25 Hochtemperatur-Supraleiter II

25.a Die Fluss-Gleichungen

Wir kommen nun auf die Behandlung der Hubbard-Wechselwirkung mittels Flussgleichungen zurück. Wir müssen natürlich wieder einen geeigneten Generator η, Gl. (18.25) für die Fluss-Gleichungen aufsuchen. Hierbei werden wir folgendermaßen vorgehen: Wir gehen aus von einer quadratischen Form des Hamilton-Operators

$$G(H) = \frac{1}{2} \sum g_{ij,kl} H_{ji} H_{lk}. \tag{25.1}$$

Diese soll so gewählt werden, dass sie durch die Fluss-Gleichungen ein Minimum wird. Man wählt also eine positiv semi-definite Form g und möchte, dass nach Anwendung der Fluss-Gleichungen nur die Beiträge mit Eigenwerten 0 übrig bleiben. Zunächst wird man g symmetrisch wählen

$$g_{ij,kl} = g_{kl,ij} \tag{25.2}$$

und verlangen, dass G reell ist. Da H hermitesch ist, folgt

$$G^*(H) = \frac{1}{2} \sum g^*_{ij,kl} H_{ij} H_{kl} \tag{25.3}$$

und damit

$$g_{ij,kl} = g^*_{ji,lk}. \tag{25.4}$$

Unter dem Fluss verändert sich G gemäß

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}l} = \sum g_{ij,kl} (\eta_{jm} H_{mi} - H_{jm} \eta_{mi}) H_{lk} = \sum \eta_{ji} (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk}). \tag{25.5}$$

Damit der Ausdruck semi-negativ ist, wählen wir

$$\eta_{ji} = -\sum (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk})^* = \sum (-g_{jm,lk} H_{mi} H_{kl} + g_{mi,lk} H_{jm} H_{kl}), \tag{25.6}$$

das man auch

$$\eta = [H, H^{\mathrm{r}}], \quad H^{\mathrm{r}}_{ij} = \sum g_{ij,lk} H_{kl} \tag{25.7}$$

schreiben kann. Da G unter dem Fluss abnehmen soll, wählt man eine quadratische Form, die für die gewünschte "diagonale" Form verschwindet, deren andere Eigenwerte aber positiv sind. Beispielsweise ist dies mit einem Doppelkommutator mit einem hermiteschen Operator v möglich,

$$H^{\mathrm{r}} = [v, [v, H]]. \tag{25.8}$$

Mit dieser Wahl betrachtet man die Anteile von H als diagonal, die mit v kommutieren. Nimmt man als v zum Beispiel den Operator der Anzahl der Quasiteilchen (Zahl der Löcher unterhalb der Fermikante plus Zahl der Elektronen oberhalb der Fermikante), so ergibt dies ein η, das eine Wechselwirkung liefert, die die Anzahl der Anregungen über die Fermikante erhält. In der Diagonal-Darstellung von v ergibt sich $H^{\mathrm{r}}_{ij} = (v_i - v_j)^2 H_{ij}$. Am einfachsten können wir v als Einteilchen-Operator einführen

$$v = \sum_k v_k c^\dagger_k c_k \tag{25.9}$$

Ein Beitrag der Form $H_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} ... c_{k'_1} c_{k'_2} ...$ erscheint dann in H^{r} mit der Eliminations-Funktion

$$r_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} = (v_{k_1} + v_{k_2} + ... - v_{k'_1} - v_{k'_2} - ...)^2 \tag{25.10}$$

multipliziert. Sie gibt an, wie dringend dieser Term eleiminiert werden soll. Im allgemeinen wird es zweckmäßig sein, die Beiträge mehrerer v zu addieren, damit nur speziell die gewünschten Beiträge in H übrig bleiben

$$r_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} = \sum_\alpha (v^\alpha_{k_1} + v^\alpha_{k_2} + ... - v^\alpha_{k'_1} - v^\alpha_{k'_2} - ...)^2. \tag{25.11}$$

Wir bemerken bei dieser Wahl: Falls der Impuls eines Erzeugungs- und eines Vernichtungs-Operators übereinstimmen, dann ist die Funktion r die gleiche wie wenn die beiden Operatoren entfernt wären. falls insbesondere die Impulse der Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren paarweise übereinstimmen, dann verschwindet r. Nun möchten wir haben, dass r auch für Paare $c^\dagger_{\mathbf{k}}$ und $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$ verschwindet. Dann fordern wir $v_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$. Ähnlich wollen wir, dass r auch für Paare $c^\dagger_{\mathbf{k}}$ und $c^\dagger_{-\mathbf{k}}$ verschwindet. Dazu wählen wir $v_{\mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}} = 0$.

