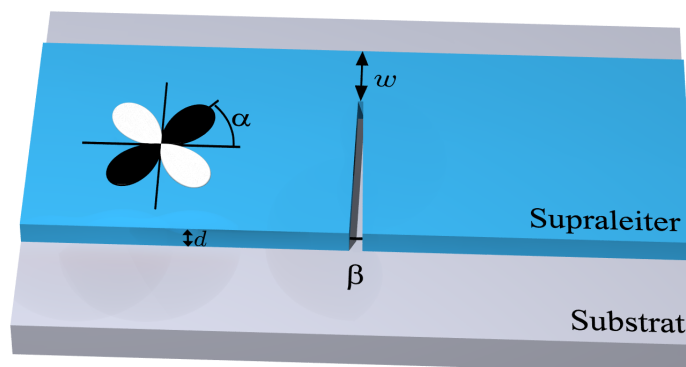
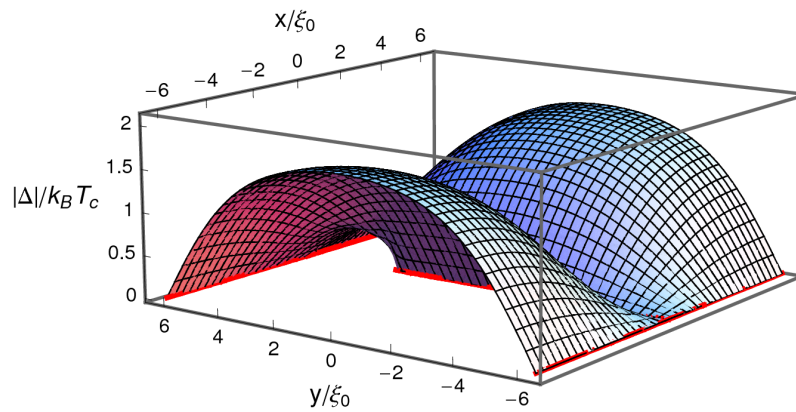
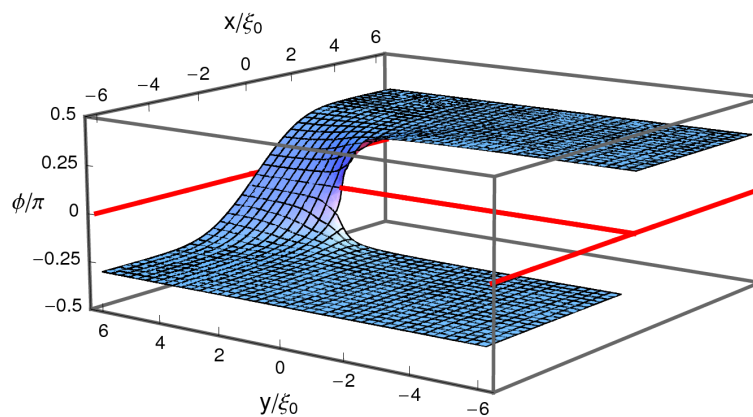


Abbildung 6.3: Skizze eines geometrischen π -Josephson-Kontaktes, bei dem die keilförmige laterale Einschnürung mit einem Öffnungswinkel von $\beta \simeq 0$ zu einem Schlitz reduziert ist.

(a)



(b)



(c)

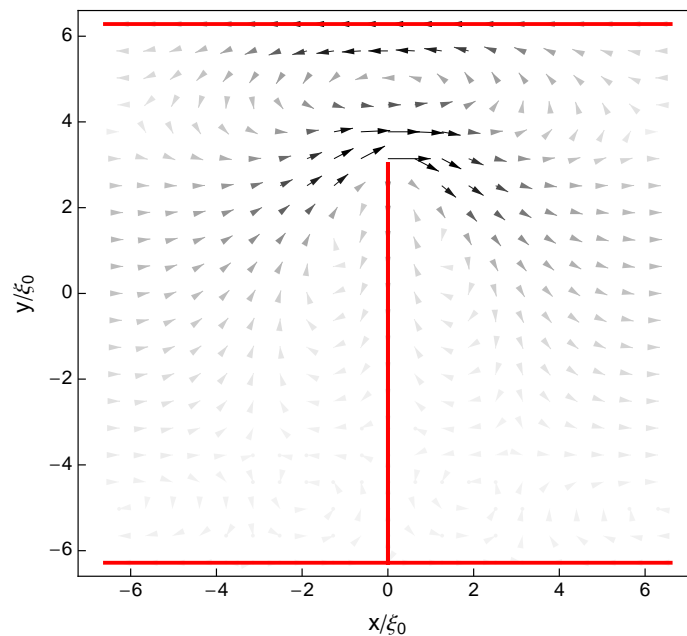
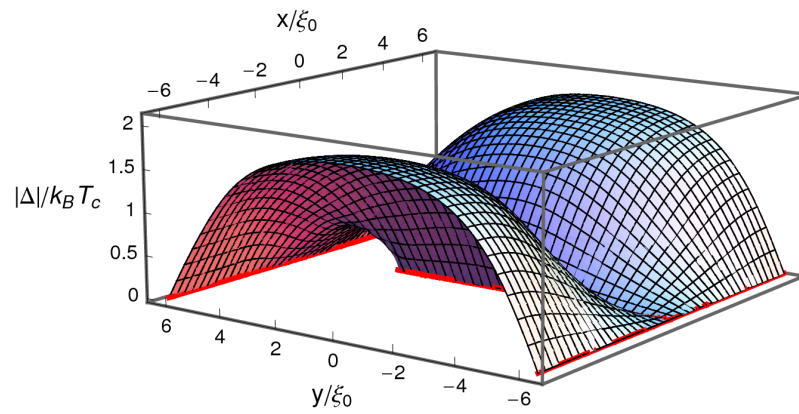
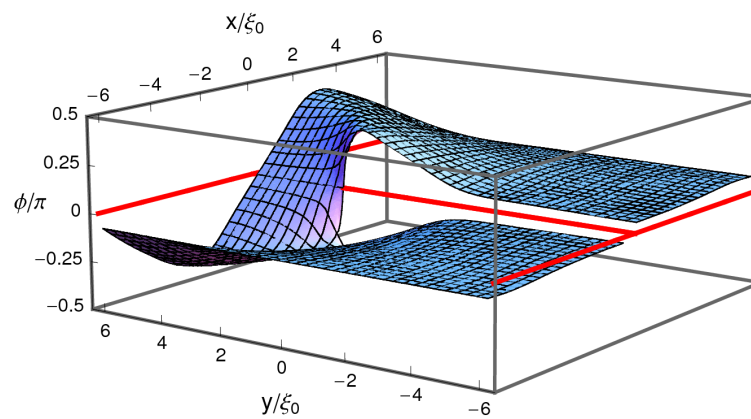


Abbildung 6.4: Amplitude und Phase des Paarpotentials (in (a) und (b)) sowie die Stromdichte (in (c)) beim kritischen Strom für eine Temperatur von $T = 0.5 T_c$. Die Geometrie der Engstelle ist jeweils durch die roten Linien vermerkt. Es ist $\alpha = \pi/4$ sowie $\beta = 0$ entsprechend der Skizze in Abbildung 6.3. Länge und Breite der gesamten betrachteten Geometrie sind zu $L = W = 12.6 \xi_0$ gewählt. In (c) ist die Graustufung proportional zum Absolutwert der Stromdichte und es wurde nur jeder fünfte tatsächlich berechnete Punkt eingezeichnet.

(a)



(b)



(c)

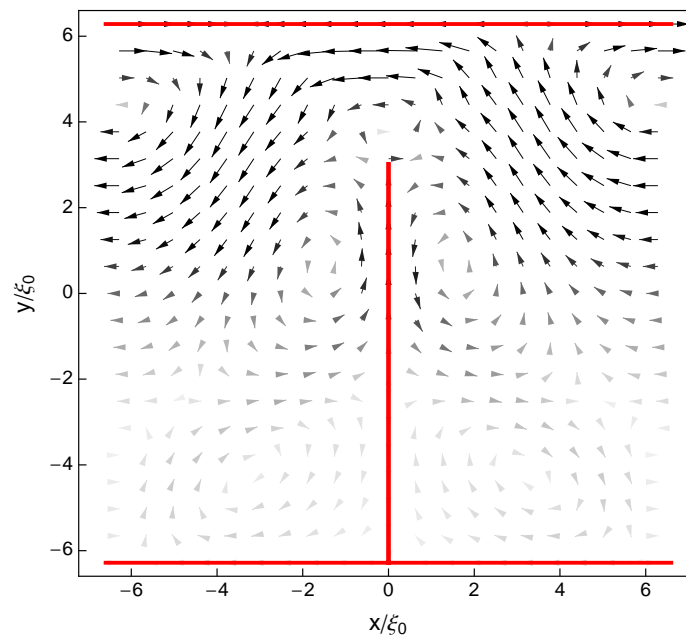


Abbildung 6.5: Amplitude und Phase des Paarpotentials (in (a) und (b)) sowie die Stromdichte (in (c)) beim kritischen Strom für eine Temperatur von $T = 0.1 T_c$. Darstellung und sonstige Parameter entsprechend Abbildung 6.4.

In den Teilabbildungen (b) der selben Abbildungen sind die entsprechenden Verteilungen der Phase des Paarpotentials dargestellt. Die beiden Abbildungen 6.4 und 6.5 beziehen sich auf Phasendifferenzen γ , die dem kritischen Strom entsprechen. Bei der höheren Temperatur in Abbildung 6.4 steigt die Phase monoton vom „linken“ Ende der Geometrie ($x < 0$) zum „rechten“ Ende ($x > 0$) an. Bei der tieferen Temperatur in Abbildung 6.5 hingegen bildet sich eine intrinsische Phasendifferenz aus und die Variation der Phase ist nicht monoton. Damit unterscheidet sich das Verhalten der selben Geometrie bei den beiden exemplarisch verwendeten Temperaturen grundlegend.

Das Auftreten einer intrinsischen Phasendifferenz führt gleichzeitig zu einem negativen Gesamtstrom. Die Stromverteilungen bei den beiden Temperaturen (jeweils beim kritischen Strom) sind in den Teilabbildungen (c) der beiden Abbildungen 6.4 und 6.5 dargestellt. Bei $T = 0.5 T_c$ fließt der über einen Querschnitt integrierte Gesamtstrom in positiver Richtung (von „links“ nach „rechts“), während sich die Richtung des Gesamtstromes bei $T = 0.1 T_c$ umkehrt. Entsprechend der Phasenverteilungen unterscheiden sich auch die Stromverteilungen bei den beiden verwendeten Temperaturen grundlegend. Durch das Wechselspiel von normalen Transportströmen und rückfließenden Oberflächenströmen ergeben sich komplexe Stromverteilungen, zum Teil mit lokalen (nicht quantisierten) Wirbeln und starken Variationen der Stromdichte. Der über einen beliebigen Querschnitt integrierte Gesamtstrom charakterisiert das Verhalten des Josephson-Kontaktes zusammenfassend.

Interessanterweise unterscheidet sich die Verteilung der Amplitude des Paarpotentials trotz der vollkommen unterschiedlichen Konfigurationen der Phase und der Stromdichte bei den beiden verwendeten Temperaturen nur unwesentlich. Aus den Abbildungen 6.4(a) und 6.5(a) wird deutlich, dass die Trajektorien, die die Engstelle ohne Reflexion passieren, Bereiche mit verringerter Amplitude des Paarpotentials durchlaufen. Folglich ist ihr relatives Gewicht verringert und das Auftreten einer intrinsischen Phasendifferenz ist begünstigt.

6.3 Geometrie und Temperatur: selbstkonsistente Ergebnisse

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der geometrischen Parameter sowie der Temperatur auf das Verhalten des geometrischen π -Josephson-Kontaktes anhand selbstkonsistent berechneter Ergebnisse untersucht. Die Orientierung der d -Welle wird dabei auf $\alpha = \pi/4$ fixiert, so dass die gebundenen Andreev-Zustände und entsprechend die rückfließenden Oberflächenströme maximal ausgeprägt sind.

Zunächst wird ein Öffnungswinkel des Keils von $\beta = 0$ betrachtet. In Abbildung 6.6 werden selbstkonsistent berechnete Strom-Phasen-Beziehungen für Temperaturen zwischen $T = 0.1 T_c$ und $0.9 T_c$ für vier verschiedene Breiten der Engstelle w gezeigt.

In Teilabbildung 6.6(a) wird eine sehr kleine Breite von $w = 0.314 \xi_0$ betrachtet. In diesem Fall sind die Ströme bei allen Temperaturen und allen Werten der Phasendifferenz γ negativ. Folglich resultiert bei allen Temperaturen ein negativer kritischer Strom und ein π -Josephson-Kontakt.

Mit zunehmender Breite der Engstelle treten zunehmend positive Ströme auf, zunächst vornehmlich bei hohen Temperaturen. Dies markiert den Übergang von einem π -Josephson-Kontakt zu einem normalen oder 0-Josephson-Kontakt. In Teilabbildung (b), für die eine Breite von $w = 3.14 \xi_0$ verwendet wurde, sind die Ströme bei tiefen Temperaturen immer noch für alle Phasendifferenzen negativ, während sie bei höheren Temperaturen bereits für alle Phasendifferenzen positiv sind.

Bei weiter zunehmender Breite der Engstelle werden die negativen Ströme immer schwächer und die positiven Ströme dominieren. In Teilabbildung (c) ($w = 3.77 \xi_0$) treten bereits nur noch bei den niedrigsten Temperaturen negative Ströme auf. In Teilabbildung (d) ($w = 6.28 \xi_0$) sind die kritischen Ströme bei allen Temperaturen positiv.

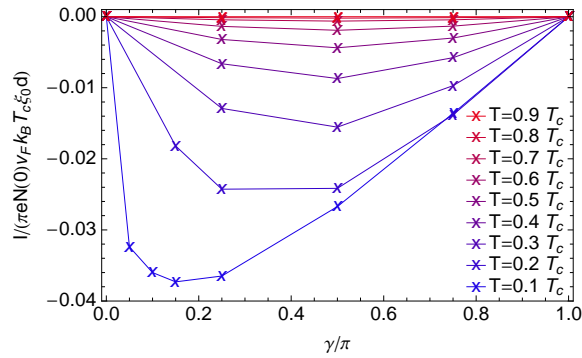
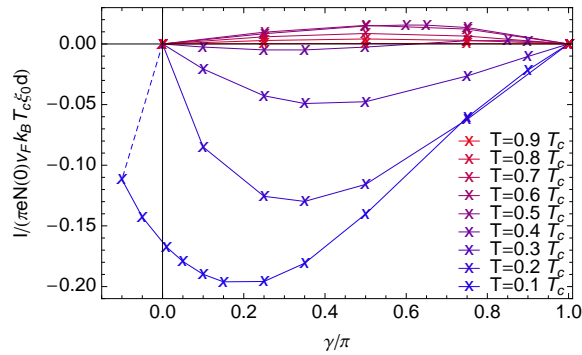
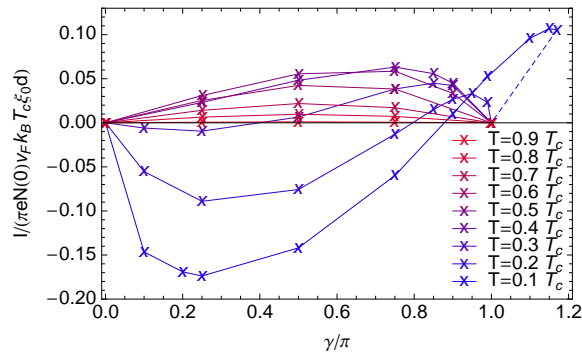
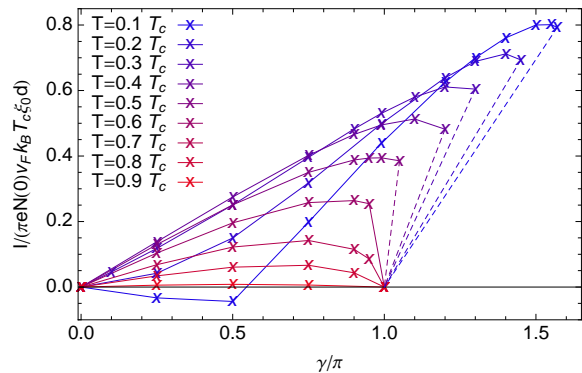
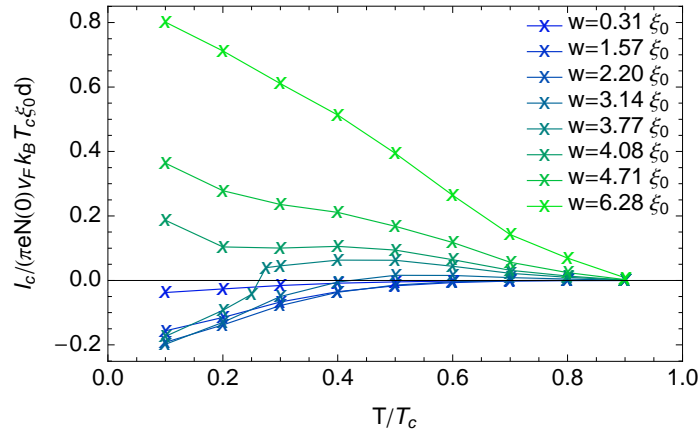
(a) $w = 0.314 \xi_0$ (b) $w = 3.14 \xi_0$ (c) $w = 3.77 \xi_0$ (d) $w = 6.28 \xi_0$ 

Abbildung 6.6: Selbstkonsistent berechnete Strom-Phasen-Beziehungen für einen Keilwinkel von $\beta = 0$. In den vier Teilabbildungen sind Strom-Phasen-Beziehungen für vier verschiedene Breiten der Engstelle w und jeweils Temperaturen von $T = 0.1 T_c$ bis $0.9 T_c$ dargestellt. Der Orientierungswinkel der d -Welle ist auf $\alpha = \pi/4$ fixiert.

(a)



(b)

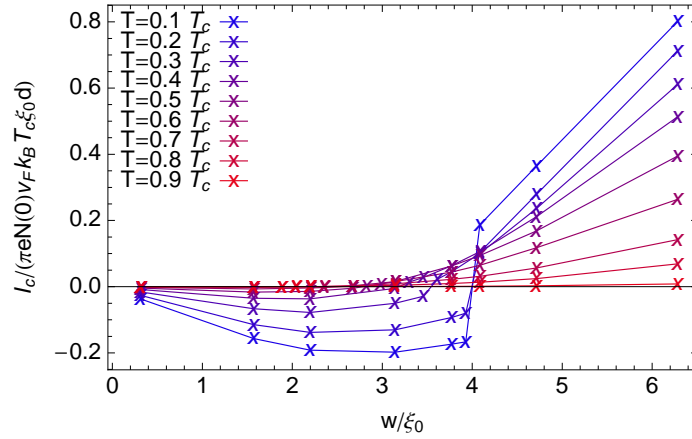


Abbildung 6.7: Der selbstkonsistent berechnete kritische Strom für den Fall $\beta = 0$. In (a) sind die Ergebnisse bei fester Breite der Engstelle w über der Temperatur aufgetragen, während in (b) die selben Daten bei festgehaltener Temperatur über der Breite dargestellt sind. Es ist $\alpha = \pi/4$.

Extrahiert man aus den Strom-Phasen-Beziehungen entsprechend Abbildung 6.6 die kritischen Ströme, so lässt sich das Verhalten des Josephson-Kontaktes zusammenfassend darstellen. In Abbildung 6.7 sind entsprechende Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnungen für den Keilwinkel $\beta = 0$ zusammengestellt. In Teilabbildung (a) und (b) sind jeweils die selben Daten auf zwei unterschiedlichen Arten dargestellt. In (a) sind die kritischen Ströme für verschiedene Werte der Breite der Engstelle w über der Temperatur T aufgetragen, während in (b) die selben Daten bei festgehaltener Temperatur über der Breite der Engstelle dargestellt sind. Aus den beiden Teilabbildungen folgt, dass der π -Zustand bei kleinen Werten der Breite der Engstelle und vornehmlich bei tiefen Temperaturen auftritt. Bei sehr kleinen Werten der Breite der Engstelle überlebt der π -Zustand allerdings bis zur höchsten betrachteten Temperatur von $T = 0.9 T_c$.

Als zentrales Resultat dieser Daten kann festgehalten werden, dass negative kritische Ströme bei tiefen Temperaturen bereits bei Breiten unterhalb von $w \simeq 4 \xi_0$ auftreten.

In Abbildung 6.8 sind selbstkonsistent berechnete Daten für den kritischen Strom für einen Öffnungswinkel des Keils von $\beta = \pi/2$ dargestellt. Es zeigt sich, dass das prinzipielle Verhalten auch bei vergrößerten Keilwinkeln unverändert gilt. Allerdings sind geringfügig kleinere Breiten w notwendig, um den Bereich negativer kritischer Ströme zu erreichen.

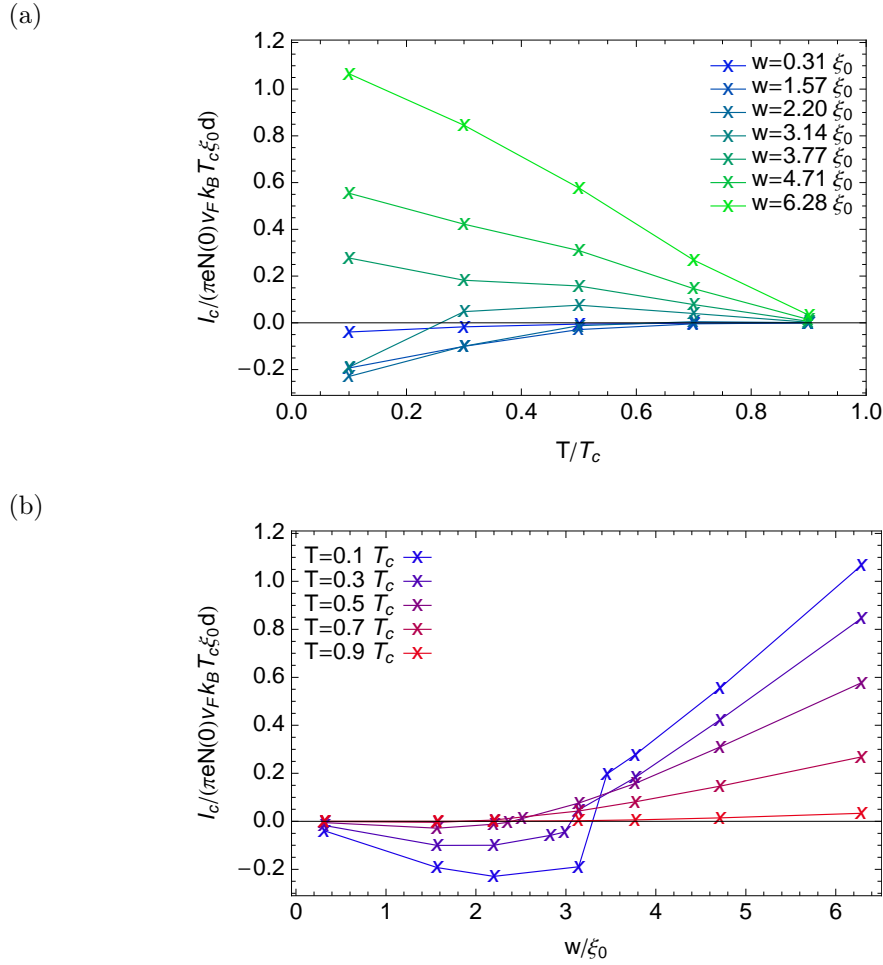


Abbildung 6.8: Der selbstkonsistent berechnete kritische Strom für den Fall $\beta = \pi/2$ bei einem Orientierungswinkel von $\alpha = \pi/4$. Darstellung entsprechend Abbildung 6.7.

Die kleineren notwendigen Breiten für das Erreichen des π -Zustandes für Keilwinkel von $\beta > 0$ sind verständlich, da bei einem vergrößertem Keilwinkel die reflektierten Trajektorien nur noch aus einem kleineren Winkelbereich entstammen können. Damit sind die Beiträge der reflektierten Trajektorien insgesamt abgeschwächt und der π -Zustand wird bei kleineren Breiten realisiert.

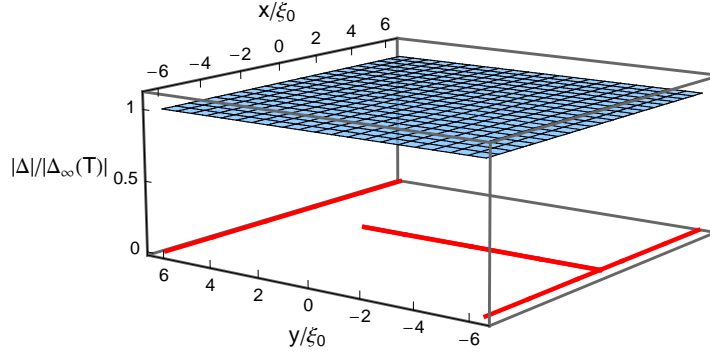
6.4 Geometrie und Temperatur: Stufen-Modell

Um zu verstehen, welchen Einfluss die Selbstkonsistenz der Lösungen auf die Ergebnisse hat, ist es nützlich, diese mit den Ergebnissen eines einfacheren nicht-selbstkonsistenten Modells für das Paarpotential zu vergleichen. Hierzu wird für einen Keilwinkel von $\beta = 0$ im Folgenden ein stufenförmig variierendes Profil untersucht (siehe Abb. 6.9):

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \begin{cases} \Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{-i\gamma/2}, & x < 0 \\ \Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{+i\gamma/2}, & x > 0 \end{cases} \quad (6.1)$$

Das Koordinatensystem wird hierbei entsprechend der Skizze in Abbildung 6.10 gewählt. Dieses Modell berücksichtigt weder die Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials an

(a)



(b)

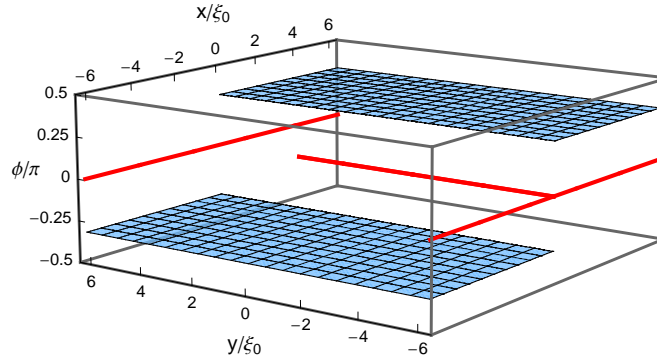


Abbildung 6.9: Skizze zum nicht-selbstkonsistenten Stufenmodell, Gleichung (6.1). Für die Amplitude des Paarpotentials $|\Delta|$ (in (a)) wird überall der temperaturabhängige *bulk*-Wert angenommen, während für die Phase ϕ eine stufenförmige Variation verwendet wird (in (b)).

den Oberflächen noch die Unterdrückung durch die fließenden Ströme, sondern ausschließlich eine stufenförmige Variation der Phase. Um diese Variation der Phase zu ermöglichen, wird somit eine Entkopplung der beiden Elektroden als Annahme in das Modell eingeführt, während diese Entkopplung im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen aus der Unterdrückung des Paarpotentials in der Engstelle folgt. Dennoch kann dieses einfache Modell qualitativ richtige Ergebnisse für das Verhalten der Engstelle liefern.

Für das Stufenmodell (6.1) können die Riccati-Amplituden unter Verwendung der in Anhang D angegebenen Lösungen der Riccati-Gleichungen für konstante Koeffizienten analytisch berechnet werden. Mit diesen analytischen Ergebnissen kann die Stromgleichung (3.9) gelöst und damit die Stromdichte berechnet werden. Zur Berechnung der Gesamtströme, die über den Kontakt fließen, muss die Stromdichte über den Querschnitt des Kontaktes integriert werden. Somit reicht es aus, die Riccati-Amplituden auf der negativen y -Achse der Geometrie aus Abbildung 6.10 anzugeben.

Für die exemplarisch in Abbildung 6.10 eingezeichnete Trajektorie aus dem Winkelbereich $0 < \theta < \pi/2$ ist die korrekte Lösung für die Riccati-Amplitude $a(s)$ bei $x = 0$, für die die entsprechende Riccati-Differentialgleichung parallel zur Fermi-Geschwindigkeit $\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F)$ gelöst werden muss, der *bulk*-Wert „von links“, also aus dem Bereich $x < 0$. Die entsprechende Riccati-Differentialgleichung für $b(s)$ muss entgegen der Fermi-Geschwindigkeit $\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F)$ gelöst werden. Folglich muss die Reflexion der Trajektorie an der geraden Begrenzungslinie berücksichtigt werden. Von positiven Werten des Trajektorienparameters kommend, ist die Lösung bis zur Reflexion durch den *bulk*-Wert „von rechts“ gegeben, wobei der Winkel durch die Reflexion zu $2\pi - \theta$ wird. Von der Reflexion bis zum Aufpunkt der Trajektorie auf der y -Achse der Geometrie muss dann die Lösung für konstantes Paarpotential aus Anhang D verwendet werden.

Die resultierenden Lösungen für die Riccati-Amplituden $a(s=0)$ und $b(s=0)$ auf der negativen y -Achse der Geometrie werden im Folgenden zusammengestellt. Um die Resultate kompakt anzugeben, sind folgende Definitionen hilfreich:

$$\Omega(n, \theta, T) = \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha)|^2} \quad (6.2)$$

$$a_{L,R}(n, \theta, T) = b_{L,R}^\dagger(n, \theta, T) = \frac{\Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{\mp i\gamma/2}}{\varepsilon_n + \Omega(n, \theta, T)} \quad (6.3)$$

$$\Gamma(n, \theta, T) = \frac{\Delta_\infty(T) \cos(2\theta - 2\alpha) e^{+i\gamma/2}}{2\Omega(n, \theta, T)} \quad (6.4)$$

$$\eta(n, \theta, T) = \frac{2}{\hbar v_F} \Omega(n, \theta, T) \quad (6.5)$$

Die Abhängigkeiten vom Index der Matsubara-Frequenzen n sowie der Temperatur T werden im Folgenden im Sinne der Lesbarkeit unterdrückt.

Für Trajektorien aus dem Winkelbereich $0 < \theta < \pi/2$ folgt:

$$a(s=0) = a_L(\theta) \quad (6.6)$$

$$b(s=0) = \left[\frac{\exp[\eta(\theta)l]}{b_R(2\pi - \theta) - b_R(\theta)} + \Gamma(\theta) (\exp[\eta(\theta)l] - 1) \right]^{-1} + b_R(\theta) \quad (6.7)$$

Entsprechend gilt für Trajektorien aus dem Winkelbereich $\pi/2 < \theta < \pi$:

$$a(s=0) = a_R(\theta) \quad (6.8)$$

$$b(s=0) = \left[\frac{\exp[\eta(\theta)l]}{b_L(2\pi - \theta) - b_L(\theta)} + \Gamma^\dagger(\theta) (\exp[\eta(\theta)l] - 1) \right]^{-1} + b_L(\theta) \quad (6.9)$$

Für $\pi < \theta < 3\pi/2$:

$$a(s=0) = \left[\frac{\exp[\eta(\theta)l]}{a_L(2\pi - \theta) - a_L(\theta)} + \Gamma^\dagger(\theta) (\exp[\eta(\theta)l] - 1) \right]^{-1} + a_L(\theta) \quad (6.10)$$

$$b(s=0) = b_R(\theta) \quad (6.11)$$

Schließlich für $3\pi/2 < \theta < 2\pi$:

$$a(s=0) = \left[\frac{\exp[\eta(\theta)l]}{a_R(2\pi - \theta) - a_R(\theta)} + \Gamma(\theta) (\exp[\eta(\theta)l] - 1) \right]^{-1} + a_R(\theta) \quad (6.12)$$

$$b(s=0) = b_L(\theta) \quad (6.13)$$

Entsprechend der Skizze in Abbildung 6.10 bezeichnet der Parameter $l = |y_0/\sin\theta|$ die Länge der Strecke zwischen dem Aufpunkt der Trajektorie und dem Schnittpunkt mit der x -Achse.

Zur Berechnung der Strom-Phasen-Beziehungen für das Stufen-Modell muss die Stromgleichung (3.9) mit den angegebenen Lösungen für die Riccati-Amplituden ausgewertet werden. Durch die Auswertung der Stromgleichung auf der negativen y -Achse der Geometrie erhält man zunächst die Stromdichte über den Querschnitt der Engstelle. Integriert man die so erhaltene Stromdichte über den Querschnitt (von $y=0$ bis zur Breite der Engstelle bei $y=-w$), so erhält man den Gesamtstrom. Dieser ist eine Funktion der eichinvarianten Phasendifferenz γ , der Temperatur T , der Breite der Engstelle w sowie des Orientierungswinkels α . Folglich können die Strom-Phasen-Beziehungen für verschiedene Breiten der Engstelle bei verschiedenen Temperaturen berechnet werden.

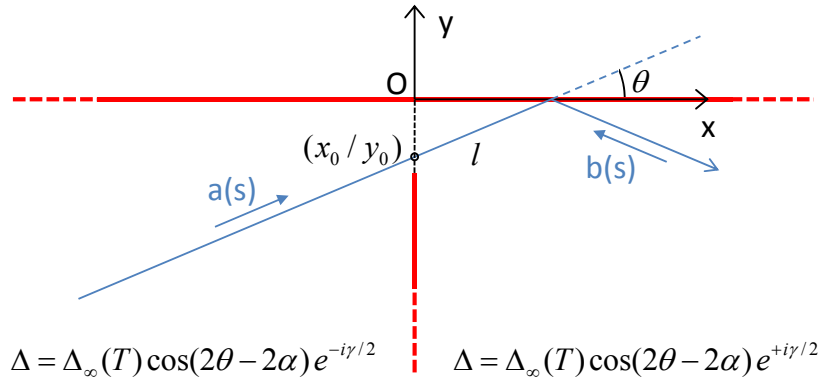


Abbildung 6.10: Skizze zum Stufenmodell für das Paarpotential. Die Riccati-Amplituden $a(s)$ und $b(s)$ für eine exemplarische Trajektorie ausgehend vom Auftreffpunkt $(x_0 = 0, y_0)$ mit dem Winkel θ . Die Länge der Strecke zwischen dem Auftreffpunkt der Trajektorie und der Reflexion an der geraden Begrenzung ist durch $l = |y_0 / \sin \theta|$ gegeben.

In Abbildung 6.11 sind die Strom-Phasen-Beziehungen für das Stufenmodell (6.1) für vier repräsentative Breiten w und verschiedene Temperaturen T bei einem Orientierungswinkel von $\alpha = \pi/4$ dargestellt. Die verwendeten Werte für die Breite w entsprechen den Werten, die bereits für die selbstkonsistenten Ergebnisse in Abbildung 6.6 verwendet wurden. Damit lassen sich die selbstkonsistent berechneten Strom-Phasen-Beziehungen aus Abbildung 6.6 direkt mit den Ergebnissen des Stufenmodells in Abbildung 6.11 vergleichen.

Bei sehr kleiner Breite der Engstelle sind die fließenden Ströme bei allen Werten der Phasendifferenz γ negativ und damit auch die kritischen Ströme. Mit zunehmender Breite findet ein Übergang zu positiven Strömen und auch positiven kritischen Strömen statt, zunächst bei höheren Temperaturen, mit weiter zunehmender Breite auch bei tieferen Temperaturen.

Vergleicht man die Resultate der selbstkonsistenten Rechnungen mit denen des Stufenmodells, so ist zunächst festzustellen, dass das qualitative Verhalten der Strom-Phasen-Beziehungen durch das Stufenmodell korrekt wiedergegeben wird. Es gibt allerdings zwei Punkte, in denen sich die Resultate deutlich unterscheiden:

- Im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen sind mehrdeutige Strom-Phasen-Beziehungen möglich, während im Rahmen des Stufenmodells die Strom-Phasen-Beziehungen immer eindeutig sind.
- Die absoluten Werte der Ströme werden durch das Stufenmodell gegenüber den selbstkonsistenten Resultaten deutlich überschätzt.

Die Eindeutigkeit der Strom-Phasen-Beziehungen im Rahmen des Stufenmodells zeigt deutlich auf, dass die Eindeutigkeit bzw. Mehrdeutigkeit der Strom-Phasen-Beziehungen keine universelle Bedeutung besitzt, sondern von der Beschreibung abhängt. Dies wurde bereits in Abschnitt 4.1 bzw. in Abbildung 4.8 festgestellt, in denen der Einfluss der Länge der gesamten untersuchten Geometrie L im Fall der rechtwinkligen Mikrobrücke betrachtet wurde. Mit zunehmender Länge der gesamten Geometrie werden die Strom-Phasen-Beziehungen zunehmend mehrdeutig, während ab einer bestimmten Mindestlänge der kritische Strom konstant bleibt. Entsprechendes Verhalten wurde auch im Rahmen von selbstkonsistenten Testrechnungen für den geometrischen π -Josephson-Kontakt mit größerer Länge der gesamten Geometrie L festgestellt. Das nicht-selbstkonsistente Stufenmodell kann als Grenzfall der selbstkonsistenten Rechnungen für $L \rightarrow 0$ verstanden werden. Insofern ist es konsequent und plausibel, dass das Stufenmodell immer eindeutige Strom-Phasen-Beziehungen liefert.

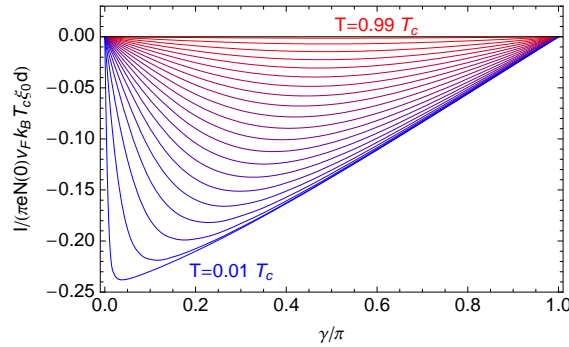
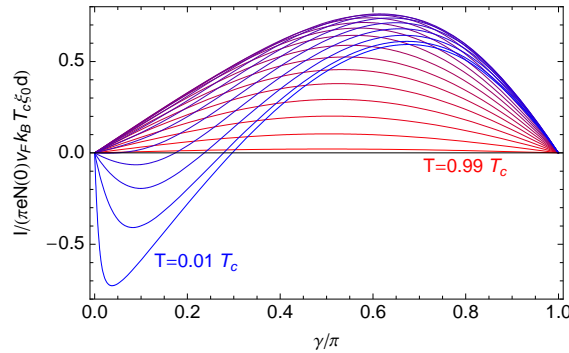
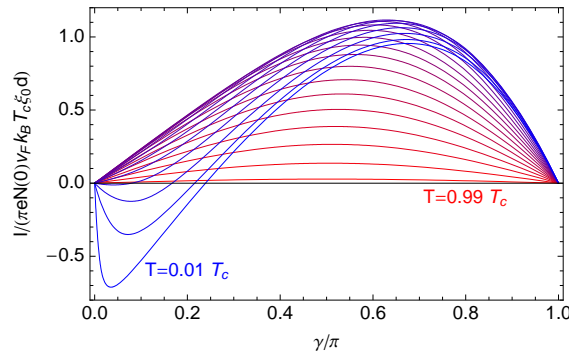
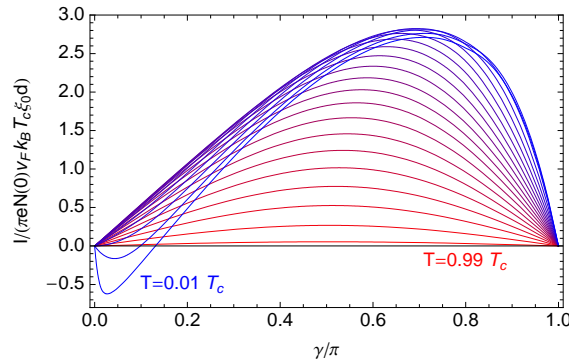
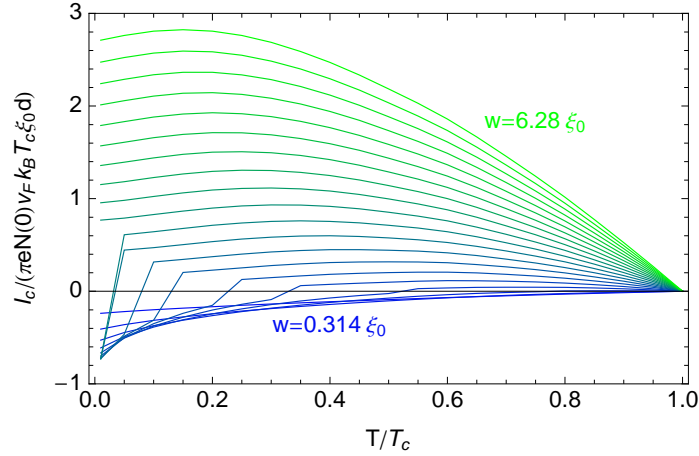
(a) $w = 0.314 \xi_0$ (b) $w = 3.14 \xi_0$ (c) $w = 3.77 \xi_0$ (d) $w = 6.28 \xi_0$ 

Abbildung 6.11: Strom-Phasen-Beziehungen resultierend aus dem Stufenmodell für das Paarpotential. In den vier Teilabbildungen sind Strom-Phasen-Beziehungen für vier verschiedene Breiten der Engstelle w und verschiedene Temperaturen $T/T_c = 0.01, 0.05, 0.1, \dots, 0.9, 0.95, 0.99$ dargestellt. Die Temperatur für die jeweiligen Kurven ist durch die farbliche Abstufung ersichtlich (von blau=„kalt“ bis rot=„warm“). Der Orientierungswinkel ist $\alpha = \pi/4$.