25.b Störungs-Theorie

Wir wollen nun die Fluss-Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}l} = [\eta, H] = [[H, V^{\mathrm{r}}], H] = [[T+V, V^{\mathrm{r}}], T+V] \tag{25.12}$$

störungstheoretisch lösen. In erster Ordnung in der Wechselwirkung erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}V_1(l)}{\mathrm{d}l} = [[T, V_1^{\mathrm{r}}], T] \tag{25.13}$$

und damit

$$\frac{\mathrm{d}V_1(k_1,k_2;q_1,q_2;l)}{\mathrm{d}l} = -\Delta\epsilon(k_1,k_2,q_1,q_2)^2 r(k_1,k_2,q_1,q_2) V_1(k_1,k_2,q_1,q_2;l) \tag{25.14}$$

mit

$$\Delta\epsilon(k_1,k_2,q_1,q_2) = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - \epsilon_{q_1} - \epsilon_{q_2}. \tag{25.15}$$

und

$$V_1(k_1,k_2,q_1,q_2;l) = \mathrm{e}^{-\Delta\epsilon(k_1,k_2,q_1,q_2)^2 r(k_1,k_2,q_1,q_2) l} V(k_1,k_2,q_1,q_2). \tag{25.16}$$

Daher wird der Zerfall von V_1 nicht nur durch die Differenz der Energien $\Delta\epsilon$, sondern auch durch den Eliminations-Faktor r bestimmt. Für die Beiträge in zweiter Ordnung der Wechselwirkung erhält man die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}l} - [[T, V_2^{\mathrm{r}}], T] = [[T, V_1^{\mathrm{r}}], V_1] + [[V_1, V_1^{\mathrm{r}}], T]. \tag{25.17}$$

Auf der rechten Seite ist die Normal-Ordnung durchzuführen. Es bleiben dann Terme vom Typ $c^{\dagger m} c^m$ mit $m = 1,2,3$. Wir werden im wesentlichen Terme mit $m = 2$ betrachten. Für diese kann man die Differentialgleichung lösen. Zu berechnen sind die Beiträge V_2, für die $r = 0$ ist. Für diese verschwindet V_2^{r} auf der linken Seite der Gleichung. Auf der rechten Seite der Gleichung haben wir Beiträge der Form $V(\{a\})V(\{b\})$ mit geeigneten Faktoren r und $\Delta\epsilon$. Dabei stehen $\{a\}$ und $\{b\}$ jeweils für vier Impulse. Wir wollen sie nicht im einzelnen hinschreiben, bemerken aber, dass sie nach Integration auf Grund der l-Abhängigkeit (25.16) die Form

$$V(\{a\})V(\{b\}) \frac{r(\{a\})(2\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\})) - r(\{b\})(\Delta\epsilon(\{a\}) + 2\Delta\epsilon(\{b\}))}{r(\{a\})\Delta\epsilon(\{a\})^2 + r(\{b\})2\Delta\epsilon(\{b\})^2} \tag{25.18}$$

annehmen. Es stellt sich nun heraus, dass für die zu berechnenden Beiträge stets $r(\{a\}) = r(\{b\})$ gilt, so dass sich die Faktoren r herauskürzen und wir keine spezifische Wahl treffen müssen.

Auf diese Weise können wir in zweiter Ordnung in der Kopplung U die effektive Wechselwirkung der Form (23.22-23.28) berechnen.