(a)



(b)

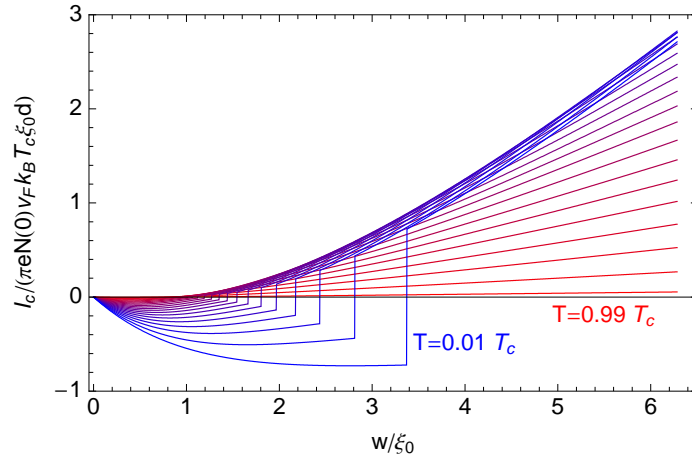


Abbildung 6.12: Der kritische Strom resultierend aus dem Stufenmodell für das Paarpotential. In (a) sind die Ergebnisse bei fester Breite der Engstelle w über der Temperatur aufgetragen, während in (b) die selben Daten bei festgehaltener Temperatur über der Breite dargestellt sind. In (a) wurden Breiten von $w = 0.314 \xi_0$ (blau) bis $w = 6.28 \xi_0$ (grün) in Schritten von $0.314 \xi_0$ verwendet. In (b) sind Kurven zu Temperaturen von $T/T_c = 0.01, 0.05, 0.1, \dots, 0.9, 0.95, 0.99$ abgebildet, entsprechend dem Übergang von blau bis rot. Der Orientierungswinkel ist $\alpha = \pi/4$.

Die Überschätzung der absoluten Werte der Ströme durch das Stufenmodell ist nicht verwunderlich, da eine Unterdrückung des Paarpotentials nicht berücksichtigt wird. Bei einer Berücksichtigung der Unterdrückung des Paarpotentials werden die Ströme durch die lokale Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials an den Oberflächen des d -Wellen-Supraleiters sowie in der Umgebung der Engstelle abgeschwächt. Dies ist in den selbstkonsistenten Lösungen korrekt enthalten, nicht aber in dem nicht-selbstkonsistenten Stufenmodell.

Aus den Strom-Phasen-Beziehungen können im Fall des Stufenmodells wieder die kritischen Ströme extrahiert werden. Entsprechende Ergebnisse sind in Abbildung 6.12 dargestellt, wobei wieder die selben Daten entsprechend den Abbildungen 6.7 und 6.8 auf zwei Arten wiedergegeben sind.

Vergleicht man die Ergebnisse für den kritischen Strom des Stufenmodells mit den entsprechenden selbstkonsistent berechneten Resultaten aus Abbildung 6.7, so ist festzustellen, dass das qualitative Verhalten bereits durch das nicht-selbstkonsistente Stufenmodell korrekt geliefert wird. Allerdings werden im Rahmen des Stufenmodells, wie bereits bemerkt, die absoluten Werte der Ströme durch die Vernachlässigung der lokalen Unterdrückung des Paarpotentials deutlich überschätzt.

Des Weiteren ist festzustellen, dass die Breiten, bei denen ein Übergang zu negativen kritischen Strömen auftritt, durch das Stufenmodell unterschätzt werden. Dies ist verständlich, da Trajektorien, die die Engstelle ohne Reflexion passieren, in den selbstkonsistenten Rechnungen durch die Unterdrückung des Paarpotentials an der geraden Begrenzung geringeres Gewicht haben. Diese Besonderheit ist in dem Stufenmodell nicht enthalten und die Trajektorien, die die Engstelle direkt passieren, haben größeres Gewicht. Da diese aber zu positiven Strömen führen, findet der Übergang zu positiven kritischen Strömen im Rahmen des Stufenmodells bei kleineren Breiten statt.

Ein weiterer Unterschied zwischen den Ergebnissen der selbstkonsistenten Rechnungen und denen des Stufenmodells besteht darin, dass der kritische Strom nahe der Übergangstemperatur T_c im Rahmen des nicht-selbstkonsistenten Modells linear ansteigt (siehe Abb. 6.12), während im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen ein nichtlinearer Anstieg nahe T_c folgt (vgl. Abb. 6.7). Dieser nichtlineare Anstieg im Rahmen der selbstkonsistenten Ergebnisse folgt aus der lokalen Unterdrückung der Amplitude des Paarpotentials, die in dem Stufenmodell nicht enthalten ist.

Sowohl bei den selbstkonsistenten Resultaten als auch im Rahmen des Stufenmodells liefert der Grenzfall verschwindender Breite der Engstelle $w \rightarrow 0$ ein interessantes Ergebnis. Für verschwindende Breite wird das Ergebnis eines Punktkontaktes reproduziert, allerdings durch die Reflexion der Trajektorien mit negativen Strömen bzw. einer intrinsischen Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$. Insofern kann dieser Grenzfall als π -Punktkontakt bezeichnet werden.

In diesem speziellen Grenzfall $w \rightarrow 0$, der $l \rightarrow 0$ impliziert, werden die Ausdrücke für die Riccati-Amplituden besonders einfach.

Für Trajektorien aus dem Winkelbereich $0 < \theta < \pi/2$ folgt:

$$a(s=0) = a_L(\theta) \qquad b(s=0) = b_R(2\pi - \theta) \qquad (6.14)$$

Für $\pi/2 < \theta < \pi$:

$$a(s=0) = a_R(\theta) \qquad b(s=0) = b_L(2\pi - \theta) \qquad (6.15)$$

Für $\pi < \theta < 3\pi/2$:

$$a(s=0) = a_R(2\pi - \theta) \qquad b(s=0) = b_L(\theta) \qquad (6.16)$$

Schließlich für $3\pi/2 < \theta < 2\pi$:

$$a(s=0) = a_L(2\pi - \theta) \qquad b(s=0) = b_R(\theta) \qquad (6.17)$$

Diese Ergebnisse für die Riccati-Amplituden entsprechen bis auf die Reflexion direkt den Ausdrücken für den Punktkontakt, Gleichungen (4.6) und (4.7).

Im Rahmen des nicht-selbstkonsistenten Stufenmodells (6.1) wird abschließend der Einfluss der Orientierung der d -Welle, charakterisiert durch den Winkel α , diskutiert. In Abbildung 6.13 sind für eine feste Temperatur von $T = 0.5 T_c$ Strom-Phasen-Beziehungen für verschiedene Werte von α bei vier verschiedenen Breiten w dargestellt.

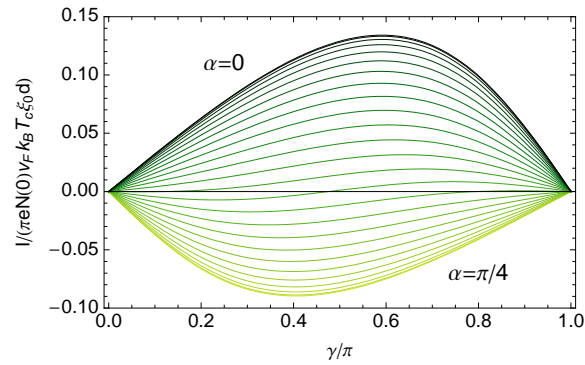
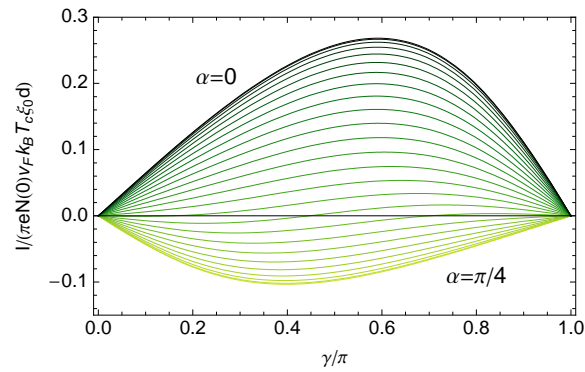
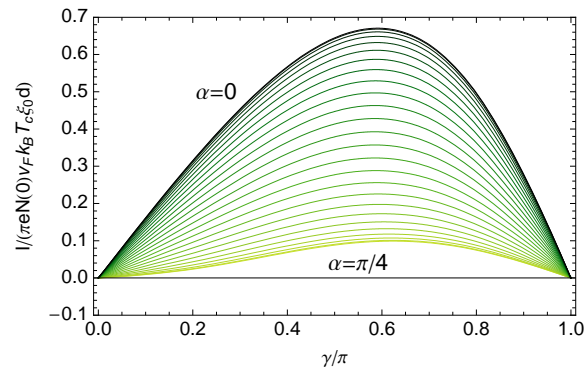
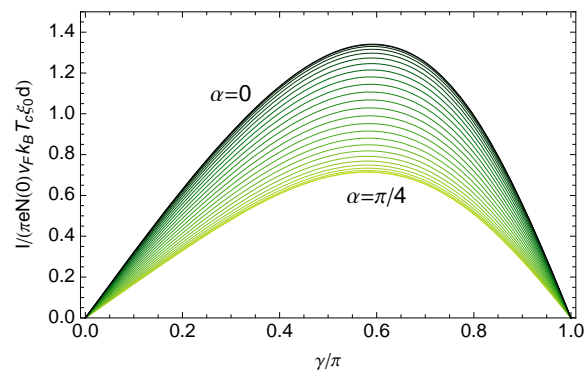
(a) $w = 0.314 \xi_0$ (b) $w = 0.628 \xi_0$ (c) $w = 1.57 \xi_0$ (d) $w = 3.14 \xi_0$ 

Abbildung 6.13: Strom-Phasen-Beziehungen resultierend aus dem Stufenmodell für das Paarpotential. In den vier Teilabbildungen sind Strom-Phasen-Beziehungen für vier verschiedene Breiten der Engstelle w und verschiedene Orientierungen der d -Welle von $\alpha = 0$ (schwarz) bis $\alpha = \pi/4$ (gelb) in Schritten von $\pi/100$ dargestellt. Es ist $T = 0.5 T_c$.

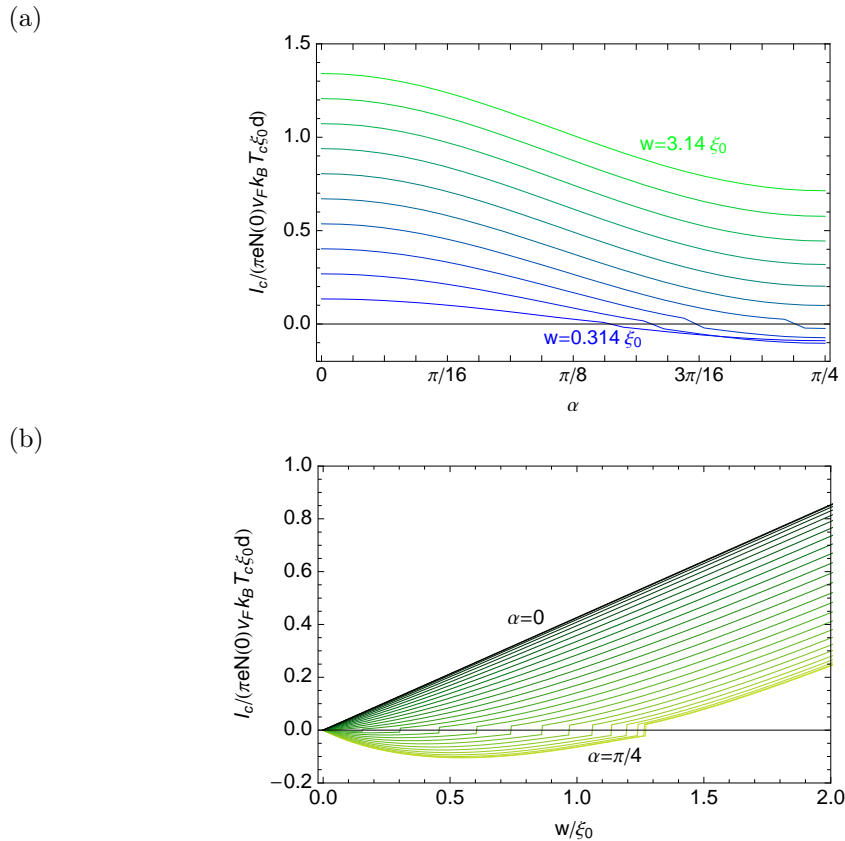


Abbildung 6.14: Der kritische Strom resultierend aus dem Stufenmodell für das Paarpotential. In (a) sind die Ergebnisse bei fester Breite der Engstelle w über dem Orientierungswinkel der d -Welle α aufgetragen, während in (b) die selben Daten bei festgehaltenem Orientierungswinkel über der Breite dargestellt sind. In (a) wurden Breiten von $w = 0.314 \xi_0$ (blau) bis $w = 3.14 \xi_0$ (grün) in Schritten von $0.314 \xi_0$ verwendet. In (b) sind Kurven zu Orientierungswinkeln von $\alpha = 0$ (grün) bis $\alpha = \pi/4$ (schwarz) in Schritten von $\pi/100$ abgebildet. Es ist $T = 0.5 T_c$.

Die Ergebnisse in Abbildung 6.13 zeigen, dass bei kleinen Breiten der Engstelle w durch die Variation des Orientierungswinkels α ein Übergang zwischen positiven und negativen Strömen hervorgerufen wird. Bei großen Breiten der Engstelle hingegen sind die Ströme für alle Orientierungen positiv und die Variation der Orientierung α verändert lediglich deren absolute Werte.

In Abbildung 6.14 sind die kritischen Ströme für verschiedene Werte des Orientierungswinkels α und verschiedene Werte der Breite der Engstelle w bei einer festen Temperatur von $T = 0.5 T_c$ dargestellt. Dabei sind die selben Daten wieder auf zwei Arten aufgetragen: in Abbildung 6.14(a) ist der kritische Strom für feste Werte der Breite w über dem Orientierungswinkel α aufgetragen, während in (b) die selben Daten bei festem Orientierungswinkel α über der Breite der Engstelle w aufgetragen sind.

Abbildung 6.14 zeigt, dass bei hinreichend kleiner Breite der Engstelle w bei Orientierungswinkeln in der Umgebung von $\alpha = \pi/4$ negative kritische Ströme realisiert werden. Sowohl durch eine Verringerung des Orientierungswinkels α (vgl. Abb. 6.14(a)) wie auch durch eine Vergrößerung der Breite der Engstelle w (vgl. Abb. 6.14(b)) wird ein Übergang zu positiven kritischen Strömen hervorgerufen. Bei einer Orientierung von $\alpha = 0$ fließen keine rückfließenden Oberflächenströme und der kritische Strom skaliert linear mit der Breite der Engstelle.

6.5 0 - π -Phasendiagramme

Reduziert man die berechneten Resultate auf das Vorzeichen des kritischen Stromes sowie auf die Existenz einer endlichen intrinsischen Phasendifferenz des Kontaktes, so lassen sich die Ergebnisse entsprechend dem Vorgehen in Abschnitt 5.7 zusammenfassend und übersichtlich in 0 - π -Phasendiagrammen darstellen.

In Abbildung 6.15 ist das Vorzeichen des kritischen Stromes in Abhängigkeit der Temperatur T sowie der Breite der Engstelle w dargestellt. Dabei ist sowohl das Resultat der selbstkonsistenten Rechnungen (rote Abgrenzung) wie auch das des Stufenmodells (schwarze Linie) eingezeichnet. Dieses Phasendiagramm zeigt, dass im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen bei Temperaturen nahe T_c bei verbleibenden Breiten w unterhalb von etwa $\simeq 2\xi_0$ ein Übergang von positiven zu negativen kritischen Strömen auftritt. Bei tiefen Temperaturen findet dieser Übergang bereits bei größeren Breiten w statt. Bei einer Temperatur von $T = 0.1 T_c$ wird eine kritische Breite von etwa $\simeq 4\xi_0$ erreicht. Im Rahmen der nicht-selbstkonsistenten Resultate des Stufenmodells findet dieser Übergang bei wesentlich kleineren Breiten statt und der Bereich negativer kritischer Ströme wird damit von dem nicht-selbstkonsistenten Stufenmodell deutlich unterschätzt. Dies folgt, wie bereits in Abschnitt 6.4, erwähnt, aus der fehlenden Berücksichtigung der lokalen Unterdrückung des Paarpotentials an den Oberflächen der Geometrie im Stufenmodell, die zu einer zu starken Gewichtung von Trajektorien führt, die die Engstelle ohne Reflexion passieren und nicht zu einer intrinsischen Phasendifferenz beitragen.

Bei hohen Temperaturen lassen sich die Resultate der selbstkonsistenten Rechnungen sehr gut durch eine Skalierung der Ergebnisse des Stufenmodells approximieren. Bei tiefen Temperaturen tritt im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnungen eine Sättigung auf und die kritische Breite steigt wesentlich weniger stark an als im Rahmen des Stufenmodells. Diese Sättigung resultiert aus den ausgeprägten positiven Ästen der Strom-Phasen-Beziehungen bei tiefen Temperaturen im Rahmen der selbstkonsistenten Ergebnisse (vgl. dazu die Abbildungen 6.6(c) sowie 6.11(c)).

Für den experimentellen Nachweis wird aus dem 0 - π -Phasendiagramm in Abbildung 6.15 deutlich, dass nur in einem sehr engen Bereich von Breiten w durch eine Variation der Temperatur ein Übergang zwischen positiven und negativen kritischen Strömen hervorgerufen werden kann. Durch eine Variation der Breite w kann hingegen bei allen Temperaturen ein Übergang hervorgerufen werden.

In weiteren Rechnungen mit größerer Länge L und Breite W der gesamten Geometrie wurde untersucht, ob die verwendeten Werte von $L = W = 12.6\xi_0$ ausreichend sind oder ob das 0 - π -Phasendiagramm durch größere Werte für L und W verändert wird. Als Ergebnis hat sich gezeigt, dass die verwendeten Werte für L und W tatsächlich ausreichend sind und für größere Werte keine Veränderungen des 0 - π -Phasendiagramms auftreten.

In Abbildung 6.16 wird das 0 - π -Phasendiagramm für das Stufenmodell erweitert, indem die Bereiche differenziert werden, in denen eine intrinsische Phasendifferenz von $0 < \gamma_0 < \pi$ auftritt und in denen folglich ein φ -Josephson-Kontakt realisiert wird. Im Fall des geometrischen π -Josephson-Kontaktes tritt der φ -Zustand in der Umgebung des Überganges zwischen 0 - und π -Zustand auf. Bei tiefen Temperaturen ist dieser Übergangsbereich sehr breit, während er bei hohen Temperaturen sehr schmal wird und für $T \rightarrow T_c$ verschwindet.

Bei dem Phasendiagramm aus Abbildung 6.16 werden die vier möglichen Zustände des Josephson-Kontaktes anhand des Vorzeichens des kritischen Stromes sowie anhand der Existenz einer Nullstelle der Strom-Phasen-Beziehung im Intervall $0 < \gamma < \pi$ unterschieden. Diese Unterscheidung wurde in Abschnitt 5.7 im Detail diskutiert. Der Zustand des Kontaktes sowie insbesondere Übergänge zwischen den verschiedenen Zuständen lassen sich jedoch noch genauer charakterisieren, wenn man auch den tatsächlichen Wert der intrinsischen Phasendifferenz γ_0 mit in die Darstellung aufnimmt. Wie in Abschnitt 3.5 beschrieben, ist die intrinsische Phasendifferenz γ_0 durch die Position von Nullstellen der Strom-Phasen-Beziehung im Intervall $0 \leq \gamma \leq \pi$ gegeben, die die Stabilitätsbedingung $dI(\gamma)/d\gamma|_{\gamma=\gamma_0} > 0$ erfüllen. Nullstellen mit dieser Eigenschaft entsprechen stabilen lokalen Minima der Freien

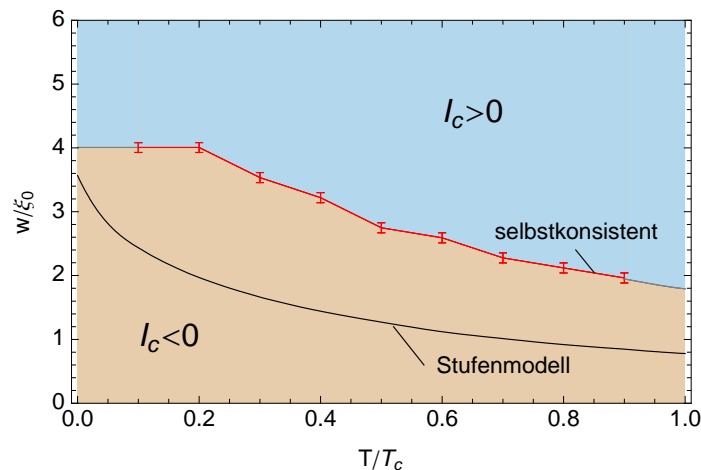


Abbildung 6.15: 0- π -Phasendiagramm für das Vorzeichen des kritischen Stromes in Abhängigkeit der Temperatur T sowie der Breite der Engstelle w (für $\alpha = \pi/4$ sowie $\beta = 0$). In rot ist die Phasengrenze resultierend aus den selbstkonsistenten Rechnungen eingezeichnet, in schwarz aus dem Stufenmodell.

Energie des Kontaktes, die im Grundzustand realisiert werden.

In Abbildung 6.17 ist die intrinsische Phasendifferenz γ_0 für $\alpha = \pi/4$ über der Breite der Engstelle w und der Temperatur T dargestellt. Diese beiden Parameter und der Wert $\alpha = \pi/4$ entsprechen gerade dem Phasendiagramm aus Abbildung 6.16. Damit stellt Abbildung 6.17 die direkte Erweiterung des Phasendiagramms aus Abbildung 6.16 um den genauen Wert der intrinsischen Phasendifferenz γ_0 dar.

Bei der kritischen Temperatur $T = T_c$ verschwinden höhere Harmonische der Strom-Phasen-Beziehungen und es findet bei einer Variation der Breite der Engstelle w ein direkter Übergang von der Form $I = I_c \sin(\gamma)$ zu $I = I_c \sin(\gamma + \pi) = -I_c \sin(\gamma)$ statt. Dies ist gleichbedeutend mit einem direkten Übergang von einer verschwindenden intrinsischen Phasendifferenz $\gamma_0 = 0$ zu einer Phasendifferenz von $\gamma_0 = \pi$. Dieses Verhalten spiegelt sich in der sprunghaften Variation von γ_0 bei einer Variation der Breite w der Engstelle bei $T = T_c$ in Abbildung 6.17 wider.

Bei tieferen Temperaturen spielen die höheren Harmonischen der Strom-Phasen-Beziehungen eine zunehmend wichtige Rolle. Daraus resultiert eine kontinuierliche Variation der intrinsischen Phasendifferenz bei einem Übergang vom 0-Zustand zum π -Zustand bei Temperaturen weit unterhalb von T_c .

In Abbildung 6.18 wird ein 0- π -Phasendiagramm für das Stufenmodell gezeigt, in dem bei einer festen Temperatur von $T = 0.5 T_c$ die Abhängigkeit des Zustandes des Josephson-Kontaktes vom Orientierungswinkel der d -Welle α untersucht wird.

Bei dem extremen Wert des Orientierungswinkels von $\alpha = \pi/4$ zeigen sich die Ergebnisse, die auch in der vorherigen Abbildung 6.16 für $T = 0.5 T_c$ enthalten sind: bei Breiten oberhalb von etwa $w \simeq 1.3 \xi_0$ findet im Rahmen des nicht-selbstkonsistenten Stufenmodells ein Übergang zu positiven kritischen Strömen statt, wobei in der Umgebung des Überganges der φ -Zustand realisiert wird. Durch eine Verringerung des Orientierungswinkels α verschiebt sich die Breite, bei der der Übergang zu positiven kritischen Strömen stattfindet, zu kleineren Werten. Unterhalb von etwa $\alpha \simeq \pi/8$ ist bei der verwendeten Temperatur von $T = 0.5 T_c$ kein negativer kritischer Strom mehr möglich. Die Bereiche in der Umgebung des Überganges zwischen positiven und negativen kritischen Strömen, in denen ein φ -Kontakt realisiert wird, verschieben sich ebenfalls mit einer Verringerung des Orientierungswinkels α zu kleineren Breiten und verschwinden bei etwa $\alpha \simeq \pi/8$.

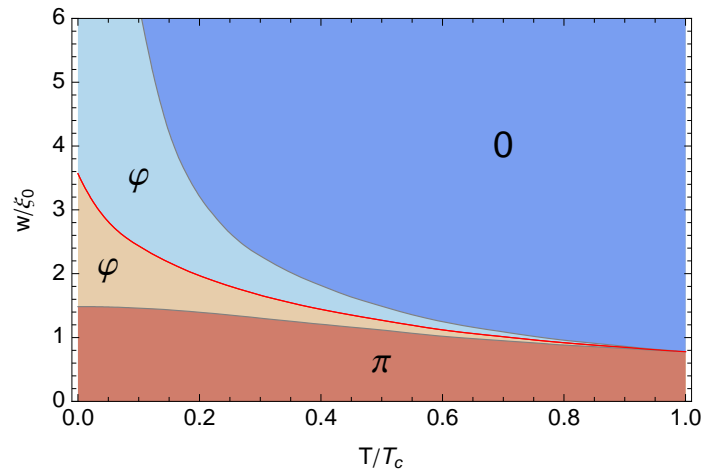


Abbildung 6.16: 0- π -Phasendiagramm bei $\alpha = \pi/4$ für das Stufenmodell (6.1). Auf der horizontalen Achse ist die Temperatur T und auf der vertikalen Achse die Breite der Engstelle w aufgetragen. Die Bereiche positiven kritischen Stromes (helleres und dunkleres Blau) sind durch die rote Linie von den Bereichen negativen kritischen Stromes (helleres und dunkleres Braun) abgegrenzt.

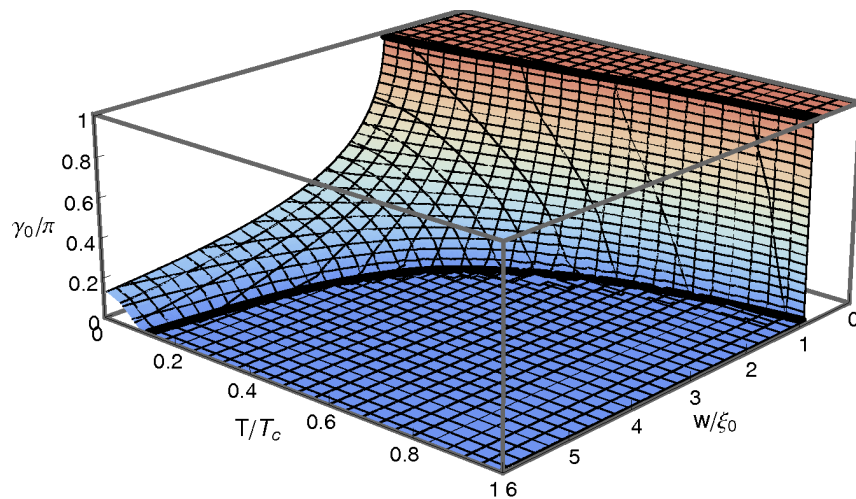


Abbildung 6.17: Intrinsische Phasendifferenz γ_0 zum 0- π -Phasendiagramm für $\alpha = \pi/4$ aus Abbildung 6.16. Die fett hervorgehobenen schwarzen Linien stellen die Abgrenzung der ϕ -Phase von der 0- bzw. π -Phase dar und entsprechen damit den schwarzen Linien in Abbildung 6.16.

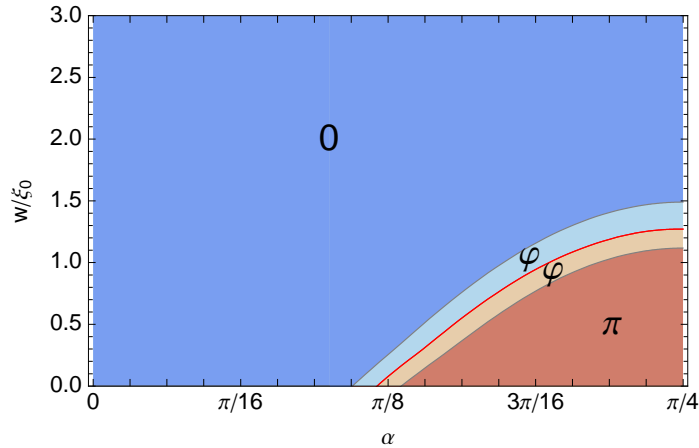


Abbildung 6.18: 0- π -Phasendiagramm bei $T = 0.5 T_c$ für das Stufenmodell (6.1). Auf der horizontalen Achse ist der Orientierungswinkel der d -Welle α und auf der vertikalen Achse die Breite der Engstelle w aufgetragen. Die Bereiche positiven kritischen Stromes (helleres und dunkleres Blau) sind durch die rote Linie von den Bereichen negativen kritischen Stromes (helleres und dunkleres Braun) abgegrenzt.

Zusammenfassend folgt aus Abbildung 6.18, dass kleine Abweichungen des Orientierungswinkels der d -Welle vom idealen Wert $\alpha = \pi/4$ für die Realisierung eines π -Josephson-Kontaktes unkritisch sind.

6.6 Realisierbarkeit und mögliche Anwendungen

Der wichtigste Aspekt bei der Realisierung des in diesem Kapitel vorgeschlagenen geometrischen π -Josephson-Kontaktes ist die notwendige Breite der Engstelle w . Wie aus den selbstkonsistenten Resultaten in dem Phasendiagramm in Abbildung 6.15 deutlich wird, muss für einen Übergang zu negativen kritischen Strömen bei tiefen Temperaturen eine Breite von weniger als $\simeq 4 \xi_0$ strukturiert werden. Bei den bekannten Hochtemperatur-Supraleitern aus der Klasse der Kuprate mit typischen Werten¹ von $\xi_0 = 1..10$ nm ist dies technologisch sehr anspruchsvoll, aber im Bereich des Machbaren. Dabei sind insbesondere die elektronendotierten Kuprate der Gruppe $L_{2-x}Ce_xCuO_4$ mit $L=Pr,Sm,Nd$ aufgrund der vergleichsweise großen Kohärenzlängen von etwa $\xi_0 \simeq 7..8$ nm interessante Kandidaten². Mit der deutlich größeren Kohärenzlänge von $\xi_0 \simeq 30$ nm stellt auch der Schwere-Fermionen-Supraleiter $CeIrIn_5$ ein interessantes Material für die Strukturierung von geometrischen π -Josephson-Kontakten dar³, da es sich bei diesem Material ebenfalls um einen d -Wellen-Supraleiter handelt [123]. Sollten in Zukunft d -Wellen-Supraleiter mit größerer Kohärenzlänge gefunden werden, würde dies die Strukturierung entsprechend vereinfachen.

Ein zweiter wichtiger Punkt bei der Realisierung ist die Orientierung der Kristallstruktur und damit der d -Welle. Wie mit den Ergebnissen in Abbildung 6.18 gezeigt werden konnte, ist die Orientierung der d -Welle kein kritischer Parameter. Kleine Abweichungen von der idealen Orientierung $\alpha = \pi/4$ führen nicht zu einem sofortigen Verschwinden des π -Zustandes.

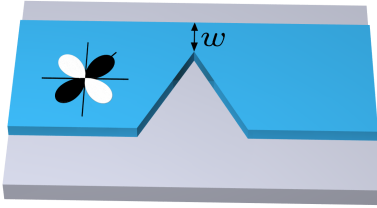
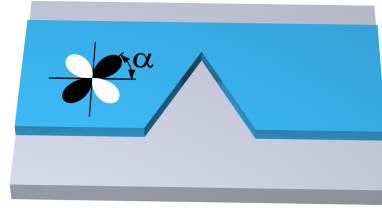
Als dritter wichtiger Punkt bei der Realisierung eines geometrischen π -Josephson-Kontaktes ist der Öffnungswinkel des Keils β zu nennen. Vergleicht man hierzu die selbstkonsistenten Ergebnisse für $\beta = 0$ (in Abb. 6.7) sowie für $\beta = \pi/2$ (in Abb. 6.8), so wird deutlich, dass der Öffnungswinkel der d -Welle ebenfalls kein kritischer Parameter ist. Ein

¹Für eine Übersicht siehe z. B. [98].

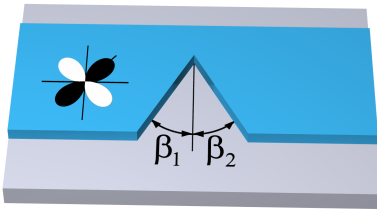
²Der Wert für die Kohärenzlänge folgt aus dem oberen kritischen Feld von $\simeq 7$ T [120, 121].

³Das obere kritische Feld dieses Materials liegt bei etwa $\simeq 0.4$ T [122].

(a) Breite der Engstelle

(b) Orientierungswinkel der d -Welle

(c) Öffnungswinkel des Keils



(d) Oberflächenrauigkeit

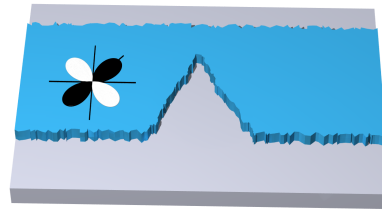


Abbildung 6.19: Vier wesentliche Aspekte bei der Beurteilung der Realisierbarkeit des geometrischen π -Josephson-Kontaktes: (a) die Breite der Engstelle in Einheiten der Kohärenzlänge ξ_0 , (b) der Orientierungswinkel der d -Welle, (c) der Öffnungswinkel des Keils, (d) Oberflächenrauigkeiten sowie mögliche Schädigungen durch die Strukturierung.

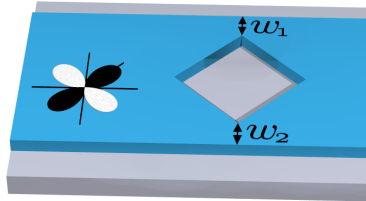
endlicher Öffnungswinkel führt zwar zu leicht verringerten Werten der Breite, bei denen ein Übergang zum π -Zustand stattfindet. Es konnte aber gezeigt werden, dass ein endlicher Öffnungswinkel nicht zu einer sofortigen Unterdrückung des π -Zustandes führt. Auch ein asymmetrischer Keil mit $\beta_1 \neq \beta_2$ entsprechend Abbildung 6.19(c) sollte für eine Realisierung eines geometrischen π -Josephson-Kontaktes nicht kritisch sein.

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei der Beurteilung der Realisierbarkeit eines geometrischen π -Josephson-Kontaktes ist eine etwaige Oberflächenrauigkeit bzw. eine Schädigung der Oberfläche durch die Strukturierung. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde von stückweise geradlinigen Grenzflächen der Geometrie ausgegangen. Aus früheren Arbeiten ist aber bekannt, dass eine mikroskopische Oberflächenrauigkeit das Auftreten von gebundenen Andreev-Zuständen an geeignet orientierten Oberflächen eines d -Wellen-Supraleiters nicht unterdrückt [115]. Folglich kann davon ausgegangen werden, dass auch das Auftreten des π -Zustandes durch eine mikroskopische Oberflächenrauigkeit nicht verhindert wird.

Eine mögliches Verfahren zum experimentellen Nachweis des Überganges zu negativen kritischen Strömen besteht in der Messung des kritischen Stromes bei einer Variation der Temperatur oder der Breite der Engstelle. Eine Messung kann immer nur den absoluten Wert des kritischen Stromes liefern, und folglich äußert sich der Übergang zu negativen kritischen Strömen durch ein lokales Minimum. Die Berechnung des kritischen Stromes liefert auch sein Vorzeichen, das in den Abbildungen 6.7 und 6.8 wiedergegeben ist. Bei einem Vergleich von gemessenen Resultaten mit den berechneten Ergebnissen muss folglich der Absolutwert der Ergebnisse der Rechnungen herangezogen werden.

Vergleicht man die notwendigen Strukturgrößen für den geometrischen π -Josephson-Kontakt mit denen der rechtwinkligen Mikrobrücke eines d -Wellen-Supraleiters aus Kapitel 5, so wird deutlich, dass der π -Zustand im Fall des geometrischen π -Josephson-Kontaktes wesentlich stabiler und robuster auftritt. Aus den Phasendiagrammen in Abbildung 5.20 folgt vereinfachend, dass im Fall der rechtwinkligen Mikrobrücke zur Realisierung des π -Zustandes eine Geometrie strukturiert werden muss, bei der die Länge der Brücke größer ist als ihre Breite, und dass eine Temperatur nahe der kritischen Temperatur gewählt werden muss. Dies erscheint einerseits schwierig, zeigt aber gleichzeitig auf, dass bei einer Geome-

(a) SQUID-Anordnung



(b) (serielle) SQIF-Anordnung

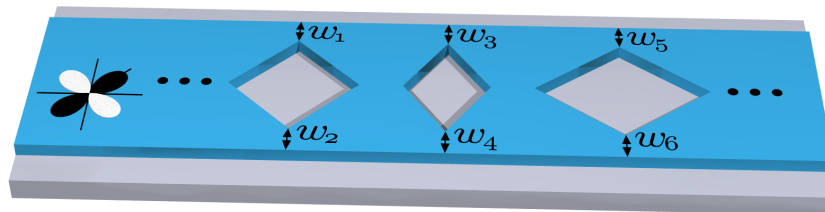


Abbildung 6.20: Mögliche Anwendungen des geometrischen π -Josephson-Kontaktes. In (a) ist eine Kombination zweier geometrischer π -Josephson-Kontakte zu einem SQUID skizziert. Dabei können die beiden Kontakte unabhängig strukturiert werden und folglich jeweils im 0-, φ - oder π -Zustand sein. In (b) ist eine serielle SQIF-Geometrie angedeutet, die aus mehreren SQUID-Schleifen besteht. Auch hier können alle Kontakte unabhängig strukturiert werden.

trie entsprechend dem geometrischen π -Josephson-Kontakt mit einer endlichen Länge der Engstelle dennoch der π -Zustand folgen kann. Das Auftreten des φ - sowie des π -Zustandes ist insofern auch gegenüber Variationen der Geometrie robust.

In Abbildung 6.20 sind mögliche Anwendungen geometrischer π -Josephson-Kontakte angedeutet, die sich aus der Kombination mehrerer Kontakte ergeben. Aus der Kombination zweier Kontakte kann aufgrund der planaren Geometrie und der einfachen Strukturierung in Ein-Lagen-Technik direkt ein SQUID erzeugt werden (siehe Teilabbildung (a)). Da die Kontakte unabhängig strukturiert werden können, können verschiedene Breiten gewählt und somit ohne weiteres beliebige Kombinationen von 0-, φ - und π -Kontakten, insbesondere auch 0-0-, 0- π - oder π - π -SQUIDs erzeugt werden.

In Abbildung 6.20(b) sind mehrere SQUID-Schleifen zu einer seriellen SQIF-Anordnung kombiniert. Auch hier können ohne weiteres 0-0-, 0- π - oder π - π -Schleifen kombiniert werden. In ähnlicher Art und Weise können auch parallele Anordnungen von SQUID-Schleifen realisiert werden. Die Verwendung von π -Josephson-Kontakten erschließt durch die komplementären Kennlinien von 0-0- und 0- π -SQUID-Schleifen einen neuen Parameter bei der Synthese der Kennlinie einer SQIF-Struktur und eröffnet damit vollständig neue Möglichkeiten bei der gezielten Beeinflussung des Ausgangssignals eines SQIF.

Die Kombination zweier geometrischer π -Josephson-Kontakte zu einer SQUID-Schleife erschließt gleichzeitig ein beweiskräftiges Verfahren zum experimentellen Nachweis intrinsischer Phasendifferenzen der Kontakte. Liegt die Breite zumindest eines Kontaktes in der Nähe des Überganges zwischen dem 0- und dem π -Zustand, so folgt aufgrund der Temperaturabhängigkeit der intrinsischen Phasendifferenz bei einer Variation der Temperatur eine Verschiebung der Abhängigkeit des kritischen Stromes $I_c(\Phi)$ des SQUID bzw. der abfallenden dc -Spannung $V_{dc}(\Phi)$ vom magnetischen Fluss Φ durch das SQUID-Loch. Bei einem Übergang vom 0-Zustand zum π -Zustand ist dabei eine Verschiebung um ein halbes Flussquant $\Phi_0/2$ zu beobachten. Ein Übergang zum φ -Zustand macht sich durch entsprechend verringerte Verschiebungen bemerkbar, wobei die Werte der intrinsischen Phasendifferenz entsprechend Abbildung 6.17 die Größe der Verschiebung festlegen. Werden mehrere

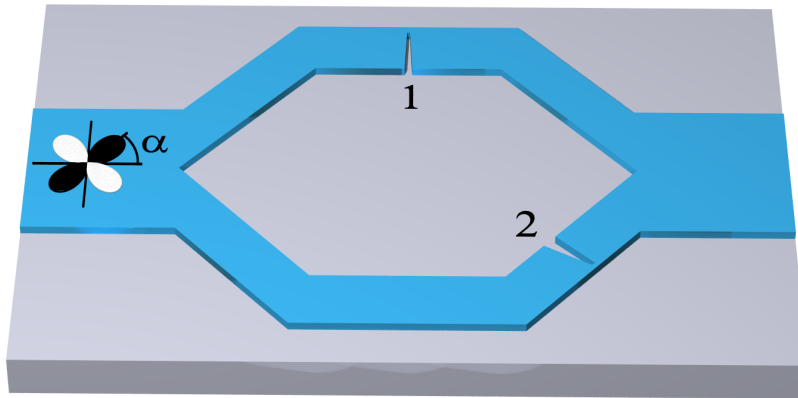


Abbildung 6.21: Diese Skizze zeigt eine SQUID-Geometrie, bei der für die eingezeichnete Orientierung der d -Welle aufgrund der unterschiedlichen Ausrichtungen der mit 2 bezeichnete Kontakt immer ein normaler oder 0-Josephson-Kontakt ist, während der mit 1 bezeichnete Kontakt je nach verbleibender Breite und Temperatur im 0-, φ - oder π -Zustand sein kann [125].