25.c Freie Energie

Diese Wechselwirkung ist nun auf ihre Stabilität gegen Symmetriebrechung zu untersuchen. Das heißt, wir müssen das großkanonische Potential

$$G = \langle H - \mu\mathcal{N}\rangle - TS, \tag{25.19}$$

auf sein Verhalten bei Variation der Erwartungswerte

$$\langle c_k^\dagger c_l \rangle = n_k^0 \delta_{k,l} + \nu_{k,l}, \quad \nu_{k,l} = \nu_{l,k}^*, \tag{25.20}$$

$$\langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle = \Delta_{k,l}^* = -\Delta_{l,k}^*, \quad \langle c_l c_k \rangle = \Delta_{k,l} \tag{25.21}$$

untersuchen. Die Wechselwirkung ist eine quadratische Form in den ν und Δ.

$$\begin{aligned} E - \mu N &= E_0 - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s} \\ &+ \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\mathrm{B}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} \\ &+ \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} \left(V_{\mathrm{H}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} - V_{\mathrm{F}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} \right) \\ &+ \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\mathrm{Y}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{q}s'} \\ &+ \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} \left(V_{\mathrm{C}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} - V_{\mathrm{A}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} \right) \end{aligned} \tag{25.22}$$

Es bleibt noch die zugehörige Entropie für kleine ν und Δ zu bestimmen. Wir gehen aus von der Matrix

$$R = \begin{pmatrix} \langle c_k^\dagger c_l \rangle & \langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle \\ \langle c_k c_l \rangle & \langle c_k c_l^\dagger \rangle \end{pmatrix} = D + A \tag{25.23}$$

mit der Diagonal-Matrix D und der Matrix A

$$D = \begin{pmatrix} n_k^0 \delta_{k,l} & 0 \\ 0 & (1 - n_k^0) \delta_{k,l} \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \nu_{k,l} & \Delta_{k,l}^* \\ -\Delta_{k,l} & -\nu_{l,k} \end{pmatrix}. \tag{25.24}$$

Nun kann man diese Matrix durch eine unitäre Transformation diagonalisieren, die der Einführung neuer Fermionen entspricht,

$$\begin{pmatrix} c^\dagger \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^\dagger \\ \alpha \end{pmatrix}. \tag{25.25}$$

Die Diagonalisierung bis zur zweiten Ordnung in den Außerdiagonal-Matrixelementen ergibt bekanntlich die Eigenwerte

$$\lambda_i = D_{ii} + A_{ii} + \sum_{j \neq i} \frac{A_{ij} A_{ji}}{D_{ii} - D_{jj}} \tag{25.26}$$

Hieraus lässt sich dann die Spur einer analytischen Funktion berechnen,

$$\begin{aligned} \mathrm{tr} \hat{f}(D + A) &= \sum_i \hat{f}(\lambda_i) = \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i (\lambda_i - D_{ii}) \hat{f}'(D_{ii}) + \ldots \\ &= \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i \hat{f}'(D_{ii}) A_{ii} + \frac{1}{2} \sum_i \hat{f}''(D_{ii}) A_{ii}^2 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} A_{ij} A_{ji} \frac{\hat{f}'(D_{ii}) - \hat{f}'(D_{jj})}{D_{ii} - D_{jj}} + O(A^3). \end{aligned} \tag{25.27}$$

Im vorliegenden Fall erhalten wir die Entropie als

$$S = -k_{\mathrm{B}} \mathrm{tr}(R \ln R). \tag{25.28}$$

Wir haben also $\hat{f}(n) = -k_{\mathrm{B}} n \ln n$ zu entwickeln und erhalten

$$\hat{f}(n^0) = -k_{\mathrm{B}} n^0 \ln n^0, \quad \hat{f}'(n^0) = -k_{\mathrm{B}}(1 + \ln n^0), \quad \hat{f}''(n^0) = -\frac{k_{\mathrm{B}}}{n^0}. \tag{25.29}$$

und damit

$$\begin{aligned} S &= S^0 + k_{\rm B}\beta\sum_k(\epsilon_k^0-\mu)\nu_{kk} \\ &- \frac{k_{\rm B}}{2}\sum_{kk'}|\nu_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0)-\mu),\beta(\epsilon_{k'}^0-\mu)) \\ &- \frac{k_{\rm B}}{2}\sum_{kk'}|\Delta_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0-\mu),\beta(\mu-\epsilon_{k'}^0)) \end{aligned} \tag{25.30}$$

bis zur zweiten Ordnung in ν und Δ mit

$$S^0 = -k_{\rm B}\sum_k\left(n_k^0\ln n_k^0+(1-n_k^0)\ln(1-n_k^0)\right), \tag{25.31}$$

$$f(x,y) = \frac{x-y}{\frac{1}{{\rm e}^y+1}-\frac{1}{{\rm e}^x+1}} = \frac{x-y}{{\rm e}^x-{\rm e}^y}({\rm e}^x+1)({\rm e}^y+1) \tag{25.32}$$

mit dem Limes

$$f(x,x) = \frac{({\rm e}^x+1)^2}{{\rm e}^x} \tag{25.33}$$

und den Symmetrien

$$f(x,y)=f(y,x)=f(-x,-y). \tag{25.34}$$

Zur Berechnung des großkanonischen Potentials müssen wir damit von (25.22)

$$TS = -\frac{k_{\rm B}T}{2}\sum_{\mathbf{k},s,s'}\left(f_{\rm B}(\mathbf{k})|\Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}|^2+f_{\rm H}(\mathbf{k})|\nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s'}|^2+f_{\rm Y}(\mathbf{k})|\Delta_{\mathbf{k}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{k}s'}|^2+f_{\rm C}(\mathbf{k})|\nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s,\mathbf{k}s'}|^2\right) \tag{25.35}$$

mit

$$\begin{aligned} f_{\rm B}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu),\beta(\mu-\epsilon_{\mathbf{k}})), & f_{\rm H}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu),\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu)), \\ f_{\rm Y}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu),\beta(\mu-\epsilon_{\mathbf{q}_0-\mathbf{k}})), & f_{\rm C}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu),\beta(\epsilon_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}}-\mu)) \end{aligned} \tag{25.36}$$

abziehen.

Diese quadratische Form ist dann daraufhin zu untersuchen, ob sie positiv definit ist. Für die vier Kanäle, die durch die Indices B, H, Y und C gekennzeichnet sind, hat man jeweils eine quadratische Form

$$\begin{aligned} \beta F &= \frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{k,q}(\beta U)(1+\frac{U}{t}V_{k,q})\Delta_k^*\Delta_q+\frac{1}{2}\sum_k f_k\Delta_k^*\Delta_k \\ &= \frac{1}{2}\sum_{k,q}\left(\frac{U}{t}A_{k,q}+\left(\frac{U}{t}\right)^2B_{k,q}+\delta_{k,q}\right)\sqrt{f_k}\Delta_k^*\sqrt{f_q}\Delta_q \end{aligned} \tag{25.37}$$

mit

$$A_{k,q}=\frac{\beta t}{V_{\rm P}\sqrt{f_kf_q}},\quad B_{k,q}=\frac{\beta tV_{k,q}}{V_{\rm P}\sqrt{f_kf_q}} \tag{25.38}$$

auf ihre Positivität zu untersuchen, wobei natürlich bei zwei Kanälen ν statt Δ steht.

Im weiteren entwickeln wir das großkanonische Potential bis in zweiter Ordnung in ν und Δ. Der Beitrag in erster Ordnung in ν aus $E-\mu\langle\mathcal{N}\rangle$ und der Entropie heben sich weg. Die Beiträge in zweiter Ordnung werden dann einer Stabilitätsanalyse unterworfen. Solange die quadratische Form in ν und Δ positiv definit ist, ist das System stabil mit $\nu=0$ und $\Delta=0$. Sobald dieser Ausdruck nicht mehr positiv definit ist, ist dieser symmetrische Zustand instabil. Das System geht in einen Zustand über, in dem ν oder Δ von Null verschieden ist. Man lernt daraus, wann, das heißt bei vorgegebenem U und t bei welcher Temperatur T der Phasenübergang stattfindet.