SQUID-Schleifen mit Kontakten nahe dem 0- π -Übergang zu einer seriellen oder parallelen SQIF-Struktur kombiniert, so ändert sich auch das Ausgangssignal des SQIF durch eine Variation der Temperatur [124].

Ein interessanter Aspekt bei der experimentellen Umsetzung ist durch das Phasendiagramm in Abbildung 6.16 gegeben, das den φ -Zustand mit berücksichtigt. Bei tiefen Temperaturen tritt der φ -Zustand schon bei wesentlich größeren Werten der Breite auf als der π -Zustand. Somit könnte eine experimentelle Verifizierung des φ -Zustandes wesentlich einfacher gelingen. Der Nachweis des φ -Zustandes bedeutet aber bereits, dass die Existenz der rückfließenden Oberflächenströme, die für eine geeignet orientierte Oberfläche eines d -Wellen-Supraleiters charakteristisch sind, nachgewiesen wurde. Im φ -Zustand liegt der Grundzustand des Kontaktes bereits bei einer endlichen intrinsischen Phasendifferenz, was direkt mit dem Auftreten von negativen Strömen und einer Nullstelle der Strom-Phasen-Beziehung im Intervall $0 < \gamma < \pi$ verbunden ist.

Abbildung 6.21 zeigt eine SQUID-Geometrie, bei der durch die unterschiedliche Orientierung der beiden Kontakte bezüglich der d -Welle gesichert ist, dass bei Orientierungswinkeln nahe $\alpha = 0$ bzw. nahe $\alpha = \pi/4$ einer der beiden Kontakte immer ein normaler oder 0-Josephson-Kontakt ist, während der andere Kontakt je nach verbleibender Breite und Temperatur im 0-, φ - oder π -Zustand sein kann [125]. Für den in Abbildung 6.21 skizzierten Orientierungswinkel $\alpha = \pi/4$ ist beispielsweise der mit 2 bezeichnete Kontakt immer ein normaler oder 0-Josephson-Kontakt, während, der mit 1 bezeichnete Kontakt je nach verbleibender Breite und Temperatur im 0-, φ - oder π -Zustand sein kann. Bei Orientierungswinkeln, die stark von $\alpha = 0$ bzw. $\alpha = \pi/4$ abweichen, können entsprechend der Ergebnisse in Abschnitt 6.4 beide Kontakte eine endliche intrinsische Phasendifferenz aufweisen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der Gleichstrom-Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten untersucht. Diese Untersuchungen basierten auf der zweidimensionalen selbstkonsistenten Berechnung der Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie der Supraleitung. Damit wurden geometrische Josephson-Kontakte in Form von Mikrobrücken bestehend aus Supraleitern mit s - und d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung betrachtet. Die typischen Abmessungen l und w der Engstelle, die den Josephson-Kontakt realisiert, wurden dabei im Vergleich zur Kohärenzlänge des Materials ξ_0 im gesamten Bereich von $l, w \ll \xi_0$ bis $l, w \gg \xi_0$ variiert, es wurden Abschirmungseffekte sowie der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes untersucht und es wurde dabei der gesamte Temperaturbereich von $T = 0$ bis zur Sprungtemperatur T_c betrachtet.

Bei der theoretischen Beschreibung der geometrischen Josephson-Kontakte wurde ein Verfahren zur effizienten numerischen Berechnung selbstkonsistenter Lösungen für die Propagatoren der mikroskopischen Eilenberger-Theorie für ausgedehnte zweidimensionale Geometrien entwickelt und in Form von parallelisiertem numerischem Code implementiert. Es wurde eine Darstellung gefunden, die es erlaubt, magnetische Felder über ein entsprechendes Vektorpotential für beliebige Geometrien selbstkonsistent zu berücksichtigen. Die magnetischen Felder umfassen dabei sowohl äußere Felder als auch die, die durch die in der Geometrie fließenden Ströme hervorgerufen werden. Die entwickelten Methoden sind nicht auf die Beschreibung geometrischer Josephson-Kontakte beschränkt und eine Anwendung auf eine Vielzahl von Fragestellungen im Rahmen der mikroskopischen Theorie der Supraleitung ist möglich.

Um das statische Verhalten der betrachteten Josephson-Kontakte zu charakterisieren, wurden unter anderem Strom-Phasen-Beziehungen selbstkonsistent berechnet und aus diesen die kritischen Ströme extrahiert. Bei Kenntnis der Strom-Phasen-Beziehung kann die Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes, hervorgerufen durch eine Variation der eichinvarianten Phasendifferenz, durch die Integration der Strom-Phasen-Beziehung gewonnen werden. Eine Herleitung der entsprechenden Relation (3.38) aus dem Eilenberger-Funktional wurde in der vorliegenden Arbeit präsentiert. Damit ist eine mikroskopische Begründung dieser Art der Berechnung der Änderung der Freien Energie gegeben, deren Gültigkeitsbereich sich über den gesamten Temperaturbereich von $T = 0$ bis T_c erstreckt und die auch im Fall äußerer Magnetfelder unverändert gilt. Des Weiteren ist die angegebene Herleitung nicht auf Josephson-Kontakte beschränkt, sondern besitzt Gültigkeit für beliebige Strukturen, die eine Strom-Phasen-Beziehung aufweisen.

Im ersten Teil dieser Arbeit wurden die erarbeiteten Methoden auf einen geometrischen Josephson-Kontakt in Form einer rechtwinkligen Mikrobrücke bestehend aus einem konventionellen s -Wellen-Supraleiter angewandt. Durch die Berechnung der Amplitude und der Phase des Paarpotentials, der Stromdichte und der lokalen Quasiteilchen-Zustandsdichte in der Mikrobrücke wurde im Detail untersucht, wie der Josephson-Effekt an einer Engstelle zustande kommt. Des Weiteren wurde der Einfluss der geometrischen Parameter unter-

sucht. Einerseits konnte gezeigt werden, dass mit zunehmender Breite der Mikrobrücke die Strom-Phasen-Beziehungen zunehmend nicht-sinusförmig und mehrdeutig werden, was den Übergang zum Stromfluss in einem ausgedehnten Supraleiter markiert. Andererseits konnte gezeigt werden, dass auch mit zunehmender Länge der Mikrobrücke die Strom-Phasen-Beziehungen zunehmend nicht-sinusförmig werden, der kritische Strom aber abnimmt und sich asymptotisch einem endlichen Wert annähert. Schließlich wurden auch Abschirmungseffekte sowie der Einfluss eines äußeren Magnetfeldes untersucht. Dabei konnte gezeigt werden, dass das Verhältnis aus magnetischer Eindringtiefe und Kohärenzlänge $\kappa = \lambda_L/\xi_0$ keinen wesentlichen Einfluss auf die Strom-Phasen-Beziehungen hat, solange die magnetische Eindringtiefe nicht deutlich kleiner als die Ausdehnung der Engstelle ist. Die selbstkonsistenten Ergebnisse zeigen des Weiteren, dass ein äußeres Magnetfeld bei einer Mikrobrücke im Wesentlichen zur Unterdrückung der Supraleitung in den breiteren Zuleitungen führt, während in der direkten Umgebung der Mikrobrücke aufgrund der kleineren Abmessungen die Supraleitung auch bei stärkeren Feldern überlebt. Dies führt zu einer monotonen Abnahme des kritischen Stromes als Funktion des Magnetfeldes. Insbesondere treten für $\lambda_L \gtrsim l, w$ keine quantisierten Wirbel im Kontakt auf und es kann kein Fraunhofer-Muster beobachtet werden.

Ein Vergleich der berechneten Abhängigkeit des kritischen Stromes von der Temperatur mit experimentellen Ergebnissen für Niob-Mikrobrücken von S. K. H. Lam *et al.* [19] lieferte eine sehr gute quantitative Übereinstimmung und bestätigte damit die Relevanz der Selbstkonsistenz, die auch durch den Vergleich mit einem nicht-selbstkonsistenten Modell für die Ortsabhängigkeit des Paarpotentials verdeutlicht werden konnte.

Im zweiten Teil wurde die Geometrie der rechtwinkligen Mikrobrücke für den Fall eines d -Wellen-Supraleiters untersucht. Der d -Wellen-Supraleiter ist dabei nicht weiter spezifiziert und die Ergebnisse können z. B. auf die Hochtemperatur-Supraleiter aus der Klasse der Kuprate oder auf andere Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie wie CeIrIn₅ angewandt werden [123]. Der Einfluss der d -Wellen-Symmetrie auf den Josephson-Effekt an geometrischen Josephson-Kontakten wurde in dieser Arbeit erstmals untersucht und führt zu spektakulären Unterschieden im Vergleich zum Fall des s -Wellen-Supraleiters. Bei geeigneter Orientierung des Kristallgitters führt die unkonventionelle Paarungssymmetrie zu gebundenen Andreev-Zuständen und rückfließenden Strömen an den Oberflächen des Materials, woraus negative Gesamtströme und endliche intrinsische Phasendifferenzen des Josephson-Kontaktes resultieren können. Damit konnte gezeigt werden, dass durch einen geometrischen Josephson-Kontakt bestehend aus einem Supraleiter mit d -Wellen-Symmetrie der Paarwechselwirkung ein π -Josephson-Kontakt sowie auch ein φ -Josephson-Kontakt realisiert werden kann. Dies stellt einen neuen, bislang unbekanntem Mechanismus für das Auftreten negativer Kopplung und intrinsischer Phasendifferenzen in Josephson-Kontakten dar.

Das Auftreten der rückfließenden Ströme bei negativer Kopplung wurde durch die Betrachtung der lokalen Quasiteilchen-Zustandsdichte in der Engstelle erklärt und die resultierenden Strom-Phasen-Beziehungen wurden bezüglich der Beiträge höherer Harmonischer analysiert. Basierend auf der mikroskopisch abgeleiteten Formel für die Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes wurden die möglichen Zustände der Josephson-Kontakte in Form von 0 - π -Phasendiagrammen dargestellt. Die mikroskopische Herleitung der Formel für die Änderung der Freien Energie liefert dabei erstmals eine fundierte Basis für die Verknüpfung der intrinsischen Phasendifferenz mit der Strom-Phasen-Beziehung.

Im dritten und letzten Teil dieser Arbeit wurde eine spezielle Geometrie für einen Engstellen-Josephson-Kontakt bestehend aus einem d -Wellen-Supraleiter vorgeschlagen, bei der intrinsische Phasendifferenzen bei vergleichsweise großen Abmessungen der Engstelle in besonders robuster Art und Weise auftreten. Für diesen sogenannten geometrischen π -Josephson-Kontakt wurden die Strom-Phasen-Beziehungen und die kritischen Ströme selbstkonsistent sowie mit Hilfe eines nicht-selbstkonsistenten Modells für das Paarpotential berechnet. Damit konnte der Einfluss aller relevanten geometrischen Parameter sowie der Temperatur angegeben werden. Insbesondere konnte gezeigt werden, dass im Grenzfall ei-

ner verschwindenden Ausdehnung der Engstelle ein π -Punktkontakt mit einer intrinsischen Phasendifferenz von π folgt, der damit das direkte Analogon zu einem normalen Punktkontakt mit einer verschwindenden intrinsischen Phasendifferenz darstellt. Der Einfluss der geometrischen Parameter und der Temperatur auf den Zustand der resultierenden 0-, φ - und π -Josephson-Kontakte wurde in Form von 0- π -Phasendiagrammen kompakt dargestellt und im Sinne der experimentellen Realisierbarkeit diskutiert.

Geometrische Josephson-Kontakte zeichnen sich unter anderem durch kleine Widerstände im Normalzustand, kleine Kapazitäten sowie günstige Rauscheigenschaften [25] aus und sind für eine Miniaturisierung geradezu prädestiniert. Des Weiteren existieren Vorschläge zur Ausnutzung der nicht-sinusförmigen Strom-Phasen-Beziehungen bei tiefen Temperaturen, um verbesserte Eigenschaften hochempfindlicher Magnetometer zu erzielen [20]. Im Sinne der Herstellung zeichnen sich geometrische Josephson-Kontakte in Form von Mikrobrücken insbesondere dadurch aus, dass sie in Ein-Lagen-Technik durch die Strukturierung eines dünnen Films eines Supraleiters hergestellt werden können. Im Vergleich zu Tunnelkontakten bzw. Korngrenzen-Kontakten ist keine Strukturierung in Mehr-Lagen-Technik notwendig und eine räumliche Beschränkung auf Korngrenzen des Materials ist nicht gegeben. Damit ist eine nahezu beliebige Platzierung von geometrischen Josephson-Kontakten auf einem Substrat möglich und eine Realisierung einer großen Anzahl von Josephson-Kontakten auf einem einzigen Substrat denkbar.

Die im Rahmen dieser Arbeit erstmals beschriebene Möglichkeit, Josephson-Kontakte mit einer endlichen intrinsischen Phasendifferenz in Form von geometrischen Josephson-Kontakten aus d -Wellen-Supraleitern zu erhalten, eröffnet vielfältige neue Möglichkeiten für grundlegende physikalische Untersuchungen sowie für technische Anwendungen in der Supraleitungselektronik. Normale oder 0-Josephson-Kontakte sowie π -Josephson-Kontakte und φ -Josephson-Kontakte allein durch die Strukturierung eines dünnen Films eines d -Wellen-Supraleiters herzustellen, macht die vergleichsweise einfache Erzeugung eines bistabilen Grundzustandes in einer geschlossenen supraleitenden Schleife denkbar [9], ebenso wie vielfältige Erweiterungen und Verbesserungen im Bereich von supraleitender *rapid single flux quantum* oder RSFQ-Logik [27, 62–64]. Insbesondere wird die Möglichkeit eröffnet, in einem einzigen Prozess 0-, φ - sowie π -Josephson-Kontakte herzustellen und diese nahezu beliebig zu SQUIDs und SQIFs zu kombinieren, um gezielt deren Kennlinien zu beeinflussen.

Experimentelle Realisierungen von geometrischen Josephson-Kontakten bestehend aus konventionellen s -Wellen-Supraleitern wurden in den letzten Jahren von verschiedenen Gruppen veröffentlicht [15–19, 21, 22, 25]. Auch die erfolgreiche Realisierung von Engstellen-Kontakten basierend auf dem Kuprat-Hochtemperatur-Supraleiter YBCO mit d -Wellen-Symmetrie wurde mehrfach publiziert [23, 24, 26]. Dabei kamen verschiedene lithographische sowie rasternde Verfahren und Kombinationen dieser Methoden zum Einsatz. Insbesondere Elektronenstrahlolithographie und fokussierte Ionenstrahlen stellen Werkzeuge dar, bei denen zu erwarten ist, dass sie es Zukunft erlauben werden, supraleitende Filme mit noch höherer Auflösung zu strukturieren.

In der vorliegenden Arbeit wurden die statischen Eigenschaften bzw. der Gleichstrom-Josephson-Effekt an Engstellen-Kontakten untersucht. Die starke Variation der Strom-Phasen-Beziehungen in Abhängigkeit der geometrischen Parameter und der Temperatur sowie das Auftreten intrinsischer Phasendifferenzen implizieren, dass interessante und reichhaltige physikalische Effekte auch im nicht-statischen Regime des Wechselstrom-Josephson-Effektes zu erwarten sind. Ein erster wichtiger Punkt sind hierbei die Auswirkungen der speziellen Form der Strom-Phasen-Beziehungen und der intrinsischen Phasendifferenzen auf die Shapiro-Stufen des Kontaktes bzw. die Frage, inwiefern aus den gemessenen Shapiro-Stufen auf Strom-Phasen-Beziehungen und intrinsische Phasendifferenzen geschlossen werden kann. Die speziellen Eigenschaften geometrischer Josephson-Kontakte gepaart mit Verfahren zur hochaufgelösten Strukturierung von dünnen supraleitenden Filmen lassen für die Zukunft auf interessante physikalische Effekte sowie auf vielfältige technische Einsatzmöglichkeiten hoffen.

Anhang A

Selbstkonsistente Lösungen und Stromerhaltung

In diesem Anhang wird gezeigt, dass für selbstkonsistente Lösungen der mikroskopischen Eilenberger-Gleichungen immer Stromerhaltung ($\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) garantiert ist.

Die Eilenberger-Gleichungen für den quasiklassischen Propagator wurden in Kommutatorschreibweise in Gleichung (3.3) angegeben. Die Darstellung (3.3) ist äquivalent zu den folgenden vier Gleichungen für die Komponenten des quasiklassischen Propagators:

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla g = \Delta \bar{f} + \Delta^\dagger f \quad (\text{A.1})$$

$$-i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{g} = \Delta^\dagger f + \Delta \bar{f} \quad (\text{A.2})$$

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla f = \Delta \bar{g} - \Delta g - 2(i\varepsilon_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}) f \quad (\text{A.3})$$

$$-i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{f} = \Delta^\dagger g - \Delta^\dagger \bar{g} - 2(i\varepsilon_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}) \bar{f} \quad (\text{A.4})$$

Im Sinne besserer Lesbarkeit wurden hier die Argumente $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$, $g = g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$, $\Delta = \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F)$ und $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ unterdrückt.

Selbstkonsistente Konfigurationen bestehend aus einer Lösung für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F)$, für die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ und für das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ erfüllen per definitionem die Gap-Gleichung (3.8)

$$\Delta(\mathbf{r}) = VN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \quad (\text{A.5})$$

sowie die Stromgleichung (3.9)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2eN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \quad (\text{A.6})$$

Aus der Gap-Gleichung (A.5) folgt durch komplexe Konjugation

$$\Delta^\dagger(\mathbf{r}) = VN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) f^*(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS}$$

Mit der Symmetrierelation $\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = -f^*(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, -i\varepsilon_n)$, entnommen aus [69], folgt daraus

$$\Delta^\dagger(\mathbf{r}) = -VN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, -i\varepsilon_n) \rangle_{FS}$$

Da über alle Matsubara-Frequenzen mit $|\varepsilon_n| < \omega_c$ summiert wird, ist dies äquivalent zu

$$\Delta^\dagger(\mathbf{r}) = -VN(0) \pi k_B T \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \quad (\text{A.7})$$

Setzt man die in Gleichung (3.7) eingeführte Faktorisierung $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F)$ in Gleichung (A.1) ein, so erhält man

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F) \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) + \Delta^\dagger(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$$

Da die Fermi-Geschwindigkeit innerhalb des Supraleiters als homogen angenommen wird, gilt

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla g = \nabla \cdot (\mathbf{v}_F g) - (\nabla \cdot \mathbf{v}_F) g = \nabla \cdot (\mathbf{v}_F g)$$

und es folgt

$$i\hbar \nabla \cdot (\mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)) = \Delta(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F) \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) + \Delta^\dagger(\mathbf{r})\chi(\mathbf{p}_F) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n)$$

Durch Summation über alle Matsubara-Frequenzen mit $|\varepsilon_n| < \omega_c$ und Mittelung über die Fermi-Fläche $\langle \dots \rangle_{FS}$ erhält man

$$\begin{aligned} i\hbar \nabla \cdot \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \mathbf{v}_F g(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} &= \Delta(\mathbf{r}) \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \\ &\quad + \Delta^\dagger(\mathbf{r}) \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \langle \chi(\mathbf{p}_F) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_F, i\varepsilon_n) \rangle_{FS} \end{aligned}$$

Setzt man nun auf der linken Seite die Stromgleichung (A.6) und auf der rechten Seite die Gap-Gleichung (A.5) sowie die komplex konjugierte Gap-Gleichung (A.7) ein, so folgt

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\hbar} \frac{2e}{V} (\Delta(\mathbf{r}) \Delta^\dagger(\mathbf{r}) - \Delta^\dagger(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r})) \quad (\text{A.8})$$

und die Eigenschaft $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ ist gezeigt.

Anhang B

Divergenzfreiheit des Vektorpotentials

Die Poisson-Gleichung (3.29) für das Vektorpotential $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ kann effektiv in $D = 2$ Dimensionen gelöst werden, da die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ translationsinvariant in z -Richtung ist und die z -Komponente $j_z(\mathbf{r})$ aufgrund der zylindrischen Fermi-Fläche verschwindet. Das Vektorpotential $\mathbf{A}_c(\mathbf{r})$ in der xy -Ebene wird folglich mit Hilfe der Greenschen Funktion $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ des Laplace-Operators $\mathcal{L}_2 = -\Delta$ in $D = 2$ Dimensionen

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (\text{B.1})$$

mit der Eigenschaft

$$\mathcal{L}_2 G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{B.2})$$

berechnet. Die Definition des Laplace-Operators mit dem negativen Vorzeichen geschieht in Anlehnung an Kapitel V in Referenz [73]. Mit Gleichung (3.30):

$$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbf{r}} \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) &= -\frac{4\pi}{c} \int_F d^2 r' \Delta_{\mathbf{r}} G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{4\pi}{c} \int_F d^2 r' \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Ist die Stromdichte auf ein endliches Gebiet beschränkt, so folgt aus den Eigenschaften $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ und $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ mit der Oberflächennormalen $\hat{\mathbf{n}}$ sofort $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$. Für eine allgemeine Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ (ohne Verwendung der Translationsinvarianz in z -Richtung oder des Verschwindens der z -Komponente) beginnt man zur Herleitung dieser Eigenschaft mit der Greenschen Funktion $G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ des Laplace-Operators $\mathcal{L}_3 = -\Delta$ in $D = 3$ Dimensionen, gegeben durch

$$G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (\text{B.3})$$

mit

$$\mathcal{L}_3 G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{B.4})$$

und somit

$$\mathbf{A}_c(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \int_V d^3 r' G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}')$$

Die Divergenz dieses Ausdruckes ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) &= \frac{4\pi}{c} \int_V d^3r' \nabla_{\mathbf{r}} G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{4\pi}{c} \int_V d^3r' \nabla_{\mathbf{r}'} G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}')\end{aligned}$$

Partielle Integration liefert

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{c} \int_V d^3r' \nabla_{\mathbf{r}'} \cdot (G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}')) + \frac{4\pi}{c} \int_V d^3r' G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\nabla_{\mathbf{r}'} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}'))$$

Der zweite Term verschwindet aufgrund der Voraussetzung $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$. Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf den ersten Term liefert

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{c} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}')$$

Aufgrund der Voraussetzung $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ verschwindet auch dieser Term. Damit folgt die Eigenschaft $\nabla \cdot \mathbf{A}_c(\mathbf{r}) = 0$.

Anhang C

Freie Energie eines Josephson-Kontaktes

In diesem Anhang wird eine Ableitung von Gleichung (3.38) aus der mikroskopischen Eilenberger-Theorie angegeben:

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma')$$

Diese Gleichung stellt eine Beziehung her zwischen der Änderung der Freien Energie $\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0)$ eines Josephson-Kontaktes und der Strom-Phasen-Beziehung $I(\gamma)$. Die im Folgenden präsentierte Ableitung wurde im Zusammenhang mit den $0-\pi$ -Phasendiagrammen des geometrischen π -Josephson-Kontaktes in Referenz [119] veröffentlicht.

In der Literatur finden sich Verweise auf zwei unterschiedliche Arten der Berechnung der Freien Energie, die mit einem Josephson-Kontakt verknüpft ist und die von der eichinvarianten Phasendifferenz über den Kontakt abhängt (siehe dazu z. B. die Referenzen [126] und [81]).

Die erste Ableitung von Gleichung (3.38), die von Brian D. Josephson stammt [127], basiert auf einer einfachen thermodynamischen Überlegung. Dazu betrachtet man zwei identische Systeme A und B , die sich nur dadurch unterscheiden, dass A einen Josephson-Kontakt enthält, B aber nicht. Die Systeme A und B seien nun an zwei Stromquellen angeschlossen, die Ströme I gleicher Stärke erzeugen. Die Freie Energie der beiden Systeme F_A und F_B ist damit eine Funktion des Stromes I . Wenn I geändert wird, fallen an den Systemen A und B die Spannungen V_A und V_B ab. Für die Freie Energie der beiden Systemen folgt:

$$dF_A = V_A I dt \quad (\text{C.1})$$

$$dF_B = V_B I dt \quad (\text{C.2})$$

Die Freie Energie der beiden Systeme unterscheidet sich damit um den folgenden Betrag:

$$d(F_A - F_B) = (V_A - V_B) I dt \quad (\text{C.3})$$

Da die Systeme A und B bis auf den Kontakt identisch sind, ist die mit dem Kontakt verknüpfte Freie Energie $F = F_A - F_B$, und $V = V_A - V_B$ ist die am Kontakt abfallende Spannung. Mit der Josephson-Relation $d\gamma/dt = 2eV/\hbar$ folgt

$$dF = VI dt = \frac{\hbar}{2e} \frac{d\gamma}{dt} I dt = \frac{\hbar}{2e} I d\gamma \quad (\text{C.4})$$

und schließlich

$$F(0) - F(\gamma) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma') \quad (\text{C.5})$$

Bei dieser Ableitung stellt sich erstens die Frage, inwiefern die Nichtgleichgewichtseigenschaft $d\gamma/dt = 2eV/\hbar$ ausgenutzt werden darf, um die Änderung der Freien Energie des Kontaktes (C.5), die bei einer adiabatischen Änderung des Stromes I nur Gleichgewichtszustände involviert, zu berechnen. Zweitens bleibt offen, inwiefern die von gebundenen Andreev-Zuständen getragenen Quasiteilchenströme, insbesondere die bei der Energie $E = 0$, Berücksichtigung finden.

Die zweite Betrachtung, die auf P. W. Anderson zurück geht [2], basiert auf der Auswertung eines Tunnel-Hamilton-Operators entsprechend den Gleichungen (2.15) und (2.16), der zwei ausgedehnte Supraleiter verbindet. Das Tunnel-Matrixelement wird dabei als exponentiell klein angenommen und es wird Störungstheorie zweiter Ordnung angewandt. Diese Überlegung führt auf eine Abhängigkeit der Energie der Barriere von der Phasendifferenz der Form $\Delta E \propto \cos(\gamma)$ und eine entsprechende Strom-Phasen-Beziehung der Form $I = I_c \sin(\gamma)$. Allerdings bleibt die Gültigkeit dieser Ableitung auf Tunnelkontakte mit exponentiell kleinem Tunnel-Matrixelement beschränkt.

Die im Folgenden angegebene Ableitung der Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes als Funktion der eichinvarianten Phasendifferenz basiert auf dem Eilenberger-Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$. Der Ursprung dieses Funktionals und seine Begründung wird vorab kurz skizziert.

Aus der statistischen Physik ist folgende Darstellung des thermodynamischen Potentials Ω eines Vielteilchen-Systems durch die großkanonische Zustandssumme $Z = \text{Sp} e^{\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$ mit $\beta^{-1} = k_B T$ bekannt:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\text{Sp} e^{\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right) \quad (\text{C.6})$$

Ist der Hamilton-Operator \hat{H} eines physikalischen Systems gefunden, so kann das thermodynamische Potential Ω mit dieser Darstellung nach einer Diagonalisierung von \hat{H} im Prinzip berechnet werden. Durch eine Minimierung des thermodynamischen Potentials Ω bezüglich aller Parameter erhält man dann den tatsächlich realisierten Zustand des Systems.

In den meisten Fällen ist entweder der Hamilton-Operator \hat{H} unbekannt oder eine direkte Diagonalisierung ist aufgrund seiner Komplexität nicht möglich. Verwendet man anstatt des vollständigen Hamilton-Operators \hat{H} einen einfacheren approximativen Hamilton-Operator \hat{H}_a , so kann gezeigt werden, dass man aufgrund der Konvexität des negativen Logarithmus in der Relation (C.6) zumindest eine obere Schranke für das thermodynamische Potential erhält.

Wie von G. Eilenberger festgestellt wurde [128], können die Gorkov-Gleichungen der mikroskopischen Theorie der Supraleitung aus dem thermodynamischen Potential Ω über den Ausdruck

$$\Omega = \text{Sp} \rho (\hat{H} + k_B T \ln \rho) + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \int d^3 r (\text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{C.7})$$

mit der großkanonischen Dichtematrix $\rho = e^{-\beta\hat{H}} / \text{Sp} e^{-\beta\hat{H}}$ unter Verwendung des BCS-Hamilton-Operators

$$\hat{H}_{BCS} = \int d^3 r \left\{ \sum_{\alpha} \left[\frac{1}{2m} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \mu \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right] - \lambda \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \right\} \quad (\text{C.8})$$

abgeleitet werden. Dabei findet ein Variationsprinzip Anwendung und die Gorkov-Gleichungen folgen als Stationaritätsbedingung bei der Minimierung des thermodynamischen Potentials Ω entsprechend Gleichung (C.7).

Zur Beschreibung von supraleitenden Systemen im Gültigkeitsbereich der sogenannten quasiklassischen Näherung $k_F \xi_0 \gg 1$ wurde von G. Eilenberger 1968 das folgende Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ für das thermodynamische Potential vorgeschlagen [66, 100]:

$$\begin{aligned} \Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f}) = & \int d^3 r' \left\{ \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} (\text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') - \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}'))^2 + |\Delta(\mathbf{r}')|^2 N(0) \ln \frac{T}{T_c} \right. \\ & \left. + N(0) 2\pi k_B T \sum_{\varepsilon_{n'}=0}^{\infty} \left(\frac{|\Delta(\mathbf{r}')|^2}{\varepsilon_{n'}} - \int_{FS} \frac{d^2 \mathbf{k}'_F}{(2\pi)^3} \frac{I(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})}{N(0) |\hbar \mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F)|} \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Im sauberen Grenzfall ist die Funktion $I(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ dabei gegeben durch

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) = & \Delta^\dagger f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) + \Delta \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) + 2\varepsilon_n (g(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) - 1) \\ & + g(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) \hbar \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)}{\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)} - i \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Führt man eine Variation des Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ bezüglich der Propagatoren $\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ durch, so liefert dies die Eilenberger-Gleichungen für $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ [66]:

$$\left\{ 2\varepsilon_n + \hbar \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - i \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right\} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) = 2\Delta(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) \quad (\text{C.11})$$

$$\left\{ 2\varepsilon_n - \hbar \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + i \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right\} \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) = 2\Delta^\dagger(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) \quad (\text{C.12})$$

Eine entsprechende Variation des Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ nach dem Paarpotential $\Delta^\dagger(\mathbf{r})$ liefert die Gap-Gleichung (3.8) für $\Delta(\mathbf{r})$, genauso wie eine Variation nach dem Paarpotential $\Delta(\mathbf{r})$ eine entsprechende Gap-Gleichung für $\Delta^\dagger(\mathbf{r})$ liefert. Eine Variation nach dem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ liefert schließlich die Strom-Gleichung (3.9). Die Eilenberger-Gleichungen (C.11) und (C.12) zusammen mit der Gap-Gleichung für $\Delta(\mathbf{r})$, Gleichung (3.8), sowie der entsprechenden Gap-Gleichung für $\Delta^\dagger(\mathbf{r})$ und der Strom-Gleichung (3.9) stellen somit Stationaritätsbedingungen für die Minimierung des von Eilenberger vorgeschlagenen Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ dar.

Diese Stationaritätsbedingungen des Eilenberger-Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ können andererseits aber auch durch die quasiklassische Näherung mit der Bedingung $k_F \xi_0 \gg 1$ aus den Gorkov-Gleichungen hergeleitet werden [66]. Die Ableitung dieser sogenannten quasiklassischen Gleichungen aus den Gorkov-Gleichungen liefert eine unabhängige und geschlossene Begründung, die nicht mit dem Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ verknüpft ist.

Die Bestätigung der Relevanz des von G. Eilenberger vorgeschlagenen Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$, Gleichung (C.9), ergibt sich somit indirekt, da es als Stationaritätsbedingungen die Selbstkonsistenz-Gleichungen für die relevanten Größen $\Delta(\mathbf{r})$, $\Delta^\dagger(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ sowie $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ enthält, die andererseits durch die Verwendung der quasiklassischen Näherung aus den Gorkov-Gleichungen gewonnen werden können. Folglich ist das vorgeschlagene Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ bis auf eine unwesentliche additive Konstante korrekt und tauglich zur Beschreibung supraleitender Systeme im Gültigkeitsbereich der quasiklassischen Näherung $k_F \xi_0 \gg 1$. Allerdings ist zu beachten, dass erst eine Minimierung des Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ den tatsächlich physikalisch realisierten Zustand des betrachteten Systems liefert. Auch bei der im Folgenden angegebenen Ableitung der Formel für die Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes wird eine Variation des Funktionals durchgeführt, um das Funktional $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ zu minimieren.

Eine wichtige Eigenschaft des Funktionals $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ besteht darin, dass es im stationären Punkt gerade die Differenz der thermodynamischen Potentiale $\Omega_S - \Omega_N$ zwischen dem supraleitenden Zustand Ω_S sowie dem normalleitenden Zustand Ω_N liefert. Diese Differenz der thermodynamischen Potentiale ist identisch mit der Differenz der Freien Energie zwischen den beiden Zuständen. Diese Bedeutung des Eilenberger-Funktional

$\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$ im stationären Punkt wird in der folgenden Ableitung ausgenutzt, um die Abhängigkeit der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes von der eichinvarianten Phasendifferenz zu berechnen.

Zur Ableitung der Formel für die Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes beginnt man mit dem Eilenberger-Funktional für $\Omega(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; f, \bar{f})$, Gleichung (C.9). Dieses kann anstatt der Propagatoren $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ auch durch die Riccati-Amplituden $a(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $b(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ parametrisiert werden und wird dann mit $\mathcal{E}(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; a, b)$ bezeichnet [129]:

$$\mathcal{E}(\Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}; a, b) = \int d^3r' \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') - \frac{1}{4\pi} \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{B}_{ext} \\ & + \int_{FS} d^2\mathbf{k}'_F \int_{FS} d^2\mathbf{k}''_F \Delta^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F) [V_{pair}]_{\mathbf{k}'_F, \mathbf{k}''_F}^{-1} \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{k}''_F) \\ & - \int_{FS} \frac{d^2\mathbf{k}'_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\hbar\mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F)|} 2\pi k_B T \sum_{\varepsilon_{n'} > 0} \frac{2}{1+a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})} \\ & \times \left[\begin{aligned} & \Delta^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F) a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) + \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) \\ & + [1 - a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})] \\ & \times \left(\begin{aligned} & \varepsilon_{n'} - i\mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F) \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \\ & + \frac{1}{4} \mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F) \cdot \nabla' \ln \frac{a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})}{b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})} \end{aligned} \right) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right. \quad (\text{C.13})$$

Hierbei ist $[V_{pair}]_{\mathbf{k}'_F, \mathbf{k}''_F}$ die Paarwechselwirkungsmatrix, $\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F)$ die Fermi-Geschwindigkeit und $\mathbf{p}_F = \hbar\mathbf{k}_F$ liefert den Fermi-Impuls.

Im stationären Punkt wird eine allgemeine Variation des Eilenberger-Funktional durchgeführt:

$$d\mathcal{E} = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\Delta} d\Delta + \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\Delta^\dagger} d\Delta^\dagger + \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\mathbf{A}} d\mathbf{A} + \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial a} da + \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial b} db \quad (\text{C.14})$$

Die Variationen nach Δ und Δ^\dagger liefern die Gap-Gleichungen für Δ^\dagger und Δ und verschwinden im Fall selbstkonsistenter Lösungen, d. h. im stationären Punkt des Funktional, unabhängig von der gewählten Eichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\Delta} &= \int d^3r' \left\{ \Delta^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) - \int_{FS} \frac{d^2\mathbf{k}'_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\hbar\mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F)|} [V_{pair}]_{\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F} \right. \\ & \quad \left. \times 2\pi k_B T \sum_{\varepsilon_{n'} > 0} \frac{2b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})}{1+a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})} \right\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\Delta^\dagger} &= \int d^3r' \left\{ \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) - \int_{FS} \frac{d^2\mathbf{k}'_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\hbar\mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F)|} [V_{pair}]_{\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F} \right. \\ & \quad \left. \times 2\pi k_B T \sum_{\varepsilon_{n'} > 0} \frac{2a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})}{1+a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})} \right\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Die Variation nach dem Vektorpotential liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{A}} &= \int d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{1}{4\pi} \text{rot } \mathbf{B}_{ext} \right\} \\ &+ \int d^3 r' \left\{ \int_{FS} \frac{d^2 \mathbf{k}'_F}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\hbar \mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F)|} \right. \\ &\quad \left. \times 2\pi k_B T \sum_{\varepsilon_{n'} > 0} 2i \frac{e}{c} \mathbf{v}_F(\mathbf{k}'_F) \frac{1 - a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})}{1 + a(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'}) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}'_F, \varepsilon_{n'})} \right\} \quad (\text{C.17}) \end{aligned}$$

Nun können die externen Ströme $\text{rot } \mathbf{B}_{ext} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{ext}$ identifiziert und die Stromgleichung eingesetzt werden:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{A}} = \int d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{1}{c} \mathbf{j}_{ext} + \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) \right\} \quad (\text{C.18})$$

Die Variationen nach den Riccati-Amplituden $a(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $b(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ liefern die Riccati-Differentialgleichungen für $b(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und $a(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ und verschwinden ebenfalls im Fall selbstkonsistenter Lösungen, d. h. im stationären Punkt des Funktionals, unabhängig von der gewählten Eichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial a} &= \int d^3 r' \left\{ \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \nabla b(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) - 2 \left(\varepsilon_n - i \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) b(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) \right. \\ &\quad \left. - \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) [b(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)]^2 + \Delta^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) \right\} \\ &= 0 \quad (\text{C.19}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial b} &= \int d^3 r' \left\{ \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \nabla a(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) + 2 \left(\varepsilon_n - i \mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) a(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) \right. \\ &\quad \left. + \Delta^\dagger(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) [a(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)]^2 - \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{k}_F) \right\} \\ &= 0 \quad (\text{C.20}) \end{aligned}$$

Damit verschwinden alle Variationen bis auf $\partial \mathcal{E} / \partial \mathbf{A}$ und das totale Differential wird

$$d\mathcal{E} = \int d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{1}{c} \mathbf{j}_{ext} + \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) \right\} \cdot d\mathbf{A} \quad (\text{C.21})$$

Das Integrationsgebiet umfasst im Allgemeinen den gesamten Raum. Betrachtet man den gesamten Raum, so verschwindet auch die Variation des Eilenberger-Funktional nach dem Vektorpotential, da sich gerade die Maxwell-Gleichung ergibt:

$$\text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} (\mathbf{j}_{ext}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}(\mathbf{r})) \quad (\text{C.22})$$

Hierbei ist $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$ das gesamte Magnetfeld sowie $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ das gesamte Vektorpotential und $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ bezeichnet die Ströme, die in der Probe fließen.

Beschränkt man das Integrationsgebiet auf ein Volumen V , das den Josephson-Kontakt umschließt, so sind die externen Ströme nicht enthalten:

$$d\mathcal{E} = \int_V d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) \right\} \cdot d\mathbf{A} \quad (\text{C.23})$$

Nun führt man folgende lokale Eichtransformation mit dem Eichfeld $\phi(\mathbf{r})$ durch:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \rightarrow \Delta e^{i\phi} \\ \Delta^\dagger \rightarrow \Delta^\dagger e^{-i\phi} \\ a \rightarrow a e^{i\phi} \\ b \rightarrow b e^{-i\phi} \\ \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \frac{\hbar c}{2e} \nabla \phi \end{array} \right\} \quad (\text{C.24})$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} d\mathcal{E} &= \int_V d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot} \left(\mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{\hbar c}{2e} \nabla \phi \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{c} \mathbf{j} \left(\mathbf{r}'; \Delta e^{i\phi}, \Delta^\dagger e^{-i\phi}, \mathbf{A} + \frac{\hbar c}{2e} \nabla \phi, a e^{i\phi}, b e^{-i\phi} \right) \right\} \cdot d \left(\mathbf{A} + \frac{\hbar c}{2e} \nabla \phi \right) \\ &= \int_V d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{c} \mathbf{j} \left(\mathbf{r}'; \Delta e^{i\phi}, \Delta^\dagger e^{-i\phi}, \mathbf{A} + \frac{\hbar c}{2e} \nabla \phi, a e^{i\phi}, b e^{-i\phi} \right) \right\} \cdot \frac{\hbar c}{2e} d(\nabla \tilde{\phi}) \end{aligned}$$

mit der eichinvarianten Phase $\tilde{\phi}(\mathbf{r})$, gegeben durch

$$\tilde{\phi}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \frac{2e}{\hbar c} \int_\infty^{\mathbf{r}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.25})$$

Die Darstellung der eichinvarianten Phase $\tilde{\phi}$ durch das Wegintegral $d \left(\int_\infty^{\mathbf{r}} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A} \right) = \int_\infty^{\mathbf{r}} d\mathbf{l} \cdot d\mathbf{A}$ ist nur möglich, falls der transversale Anteil von $d\mathbf{A}$ verschwindet ($\text{rot } d\mathbf{A} = 0$). Dies ist aber gewährleistet, da die oben genannte Variation $d\mathbf{A}$ das Magnetfeld nicht ändern darf und somit die Eigenschaft $\text{rot } d\mathbf{A} = 0$ aufweist.