25.d Symmetrien

25.d.α Gittersymmetrie

Wir betrachten Zustände auf einem quadratischen Gitter. Für dieses Gitter haben wir eine Gruppe von acht Symmetrie-Operationen, die das Gitter in sich überführen. Dies nützt man bei der Stabilitätsanalyse aus. Vier der Operationen sind Rotationen R^n, wobei R eine Rotation um 90^0 ist. Vier weitere sind Spiegelungen an den beiden Achsen und an den beiden Diagonalen. Zweckmäßig ist es, zunächst zwischen Zuständen gerader und ungerader Parität zu unterscheiden. Die Anwendung des Paritäts-Operators ist in der Ebene eine Rotation um 180^0, wird also durch R^2 beschrieben. Da eine Rotation um 360^0 den Zustand in sich überführt, ist $R^4 = 1$. Die Eigenwerte von R^2 sind also ± 1 (Parität). Die Zustände positiver Parität haben die Form $(\nu(\mathbf{k}) + \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$, die negativer Parität $(\nu(\mathbf{k}) - \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$. Lediglich in den Fällen, in denen $\nu(\mathbf{k})$ mit $\nu(-\mathbf{k})$ übereinstimmt, gibt es nur den Zustand positiver Parität $\nu(\mathbf{k})$. Dies passiert für $\mathbf{k} = (0,0)$, aber auch für $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$, $(0, \frac{\pi}{a})$ und $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) = \mathbf{q}_0$, da sich dann $\mathbf{k}$ und $-\mathbf{k}$ durch einen reziproken Gittervektor unterscheiden.

Bei den Zuständen positiver Parität kann man nun vier Fälle unterscheiden. R hat wegen $R^2 = +1$ die Eigenwerte ± 1. Das Gleiche gilt für die Spiegelungen. Dabei ergeben sich für die Spiegelungen M_a an den Achsen die gleichen Eigenwerte, ebenso für die Spiegelungen M_d an den beiden Diagonalen. In der folgenden Tabelle führen wir erst die Notation für die entsprechende Symmetrie an, dann ein Beispiel, und dann die drei Eigenwerte.

		R	M_a	M_d
s_+	1	$+1$	$+1$	$+1$
$s_- = g$	$xy(x^2 - y^2)$	$+1$	-1	-1
d_+	$x^2 - y^2$	-1	$+1$	-1
d_-	xy	-1	-1	$+1$

(25.39)

Wenn $M_a = -1$, dann hat die Funktion für $k_x = 0$ und $k_y = 0$ einen Knoten, wie auch für $k_x = \frac{\pi}{a}$ und $k_y = \frac{\pi}{a}$. Falls $M_d = -1$ hat die Funktion für $k_y = \pm k_x$ Knoten.

Für die Zustände ungerader Parität ist es nicht möglich, für alle Operationen simultan einen bestimmten Eigenwert anzugeben. Man kann zum Beispiel $R = \pm\mathrm{i}$ verlangen. Dann führt aber jede Spiegelung den Zustand mit $R = +\mathrm{i}$ in den mit $R = -\mathrm{i}$ über oder umgekehrt. Oder wir suchen einen Zustand, der unter Spiegelung an der x-Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der y-Achse in sich übergeht. Dann werden aber die Spiegelungen an einer Diagonalen oder die Rotation um 90^0 den Zustand in einen überführen, der unter Spiegelung an der y-Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der x-Achse in sich übergeht. Da immer zwei Zustände derartig miteinander verknüpft sind, spricht man hier von einer zweidimensionellen Darstellung der Gruppe. Wegen ihrer negativen Parität und da die einfachsten Funktionen x und y sind, spricht man von p-Zuständen. Für die p-Zustände hat man stets zweifache Entartung.

Wir werden die Instabilitäten nach diesen fünf Darstellungen klassifizieren.

25.d.β Alternierende Ordnung

Bei den Wechselwirkung V_A, V_C und V_Y tritt der Vektor $\mathbf{q}_0$ in Erscheinung, der ein alternierendes Verhalten beschreibt. Wir gehen davon aus, dass V reell ist, da in der symmetrischen Phase Zeitumkehrinvarianz und Paritäts-Erhaltung gilt. Dann erhält man unter Berücksichtigung der Hermitezität und der Symmetrie bei Vertauschung der Paare

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = V(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0, \mathbf{q} + \mathbf{q}_0) \tag{25.40}$$

Dies hat zur Folge, dass man Eigenzustände mit $(\nu(\mathbf{k}) \pm \nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0))/\sqrt{2}$ bilden kann, die ich mit $Q = \pm 1$ kennzeichne.