Die Stromdichte ist invariant unter der Eichtransformation, da Produkte $a(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n) b(\mathbf{r}, \mathbf{k}_F, \varepsilon_n)$ nicht verändert werden:

$$d\mathcal{E} = \frac{\hbar c}{2e} \int_V d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) \right\} \cdot d(\nabla \tilde{\phi}) \quad (\text{C.26})$$

Ebenso sind auch die anderen Stationaritätsbedingungen, Gleichungen (C.15), (C.16), (C.19) und (C.20), die für das Verschwinden der Variationen nach Δ , Δ^\dagger , a , b ausgenutzt wurden, unter dieser Eichtransformation invariant.

Das Volumenintegral wird nun in ein Oberflächenintegral umgewandelt. Zunächst der Beitrag des Vektorpotentials:

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar c}{2e} \int_V d^3 r' \left\{ -\frac{1}{4\pi} \text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right\} \cdot d(\nabla \tilde{\phi}) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_V d^3 r' \left\{ \nabla \cdot \left((\text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}')) d\tilde{\phi} \right) - d\tilde{\phi} \nabla \cdot (\text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}')) \right\} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_V d^3 r' \nabla \cdot \left((\text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}')) d\tilde{\phi} \right) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left((\text{rot rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}')) d\tilde{\phi} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

Hier wird die Vektoridentität $\text{rot}(\psi \mathbf{v}) = (\nabla \psi) \times \mathbf{v} + \psi \text{rot } \mathbf{v}$ verwendet, die für ein beliebiges

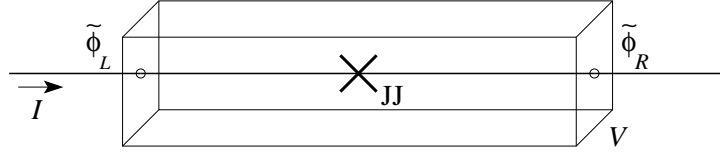


Abbildung C.1: Skizze zum Integrationsgebiet. Das Volumen V umschließt den Josephson-Kontakt (JJ), durch den ein Strom I fließt. Die Stirnflächen (linke und rechte Begrenzungsfläche) stellen auf dem Querschnitt des Supraleiters Flächen konstanter eichinvarianter Phase dar. Diese eichinvarianten Phasen sind gegeben durch $\tilde{\phi}_L$ und $\tilde{\phi}_R$.

skalares Feld ψ sowie ein beliebiges Vektorfeld \mathbf{v} gilt:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left((\text{rot rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}')) d\tilde{\phi} \right) \\
= & -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \left(\text{rot} \left(d\tilde{\phi} \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) \right) - d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \times \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right\} \\
= & -\frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \oint_{C=\partial S} d\mathbf{l}' \cdot \left(d\tilde{\phi} \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) \\
& + \frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \times \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) \tag{C.28}
\end{aligned}$$

Das erste Integral verschwindet, da es sich um eine geschlossene Fläche $S = \partial V$ handelt und der Weg $C = \partial S$ somit keinen Beitrag liefert. Beim zweiten wird zyklisch vertauscht:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \times \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \right) \\
= & \frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \left(\hat{\mathbf{n}} \times d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \right) \\
= & \frac{1}{4\pi} \frac{\hbar c}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \left(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \left(d\tilde{\phi} \right) \right) \tag{C.29}
\end{aligned}$$

Die Stirnflächen des Integrationsvolumens aus Abbildung C.1 sind auf dem Querschnitt des Supraleiters Flächen konstanter eichinvarianter Phase. Deshalb sind auf diesen der Normalenvektor $\hat{\mathbf{n}}$ und der Gradient von $d\tilde{\phi}$ parallel orientiert und die Stirnflächen liefern somit keinen Beitrag. Auf allen anderen Flächen ist $d\tilde{\phi} = 0$, da diese Flächen außerhalb des Supraleiters liegen. Folglich verschwindet der Beitrag des Vektorpotentials vollständig und es verbleibt der Beitrag der Stromdichte:

$$d\mathcal{E} = \frac{\hbar}{2e} \int_V d^3r' \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) \cdot d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \tag{C.30}$$

Auch bei diesem Ausdruck wird das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral umgewandelt:

$$\begin{aligned}
d\mathcal{E} &= \frac{\hbar}{2e} \int_V d^3r' \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) d \left(\nabla \tilde{\phi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2e} \int_V d^3r' \left\{ \nabla \cdot \left(\mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) d\tilde{\phi} \right) - d\tilde{\phi} \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \nabla \tilde{\phi}, a, b) \right\} \\
&= \frac{\hbar}{2e} \int_V d^3r' \nabla \cdot \left(\mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) d\tilde{\phi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) d\tilde{\phi} \right) \tag{C.31}
\end{aligned}$$

Entsprechend Abbildung C.1 tragen zu dem Oberflächenintegral nur die Flächen bei, durch die die Ströme in das Volumen V hinein bzw. aus ihm heraus fließen. Dort liegen die eichinvarianten Phasen $\tilde{\phi}_L$ bzw. $\tilde{\phi}_R$ vor, da weit weg vom Josephson-Kontakt Querschnitte des Supraleiters Flächen konstanter eichinvarianter Phase sind. Damit:

$$\begin{aligned} d\mathcal{E} &= \frac{\hbar}{2e} \int_{S=\partial V} d\sigma' \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}'; \Delta, \Delta^\dagger, \mathbf{A}, a, b) d\phi \\ &= \frac{\hbar}{2e} \left[I d\tilde{\phi}_R - I d\tilde{\phi}_L \right] \\ &= \frac{\hbar}{2e} I d(\tilde{\phi}_R - \tilde{\phi}_L) \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

Mit der eichinvarianten Phasendifferenz γ , gegeben durch

$$\gamma = \tilde{\phi}_R - \tilde{\phi}_L = \phi_R - \phi_L - \frac{2e}{\hbar c} \int_{\mathbf{r}_L}^{\mathbf{r}_R} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A} \quad (\text{C.33})$$

folgt:

$$d\mathcal{E} = \frac{\hbar}{2e} I d\gamma \quad (\text{C.34})$$

Die Integration beider Seiten liefert

$$\mathcal{E}(\gamma) - \mathcal{E}(0) = \frac{\hbar}{2e} \int_0^\gamma d\gamma' I(\gamma') \quad (\text{C.35})$$

Diese Formel liefert die Änderung der Freien Energie eines Josephson-Kontaktes, die durch eine Änderung der eichinvarianten Phasendifferenz $\gamma = \phi_R - \phi_L - \frac{2e}{\hbar c} \int_{\mathbf{r}_L}^{\mathbf{r}_R} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}$ hervorgerufen wird. Die beschriebene Herleitung basiert auf der Eichinvarianz des Eilenberger-Funktionalen sowie auf der Stationarität bezüglich der Variation nach den Parametern Δ , Δ^\dagger , \mathbf{A} , a und b im Fall selbstkonsistenter Lösungen. Der Vorfaktor $\hbar/(2e)$ folgt direkt aus der durchgeführten Eichtransformation.

Zur Herleitung von Gleichung (C.35) sollten abschließend zwei Punkte bemerkt werden:

- Wird zur Auswertung von Gleichung (C.35) eine Strom-Phasen-Beziehung verwendet, die nicht selbstkonsistent berechnet wurde, so folgt eine obere Schranke für die Änderung der Freien Energie.
- Die angegebene Herleitung ist in ihrer Gültigkeit nicht auf Josephson-Kontakte beschränkt, sondern gilt für beliebige Strukturen mit einer Strom-Phasen-Beziehung.

Anhang D

Lösung der Riccati-Gleichungen mit konstanten Koeffizienten

Die Riccati-Gleichungen für $a(s)$ bzw. $b(s)$

$$\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} a(s) + [2\varepsilon_n + \Delta^\dagger a(s)] a(s) - \Delta = 0 \quad (\text{D.1})$$

$$\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} b(s) - [2\varepsilon_n + \Delta b(s)] b(s) + \Delta^\dagger = 0 \quad (\text{D.2})$$

können im Fall konstanter Koeffizienten ε_n und Δ analytisch integriert werden. Dies wird in diesem Anhang kurz beschrieben und die Lösungen für $a(s)$ und $b(s)$ werden angegeben.

Zunächst zur Gleichung für $a(s)$. Eine spezielle Lösung der Differentialgleichung (D.1) kann durch Vernachlässigen des Gradiententerms gewonnen werden:

$$a_0 = \frac{\Delta}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (\text{D.3})$$

Mit dieser speziellen Lösung definiert man eine neue Funktion $z_a(s)$:

$$z_a(s) = \frac{1}{a(s) - a_0} \quad \Leftrightarrow \quad a(s) = \frac{1}{z_a(s)} + a_0$$

Damit folgt

$$\frac{\partial}{\partial s} a(s) = -\frac{1}{(z_a(s))^2} \cdot \frac{\partial z_a(s)}{\partial s}$$

Einsetzen in Gleichung (D.1) und Ausnutzen der speziellen Lösung a_0 liefert

$$\frac{\partial}{\partial s} z_a(s) = \frac{\Delta^\dagger}{\hbar v_F} + \left(\frac{2\varepsilon_n}{\hbar v_F} + \frac{1}{\hbar v_F} \cdot \frac{2|\Delta|^2}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \right) \cdot z_a(s)$$

Diese Differentialgleichung für die Funktion $z_a(s)$ wird gelöst durch

$$z_a(s) = -c_a + A \cdot e^{c \cdot s}$$

mit

$$c_a = \frac{\Delta^\dagger}{2\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (\text{D.4})$$

$$c = \frac{2}{\hbar v_F} \cdot \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2} \quad (\text{D.5})$$

Damit ergibt sich folgende Lösung für die Funktion $a(s)$:

$$a(s) = \frac{1}{-c_a + A \cdot e^{c \cdot s}} + a_0 \quad (\text{D.6})$$

Der Koeffizient A kann durch eine Anfangsbedingung $a(s = s_0) = a_{s_0}$ bestimmt werden.

Analog folgt durch Vernachlässigen des Gradiententermes eine spezielle Lösung für Gleichung (D.2):

$$b_0 = \frac{\Delta^\dagger}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (\text{D.7})$$

Man definiert nun eine Funktion $z_b(s)$ mit

$$z_b(s) = \frac{1}{b(s) - b_0} \quad \Leftrightarrow \quad b(s) = \frac{1}{z_b(s)} + b_0$$

und es folgt

$$\frac{\partial}{\partial s} b(s) = -\frac{1}{(z_b(s))^2} \cdot \frac{\partial z_b(s)}{\partial s}$$

Einsetzen in Gleichung (D.2) und Berücksichtigung der speziellen Lösung b_0 ergibt

$$\frac{\partial}{\partial s} z_b(s) = -\frac{\Delta}{\hbar v_F} - \left(\frac{2\varepsilon_n}{\hbar v_F} + \frac{1}{\hbar v_F} \cdot \frac{2|\Delta|^2}{\varepsilon_n + \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \right) \cdot z_b(s)$$

Diese Differentialgleichung für die Funktion $z_b(s)$ wird gelöst durch

$$z_b(s) = -c_b + B \cdot e^{-c \cdot s}$$

mit

$$c_b = \frac{\Delta}{2\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (\text{D.8})$$

$$c = \frac{2}{\hbar v_F} \cdot \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2} \quad (\text{D.9})$$

Die Lösung für die Funktion $b(s)$ ergibt sich damit folgendermaßen:

$$b(s) = \frac{1}{-c_b + B \cdot e^{-c \cdot s}} + b_0 \quad (\text{D.10})$$

Der Koeffizient B kann wiederum durch eine Anfangsbedingung $b(s = s_0) = b_{s_0}$ bestimmt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] B. D. Josephson, *Possible new effects in superconductive tunneling*, Phys. Lett. **1**, 251 (1962).
- [2] P. W. Anderson, *Special effects in superconductivity*, in: *Lectures on the many-body problem*, Vol. 2, herausgegeben von E. R. Caianiello, Academic Press (New York 1964).
- [3] P. W. Anderson und A. H. Dayem, *Radio-frequency effects in superconducting thin film bridges*, Phys. Rev. Lett. **13**, 195 (1964).
- [4] K. K. Likharev, *Superconducting weak links*, Rev. Mod. Phys. **51**, 101 (1979).
- [5] J. Lambe, A. H. Silver, J. E. Mercereau und R. C. Jaklevic, *Microwave observation of quantum interference effects in superconductors*, Phys. Lett. **11**, 16 (1964).
- [6] R. D. Parks, J. M. Mochel und L. V. Sargent, Jr., *Critical-field behavior of a microscopic superconducting bridge*, Phys. Rev. Lett. **13**, 331 (1964).
- [7] Siehe z. B. http://nobelprize.org/nobel_prizes/lists/1973.html.
- [8] A. A. Golubov, M. Yu. Kupriyanov und E. Il'ichev, *The current-phase relation in Josephson junctions*, Rev. Mod. Phys. **76**, 411 (2004).
- [9] L. N. Bulaevskii, V. V. Kuzii und A. A. Sobyenin, *Superconducting system with weak coupling to the current in the ground state*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **25**, 314 (1977) [JETP Lett. **25**, 290 (1977)].
- [10] R. G. Mints, *Self-generated flux in Josephson junctions with alternating critical current density*, Phys. Rev. B **57**, R3221 (1998).
- [11] A. Buzdin und A. E. Koshelev, *Periodic alternating 0- and π -junction structures as realizations of φ -Josephson junctions*, Phys. Rev. B **67**, 220504 (2003).
- [12] E. Goldobin, D. Kölle, R. Kleiner und A. Buzdin, *Josephson junctions with second harmonic in the current-phase relation: properties of φ junctions*, Phys. Rev. B **76**, 224523 (2007).
- [13] W. C. Stewart, *Current-voltage characteristics of Josephson junctions*, Appl. Phys. Lett. **12**, 277 (1968).

- [14] D. E. McCumber, *Tunneling and weak-link superconductor phenomena having potential device applications*,
J. Appl. Phys. **39**, 2503 (1968).
- [15] B. Irmer, R. H. Blick, F. Simmel, W. Gödel, H. Lorenz und J. P. Kotthaus, *Josephson junctions defined by a nanoplough*,
Appl. Phys. Lett. **73**, 2051 (1998).
- [16] V. Bouchiat, M. Faucher, C. Thirion, W. Wernsdorfer, T. Fournier und B. Pannetier, *Josephson junctions and superconducting quantum interference devices made by local oxidation of niobium ultrathin films*,
Appl. Phys. Lett. **79**, 123 (2001).
- [17] M. Faucher, T. Fournier, B. Pannetier, C. Thirion, W. Wernsdorfer, J. C. Villegier und V. Bouchiat, *Niobium and niobium nitride SQUIDs based on anodized nanobridges made with an atomic force microscope*,
Physica C **368**, 211 (2002).
- [18] K. Hasselbach, D. Mailly und J. R. Kirtley, *Micro-superconducting quantum interference device characteristics*,
J. Appl. Phys. **91**, 4432 (2002).
- [19] S. K. H. Lam und D. L. Tilbrook, *Development of a niobium nanosuperconducting quantum interference device for the detection of small spin populations*,
Appl. Phys. Lett. **82**, 1078 (2003).
- [20] V. I. Shnyrkov und S. I. Melnik, *Quantum detector based on a superposition of macroscopic states in a phase qubit*,
Fiz. Nizk. Temp. **33**, 22 (2007) [Low Temp. Phys. **33**, 15 (2007)];
Fiz. Nizk. Temp. **33**, 643 (2007) [Low Temp. Phys. **33**, 484 (2007)].
- [21] A. G. P. Troeman, H. Derking, B. Borger, J. Pleikies, D. Veldhuis und H. Hilgenkamp, *NanoSQUIDs based on niobium constrictions*,
Nano Lett. **7**, 2152 (2007).
- [22] A. G. P. Troeman, S. H. W. van der Ploeg, E. Il'ichev, H.-G. Meyer, A. A. Golubov, M. Yu. Kupriyanov und H. Hilgenkamp, *Temperature dependence measurement of the supercurrent-phase relationship in niobium nanobridges*,
Phys. Rev. B **77**, 024509 (2008).
- [23] U. Büttner, G. L. Hardie, R. Rossouw, V. V. Srinivasu und W. J. Perold, *Fabrication of submicron YBCO Josephson junctions by a sample mosaic navigation assisted laser etching process*,
Supercond. Sci. Technol. **20**, S426 (2007).
- [24] A. A. O. Elkash, U. Büttner, M. Meincken, G. L. Hardie, V. V. Srinivasu und W. J. Perold, *Nanoplough-constrictions on thin YBCO films made with atomic force microscopy*,
J. Nanosci. Nanotechnol. **7**, 3348 (2007).
- [25] L. Hao, J. C. Macfarlane, J. C. Gallop, D. Cox, J. Beyer, D. Drung und T. Schurig, *Measurement and noise performance of nano-superconducting-quantum-interference devices fabricated by focused ion beam*,
Appl. Phys. Lett. **92**, 192507 (2008).
- [26] K. Kajino, T. Kimura, Y. Horii, M. Watanabe, M. Inoue und A. Fujimaki, *Preparation of narrowed nanobridges down to 30 nm with reduced degradation*,
eingereicht bei IEEE Trans. Appl. Supercond. (Preprint erhältlich unter <http://www.super.nuqe.nagoya-u.ac.jp/en/paper/asc2008.html>).

- [27] K. K. Likharev und V. K. Semenov, *RSFQ logic/memory family: a new Josephson-junction technology for sub-terahertz-clock-frequency digital systems*, IEEE Trans. Appl. Supercond. **1**, 3 (1991).
- [28] V. Ambegaokar und A. Baratoff, *Tunneling between superconductors*, Phys. Rev. Lett. **10**, 486 (1963); Phys. Rev. Lett. **11**, 104 (1963).
- [29] L. G. Aslamazov und A. I. Larkin, *Josephson effect in superconducting point contacts*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **9**, 150 (1969) [JETP Lett. **9**, 87 (1969)].
- [30] A. H. Dayem und C. C. Grimes, *Microwave emission from superconducting point-contacts*, Appl. Phys. Lett. **9**, 47 (1966).
- [31] J. E. Zimmerman, J. A. Cowen und A. H. Silver, *Coherent radiation from voltage-biased weakly connected superconductors*, Appl. Phys. Lett. **9**, 353 (1966).
- [32] J. E. Zimmerman und A. H. Silver, *Coherent radiation from high-order quantum transitions in small-area superconducting contacts*, Phys. Rev. Lett. **19**, 14 (1967).
- [33] I. Ya. Krasnopolin und M. S. Khaikin, *Generation and detection of microwave radiation by a superconducting point contact of tin electrodes*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **6**, 633 (1967) [JETP Lett. **6**, 129 (1967)].
- [34] I. O. Kulik und A. N. Omelyanchouk, *Properties of superconducting microbridges in the pure limit*, Fiz. Nizk. Temp. **3**, 945 (1977) [Sov. J. Low Temp. Phys. **3**, 459 (1977)].
- [35] I. O. Kulik und A. N. Omelyanchouk, *Josephson effect in superconductive bridges: microscopic theory*, Fiz. Nizk. Temp. **4**, 296 (1978) [Sov. J. Low Temp. Phys. **4**, 142 (1978)].
- [36] M. Zareyan, Yu. A. Kolesnichenko und A. N. Omelyanchouk, *On the self-consistent theory of Josephson effect in ballistic superconducting microconstrictions*, Fiz. Nizk. Temp. **25**, 1154 (1999) [Low Temp. Phys. **25**, 864 (1999)].
- [37] A. I. Buzdin, L. N. Bulaevskii und S. V. Panyukov, *Critical-current oscillations as a function of the exchange field and thickness of the ferromagnetic metal (F) in an S - F - S Josephson junction*, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **35**, 147 (1982) [JETP Lett. **35**, 178 (1982)].
- [38] V. V. Ryazanov, V. A. Oboznov, A. Yu. Rusanov, A. V. Veretennikov, A. A. Golubov und J. Aarts, *Coupling of two superconductors through a ferromagnet: evidence for a π junction*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2427 (2001).
- [39] T. Kontos, M. Aprili, J. Lesueur, G. Genêt, B. Stephanidis und R. Boursier, *Josephson junction through a thin ferromagnetic layer: negative coupling*, Phys. Rev. Lett. **89**, 137007 (2002).
- [40] Y. Blum, A. Tsukernik, M. Karpovski und A. Palevski, *Oscillations of the superconducting critical current in Nb-Cu-Ni-Cu-Nb junctions*, Phys. Rev. Lett. **89**, 187004 (2002).
- [41] A. Bauer, J. Bentner, M. Aprili, M. L. Della Rocca, M. Reinwald, W. Wegscheider und C. Strunk, *Spontaneous supercurrent induced by ferromagnetic π junctions*, Phys. Rev. Lett. **92**, 217001 (2004).

- [42] H. Sellier, C. Baraduc, F. Lefloch und R. Calemczuk, *Half-integer Shapiro steps at the $0-\pi$ crossover of a ferromagnetic Josephson junction*, Phys. Rev. Lett. **92**, 257005 (2004).
- [43] S. M. Frolov, D. J. Van Harlingen, V. A. Oboznov, V. V. Bolginov und V. V. Ryazanov, *Measurement of the current-phase relation of superconductor/ferromagnet/superconductor π Josephson junctions*, Phys. Rev. B **70**, 144505 (2004).
- [44] M. Weides, M. Kemmler, H. Kohlstedt, R. Waser, D. Koelle, R. Kleiner und E. Goldobin, *$0-\pi$ -Josephson tunnel junctions with ferromagnetic barrier*, Phys. Rev. Lett. **97**, 247001 (2006).
- [45] F. Born, M. Siegel, E. K. Hollmann, H. Braak, D. Yu. Gusakova und M. Yu. Kupriyanov, *Multiple $0-\pi$ transitions in superconductor/insulator/ferromagnet/superconductor Josephson tunnel junctions*, Phys. Rev. B **74**, 140501 (2006).
- [46] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg und A. J. Leggett, *Experimental determination of the superconducting pairing state in YBCO from the phase coherence of YBCO-Pb dc SQUIDs*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993).
- [47] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, Lock-See Yu-Jahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sun und M. B. Ketchen, *Pairing symmetry and flux quantization in a tricrystal superconducting ring of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$* , Phys. Rev. Lett. **73**, 593 (1994).
- [48] D. J. Van Harlingen, *Phase-sensitive tests of the symmetry of the pairing state in the high-temperature superconductors – evidence for $d_{x^2-y^2}$ -symmetry*, Rev. Mod. Phys. **67**, 515 (1995).
- [49] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, *Pairing symmetry in cuprate superconductors*, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [50] Yu. S. Barash, A. V. Galaktionov und A. D. Zaikin, *Charge transport in junctions between d -wave superconductors*, Phys. Rev. B **52**, 665 (1995).
- [51] Y. Tanaka und S. Kashiwaya, *Theory of the Josephson effect in d -wave superconductors*, Phys. Rev. B **53**, R11957 (1996).
- [52] Yu. S. Barash, H. Burkhardt und D. Rainer, *Low-temperature anomaly in the Josephson critical current of junctions in d -wave superconductors*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4070 (1996).
- [53] Y. Tanaka und S. Kashiwaya, *Theory of Josephson effects in anisotropic superconductors*, Phys. Rev. B **56**, 892 (1997).
- [54] Y. A. Kolesnichenko, A. N. Omelyanchouk und A. M. Zagoskin, *Spontaneous currents in Josephson junctions between unconventional superconductors and d -wave qubits (Review)*, Fiz. Nizk. Temp. **30**, 714 (2004) [Low Temp. Phys. **30**, 535 (2004)].
- [55] E. Il'ichev, V. Zakosarenko, R. P. J. IJsselsteijn, H. E. Koenig, V. Schultze, H.-G. Meyer, M. Grajcar und R. Hlubina, *Anomalous periodicity of the current-phase relationship of grain-boundary Josephson Junctions in high- T_c superconductors*, Phys. Rev. B **60**, 3096 (1999).

- [56] R. R. Schulz, B. Chesca, B. Goetz, C. W. Schneider, A. Schmehl, H. Bielefeldt, H. Hilgenkamp, J. Mannhart und C. C. Tsuei, *Design and realization of an all d-wave dc π -superconducting quantum interference device*, Appl. Phys. Lett. **76**, 912 (2000).
- [57] E. Il'ichev, M. Grajcar, R. Hlubina, R. P. J. IJsselsteijn, H. E. Koenig, H.-G. Meyer, A. Golubov, M. H. S. Amin, A. M. Zagoskin, A. N. Omelyanchouk und M. Yu. Kupriyanov, *Degenerate ground state in a mesoscopic $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ grain boundary Josephson junction*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5369 (2001).
- [58] B. Chesca, R. R. Schulz, B. Goetz, C. W. Schneider, H. Hilgenkamp und J. Mannhart, *D-wave induced zero-field resonances in dc-superconducting quantum interference devices*, Phys. Rev. Lett. **88**, 177003 (2002).
- [59] J. J. A. Baselmans, A. F. Morpurgo, B. J. van Wees und T. M. Klapwijk, *Reversing the direction of the supercurrent in a controllable Josephson junction*, Nature **397**, 43 (1999).
- [60] J. J. A. Baselmans, T. T. Heikkilä, B. J. van Wees und T. M. Klapwijk, *Direct observation of the transition from the conventional superconducting state to the π state in a controllable Josephson junction*, Phys. Rev. Lett. **89**, 207002 (2002).
- [61] J. Huang, F. Pierre, T. T. Heikkilä, F. K. Wilhelm und N. O. Birge, *Observation of a controllable π junction in a 3-terminal Josephson device*, Phys. Rev. B **66**, 020507 (2002).
- [62] E. Terzioglu und M. R. Beasley, *Complementary Josephson junction devices and circuits: a possible new approach to superconducting electronics*, IEEE Trans. Appl. Supercond. **8**, 48 (1998).
- [63] T. Ortlepp, Ariando, O. Mielke, C. J. M. Verwijs, K. F. K. Foo, H. Rogalla, F. H. Uhlmann und H. Hilgenkamp, *Flip-flopping fractional flux quanta*, Science **312**, 1495 (2006).
- [64] A. V. Ustinov und V. K. Kaplunenko, *Rapid single-flux quantum logic using π -shifters*, J. Appl. Phys. **94**, 5405 (2003).
- [65] J. Pearl, *Current distribution in superconducting films carrying quantized fluxoids*, Appl. Phys. Lett. **5**, 65 (1964).
- [66] G. Eilenberger, *Transformation of Gorkov's Equation for Type II Superconductors into Transport-Like Equations*, Z. Physik **214**, 195 (1968).
- [67] A. I. Larkin und Y. N. Ovchinnikov, *Quasiclassical Method in the Theory of Superconductivity*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **55**, 2262 (1968) [Sov. Phys. JETP **28**, 1200 (1969)].
- [68] N. Schopohl und K. Maki, *Quasiparticle spectrum around a vortex line in a d-wave superconductor*, Phys. Rev. B **52**, 490 (1995).
- [69] N. Schopohl, *Transformation of the Eilenberger equations of superconductivity to a scalar Riccati equation*, arXiv:cond-mat/9804064.

- [70] A. Shelankov und M. Ozana, *Quasiclassical theory of superconductivity: a multiple-interface geometry*, Phys. Rev. B **61**, 7077 (2000).
- [71] M. Eschrig, *Distribution functions in nonequilibrium theory of superconductivity and Andreev spectroscopy in unconventional superconductors*, Phys. Rev. B **61**, 9061 (2000).
- [72] A. Levy Yeyati, A. Martín-Rodero und F. J. García-Vidal, *Self-consistent theory of superconducting mesoscopic weak links*, Phys. Rev. B **51**, 3743 (1995).
- [73] H. Fischer und H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Band 2, Teubner (Stuttgart, 2. Auflage 2004).
- [74] Für hilfreiche Diskussionen zur Berechnung des Vektorpotentials danke ich E. H. Brandt, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart.
- [75] A. V. Zaitsev, *Quasiclassical equations of the theory of superconductivity for contiguous metals and the properties of constricted microcontacts*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **86**, 1742 (1984) [Sov. Phys. JETP **59**, 1015 (1985)].
- [76] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical recipes in C++: the art of scientific computing*, Cambridge University Press (Cambridge, 2. Auflage 2002).
- [77] H. R. Schwarz und N. Köckler, *Numerische Mathematik*, Teubner (Stuttgart, 6. Auflage 2006).
- [78] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (New York 1972).
- [79] A. Gumann, *Quasiteilchenspektrum in der Umgebung eines Abrikosov-Vortex in einem Zwei-Band-Supraleiter*, Diplomarbeit, Universität Tübingen (2006).
- [80] R. D. Parks (Hrsg.), *Superconductivity*, Band 2, Marcel Dekker (New York 1969).
- [81] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, Dover (New York 1996), ungekürzte Neuauflage der 2. Auflage von McGraw-Hill (New York 1975).
- [82] B. Chapman, G. Jost und R. van der Pas, *Using OpenMP: portable shared memory parallel programming*, The MIT Press (Cambridge 2008).
- [83] T. Dahm, S. Graser, C. Iniotakis und N. Schopohl, *Spectrum of low-energy excitations in the vortex state: comparison of the Doppler-shift method to a quasiclassical approach*, Phys. Rev. B **66**, 144515 (2002).
- [84] A. Gumann, T. Dahm und N. Schopohl, *Microscopic theory of superconductor-constriction-superconductor Josephson junctions in a magnetic field*, Phys. Rev. B **76**, 064529 (2007).
- [85] I. O. Kulik, *Macroscopic quantization and the proximity effect in S-N-S junctions*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **57**, 1745 (1969) [Sov. Phys. JETP **30**, 944 (1970)].
- [86] C. Ishii, *Josephson currents through junctions with normal metal barriers*, Prog. Theor. Phys. **44**, 1525 (1970).

- [87] C. Ishii, *Thermodynamical properties of Josephson junction with a normal metal barrier*,
Progr. Theor. Phys. **47**, 1464 (1972).
- [88] P. G. de Gennes und D. Saint-James, *Elementary excitations in the vicinity of a normal metal-superconducting metal contact*,
Phys. Lett. **4**, 151 (1963).
- [89] D. Saint-James, *Excitations élémentaires au voisinage de la surface de séparation d'un métal normal et d'un métal supraconducteur*,
J. Phys. (Paris) **25**, 899 (1964).
- [90] A. F. Andreev, *The thermal conductivity of the intermediate state in superconductors*,
Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823 (1964) [Sov. Phys. JETP **19**, 1228 (1964)].
- [91] A. F. Andreev, *Electron spectrum of the intermediate state of superconductors*,
Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 655 (1965) [Sov. Phys. JETP **22**, 455 (1966)].
- [92] A. Martín-Rodero, F. J. García-Vidal und A. Levy Yeyati, *Microscopic theory of Josephson mesoscopic constrictions*,
Phys. Rev. Lett. **72**, 554 (1994).
- [93] A. Furusaki und M. Tsukada, *A unified theory of clean Josephson junctions*,
Physica B **165&166**, 967 (1990).
- [94] A. Furusaki und M. Tsukada, *Current-carrying states in Josephson junctions*,
Phys. Rev. B **43**, 10164 (1991).
- [95] A. Furusaki, *Josephson current carried by Andreev levels in superconducting quantum point contacts*,
Superlattices Microstruct. **25**, 809 (1999).
- [96] P. Miller und J. K. Freericks, *Microscopic self-consistent theory of Josephson junctions including dynamical electron correlations*,
J. Phys.: Condens. Matter **13**, 3187 (2001).
- [97] R. Zikić, L. Dobrosavljević-Grujić und Z. Radović, *Phase-dependent energy spectrum in Josephson weak links*,
Phys. Rev. B **59**, 14644 (1998).
- [98] W. Buckel und R. Kleiner, *Supraleitung: Grundlagen und Anwendungen*,
Wiley-VCH (Weinheim, 6. Auflage 2004).
- [99] I. O. Kulik und A. N. Omelyanchouk, *Current flow in long superconducting junctions*,
Zh. Eksp. Teor. Fiz. **68**, 2139 (1975) [Sov. Phys. JETP **41**, 1071 (1976)].
- [100] G. Eilenberger, *General approximation method for the free energy functional of superconducting alloys*,
Z. Physik **190**, 142 (1966).
- [101] C. T. Rieck, K. Scharnberg und N. Schopohl, *Quasiclassical theory of the upper critical field of high-field superconductors. Application to momentum-dependent scattering*,
J. Low Temp. Phys. **84**, 381 (1991).
- [102] T. Dahm und N. Schopohl, *Fermi surface topology and the upper critical field in two-band superconductors: application to MgB₂*,
Phys. Rev. Lett. **91**, 017001 (2003).
- [103] D. Saint-James und P. G. de Gennes, *Onset of superconductivity in decreasing fields*,
Phys. Lett. **7**, 306 (1963).

- [104] A. A. Abrikosov, *Concerning surface superconductivity in strong magnetic fields*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 720 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 480 (1965)].
- [105] P. Scotto und W. Pesch, *On the theory of critical fields of superconducting films*, J. Low Temp. Phys. **84**, 301 (1991),
- [106] A. P. van Gelder, *Nucleation of superconductivity above H_{c3}* , Phys. Rev. Lett. **20**, 1435 (1968).
- [107] H. J. Fink, *Nucleation of superconductivity above H_{c3}* , Phys. Rev. **177**, 1017 (1969).
- [108] C.-R. Hu, *Midgap surface states as a novel signature for $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **72**, 1526 (1994).
- [109] Y. Tanaka und S. Kashiwaya, *Theory of tunneling spectroscopy of d-wave superconductors*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3451 (1995).
- [110] H. Walter, W. Prusseit, R. Semerad, H. Kinder, W. Assmann, H. Huber, H. Burkhardt, D. Rainer und J. A. Sauls, *Low-temperature anomaly in the penetration depth of $YBa_2Cu_3O_7$ films: evidence for Andreev bound states at surfaces*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3598 (1998).
- [111] L. Alff, S. Kleefisch, U. Schoop, M. Zittartz, T. Kemen, T. Bauch, A. Marx und R. Gross, *Andreev bound states in high temperature superconductors*, Eur. Phys. J. B **5**, 423 (1998).
- [112] S. Kashiwaya und Y. Tanaka, *Tunnelling effects on surface bound states in unconventional superconductors*, Rep. Prog. Phys. **63**, 1641 (2000).
- [113] T. Löfwander, V. S. Shumeiko und G. Wendin, *Andreev bound states in high- T_c superconducting junctions*, Supercond. Sci. Technol. **14**, R53 (2001).
- [114] G. Deutscher, *Andreev-Saint-James reflections: a probe of cuprate superconductors*, Rev. Mod. Phys. **77**, 109 (2005).
- [115] C. Iniotakis, S. Graser, T. Dahm und N. Schopohl, *Local density of states at polygonal boundaries of d-wave superconductors*, Phys. Rev. B **71**, 214508 (2005).
- [116] C. Iniotakis, *Andreev bound states in rounded corners of d-wave superconductors*, Physica C **460-460**, 1143 (2007).
- [117] A. Gumann, C. Iniotakis und N. Schopohl, *Geometric π Josephson junction in d-wave superconducting thin films*, Appl. Phys. Lett. **91**, 192502 (2007).
- [118] A. Gumann, C. Iniotakis und N. Schopohl, *Geometric π Josephson junction: current-phase relations and critical current*, IEEE Trans. Appl. Supercond., angenommen (arXiv:0902.3991).
- [119] A. Gumann und N. Schopohl, *Phase diagram of geometric d-wave superconductor Josephson junctions*, Phys. Rev. B **79**, 144505 (2009).

- [120] L. Fábrega, B. Martínez, J. Fontcuberta, X. Obradors und S. Piñol, *Critical fields and fundamental lengths in a superconducting electron-doped $Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$ single crystal*, Phys. Rev. B **46**, 5581 (1992).
- [121] J. Fontcuberta, *The electron-doped cuprates: some normal-state and superconducting properties*, Phys. Scr. **T55**, 147 (1994).
- [122] C. Petrovic, R. Movshovich, M. Jaime, P. G. Pagliuso, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk und J. D. Thompson, *A new heavy-fermion superconductor $CeIrIn_5$: a relative to the cuprates ?*, Europhys. Lett. **53**, 354 (2001).
- [123] Y. Kasahara, T. Iwasawa, Y. Shimizu, H. Shishido, T. Shibauchi, I. Vekhter und Y. Matsuda, *Thermal conductivity evidence for a $d_{x^2-y^2}$ pairing symmetry in the heavy-fermion $CeIrIn_5$ superconductor*, Phys. Rev. Lett. **100**, 207003 (2008).
- [124] M. Seifried, C. Häussler, J. Oppenländer und N. Schopohl, *Superconducting quantum interference filters consisting of Josephson junctions with unconventional current-phase relation*, IEEE Trans. Appl. Supercond. **15**, 781 (2005).
- [125] M. Kemmler, B. Groß, private Mitteilung.
- [126] A. Barone und G. Paternò, *Physics and applications of the Josephson effect*, John Wiley & Sons (New York 1982).
- [127] B. D. Josephson, *Supercurrents through barriers*, Adv. Phys. **14**, 419 (1965).
- [128] G. Eilenberger, *Ableitung verallgemeinerter Ginzburg-Landau-Gleichungen für reine Supraleiter aus einem Variationsprinzip*, Z. Physik **182**, 427 (1965).
- [129] N. Schopohl, private Mitteilung.

Publikationsliste

1. *Induced Kramer-Pesch-Effect in a two gap superconductor: application to MgB₂*,
A. Gumann, S. Graser, T. Dahm und N. Schopohl,
Physical Review B **73**, 104506 (2006).
2. *Vortex core shrinkage in a two gap superconductor: application to MgB₂*,
S. Graser, **A. Gumann**, T. Dahm und N. Schopohl,
Physica C **460-462**, 564 (2007).
3. *Microscopic theory of superconductor-constriction-superconductor Josephson junctions in a magnetic field*,
A. Gumann, T. Dahm und N. Schopohl,
Physical Review B **76**, 064529 (2007).
4. *Geometric π Josephson junction in d-wave superconducting thin films*,
A. Gumann, C. Iniotakis und N. Schopohl,
Applied Physics Letters **91**, 192502 (2007).
5. *Magnets in motion*,
B. Thomaszewski, **A. Gumann**, S. Pabst und Wolfgang Strasser,
ACM Transactions on Graphics (Proceedings of SIGGRAPH Asia) **27**, 162 (2008).
6. *Geometric π Josephson junction: current-phase relations and critical current*,
A. Gumann, C. Iniotakis und N. Schopohl,
angenommen bei *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*,
Preprint: arXiv:0902.3991.
7. *Phase diagram of geometric d-wave superconductor Josephson junctions*,
A. Gumann und N. Schopohl,
Physical Review B **79**, 144505 (2009).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

Zuallererst danke ich Prof. Dr. Nils Schopohl herzlich für die hervorragende Betreuung, seine jederzeit offene Tür, die vielfältigen Anregungen und wertvollen Hinweise sowie seine uneingeschränkte Unterstützung. Dankbar bin ich auch dafür, dass er mir die Möglichkeit verschafft hat, die Ergebnisse meiner Arbeit bei verschiedenen Veranstaltungen und Gelegenheiten präsentieren zu dürfen.

Ebenfalls danken möchte ich Prof. Dr. Thomas Dahm für viele interessante Diskussionen und Anregungen. Seine Betreuung und seine Ratschläge haben mir bei der Anfertigung dieser Arbeit sehr geholfen.

Des Weiteren gilt mein Dank Dr. Christian Iniotakis für die fruchtbare Zusammenarbeit. Auch danke ich Christian außerordentlich für das gründliche Korrekturlesen dieser Arbeit.

Dr. Siegfried Graser danke ich für seine Geduld sowie interessante und ausführliche Diskussionen vor allem zu Beginn dieser Arbeit.

Meinen Kollegen Aida Zare und Alexander Markowsky danke ich für viele interessante Unterhaltungen und die freundliche Unterstützung.

Danken möchte ich besonders Boris Groß, Dr. Matthias Kemmler, Prof. Dr. Dieter Kölle und Prof. Dr. Reinhold Kleiner für interessante und spannende Diskussionen bezüglich der experimentellen Realisierung eines geometrischen π -Josephson-Kontaktes.

Des Weiteren gilt mein herzlicher Dank allen Mitarbeitern und Kollegen innerhalb der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Nils Schopohl sowie Prof. Dr. Mario Liu und allen Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe. Nicht zuletzt die gemeinsamen Mittagessen und Kaffeepausen haben für eine äußerst angenehme Atmosphäre gesorgt. Insbesondere möchte ich Sabrina Metzler und Regine Adler herzlich danken, die viele kleine und große Probleme gelöst und jederzeit für ein sehr angenehmes Arbeitsklima gesorgt haben.

Danken möchte ich auch Oliver Müller, der mich gründlich in die Aufgaben des Netzwerkadministrators eingeführt hat. Auch Jörg Tomes hat sich bei verschiedenen Fragen zur Netzwerkadministration Zeit genommen.

Bernhard Thomaszewski danke ich für die hervorragende Zusammenarbeit bezüglich der „Magnets in Motion“, die leider in dieser Arbeit keine Erwähnung finden konnten. Christian Grünzweig danke ich für regelmäßige Telefonate nicht nur aber auch über die Welt der physikalischen Forschung.

Schließlich gilt mein ganz besonderer und wärmster Dank meiner Familie, die mir stets größtmöglichen Rückhalt geboten und mich fortwährend und in jeder Hinsicht während meines Studiums und der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt hat. Eure Unterstützung ist unersetzlich.