25.d.γ Spin-Singulett und Spin-Triplett

Generell ist zwischen Spin-Singuletts und Spin-Tripletts zu unterscheiden. In dem supraleitenden Kanal haben wir $c^\dagger_{\mathbf{k}s_1} c^\dagger_{-\mathbf{k}s_2}$. Haben wir eine Funktion gerader Parität in $\mathbf{k}$, so muss die Spinwellen-Funktion antisymmetrisch sein: Spin-Singulett. Ist sie von ungerader Parität, so ist die Spinwellen-Funktion gerade: Spin-Triplett. Auch für V_{Y} ergeben sich die Spin-Wellenfunktionen aus den Symmetrien der Orts- (oder besser Impuls-) Wellenfunktionen.

Anders ist die Situation für die Teilchen-Loch-Anregungen, die durch V_{H}, V_{F}, V_{A} und V_{C} beschrieben werden. Wir zerlegen zum Beispiel

$$\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}}\delta_{s,s'} + \sum_{\alpha}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}\sigma_{s,s'}^{\alpha} \tag{25.41}$$

in die Singlett-Amplitude ν^{s} und die Triplett-Amplituden $\nu^{\mathrm{t}\alpha}$. Damit ergibt sich dann für die Ausdrücke im Hartree- und im Fock-Anteil der Wechselwirkung

$$\sum_{s,s'}\nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^{*}\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} = \sum_{s,s'}(\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\delta_{s,s} + \sum_{\alpha}\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{t}\alpha}\sigma_{s,s}^{*\alpha})(\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}}\delta_{s',s'} + \sum_{\alpha}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}\sigma_{s',s'}^{\alpha}) = 4\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} \tag{25.42}$$

und

$$\sum_{s,s'}\nu_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^{*}\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \sum_{s,s'}(\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\delta_{s',s} + \sum_{\alpha}\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{t}\alpha}\sigma_{s',s}^{\alpha})(\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}}\delta_{s,s'} + \sum_{\beta}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\beta}\sigma_{s,s'}^{\beta}) = 2\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} + 2\sum_{\alpha}\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{t}\alpha}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}, \tag{25.43}$$

was auf

$$\frac{1}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(2V_{\mathrm{H}}(\mathbf{k},\mathbf{q}) - V_{\mathrm{F}}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} - \frac{1}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\alpha}V_{\mathrm{F}}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{t}\alpha}\nu_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha} \tag{25.44}$$

führt, wobei hier allerdings $\nu_{\mathbf{k}}$ stets reell ist. Für die anomalen Erwartungswerte sieht die Zerlegung etwas anders aus

$$\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = \epsilon_{s,s'}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} + (\epsilon\sigma^{\alpha})_{s,s'}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}. \tag{25.45}$$

mit $\epsilon = \sigma^{y}$ und der Symmetrie

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{\mathrm{s}} = \Delta_{-\mathbf{k}}^{\mathrm{s}}, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^{\mathrm{t}\alpha} = -\Delta_{-\mathbf{k}}^{\mathrm{t}\alpha}. \tag{25.46}$$

Dann folgt

$$\sum_{s,s'}\Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}^{*}\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = (\epsilon_{s,s'}^{*}\Delta_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}} + (\epsilon^{*}\sigma^{*\alpha})_{s,s'}\Delta_{\mathbf{k}}^{\mathrm{t}\alpha})(\epsilon_{s,s'}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} + (\epsilon\sigma^{\alpha})_{s,s'}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}) = 2\Delta_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{s}}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{s}} + 2\sum_{\alpha}\Delta_{\mathbf{k}}^{*\mathrm{t}\alpha}\Delta_{\mathbf{q}}^{\mathrm{t}\alpha}. \tag{25.47}$$

Für Singulett- und Triplett-Kanal erhalten wir also die gleichen Beiträge. Allerdings gehört das Singulett zu gerader, das Triplett zu ungerader Parität.

Berücksichtigen wir alle drei Symmetrien, so unterscheiden wir
a) gemäß der Gittersymmetrie s_{+}, s_{-}, d_{+}, d_{-} und p-Zustände,
b) homogene und alternierende Ordnungen, letztere mit $Q = +1$ und $Q = -1$,
c) Supraleitung und Teilchen-Loch-Ordnung letztere mit $S = 0$ und $S = 1$,
insgesamt also $5 \times 3 \times 3 = 45$ verschiedene Möglichkeiten der Symmetrie-Brechung.