

Die approbierte Originalversion dieser Diplom-/
Masterarbeit ist in der Hauptbibliothek der Tech-
nischen Universität Wien aufgestellt und zugänglich.

<http://www.ub.tuwien.ac.at>



The approved original version of this diploma or
master thesis is available at the main library of the
Vienna University of Technology.

<http://www.ub.tuwien.ac.at/eng>



Unterschrift des Betreuers

DIPLOMARBEIT

Numerische Simulation der Eigenschaften von Versetzungen im supraleitenden Flussliniengitter

verfasst von

Sebastian Singer

Rosskopfgasse 56, A-1140 Wien

am Atominstitut der TU Wien,
unter der Betreuung von Prof. Dr. Franz M. Sauerzopf

Datum:

Unterschrift:

Danksagung

Das Verfassen einer wissenschaftlichen Arbeit ist immer eine Gemeinschaftsanstrengung. Am Ende finden aber nur wenige Namen ihren Weg auf das Deckblatt – aber die, ohne die diese Arbeit nicht zustande gekommen wäre, verdienen an dieser besonderen Stelle meinen Dank und meine besondere Anerkennung:

Zuerst mein Betreuer, Prof. Franz Sauerzopf.

Er hat mich nicht nur wissenschaftlich ausgezeichnet bei dieser Arbeit angeleitet, begleitet und unterstützt, sondern mir auch durch persönliches Verständnis in einer schwierigen Zeit geholfen – vielen, vielen Dank!

Ohne meine Familie – meine Eltern, Eveline und Kurt, und meine Schwester, Anna-Sophia – die mich immer mit Rat, Tat und den besten Worten versorgt haben, wäre ich nicht der, der ich heute bin und diese Arbeit sicher nicht geschrieben. Ihr seid einfach super!

Meine Verlobte, Katarina, die mich begleitet und unterstützt; die mich so sehr liebt, wie ich sie – auch Dir vielen Dank!

Last but not least – herzlichen Dank an die ganze Gruppe Tieftemperaturphysik am ATI, besonders meinem “Leidensgenossen” David Seppi – war toll mit Euch zu arbeiten!

Eine spezielle Erwähnung gebührt Prof. Harald Weber – alleine schon dafür, dass ich in seiner Arbeitsgruppe meine Diplomarbeit schreiben durfte. Hoffentlich wird er dem ATI auch im Ruhestand erhalten bleiben.

Wien, im September 2013.

Abstract

Numerical Simulation of Dislocation Properties in the Superconducting Vortex Lattice

We simulated various geometries of perturbed vortex lattices – differing in size and external magnetic field – in order to study the affect of shear stress on dislocations in the flux-line-lattice.

In addition to that we compared the energy of perturbed and unperturbed lattices in varying sizes to determine the self- and interaction energy of a given dislocation pair as a function of their distance.

We found that the shear force needed to move a dislocation along a slip plane lies well within the boundaries predicted by the established Peierls-Nabarro-model if we incorporate the findings of Brandt et. al. concerning the elastic theory of the vortex lattice.

Furthermore we were able to collect first evidence that the required shear force is independent of lattice size. Starting from the obtained shear force thresholds at a number of different external magnetic field strengths we found estimates for the size of the lattice area directly deformed by the dislocations.

By comparing perturbed disturbed and unperturbed lattices of increasing size but at constant magnetic field we were able to determine the total energy curve of a dislocation pair. We had to consider the effect of the periodic boundary conditions of our simulations as well as the behavior of the dislocations themselves.

Using the results found during the shear force simulations we could make a first estimate of the ratio of self- and dislocation energy to interaction energy as well as of the ratio of self- to dislocation energy.

Zusammenfassung

Wir haben unterschiedliche, durch Versetzungen beeinflusste Flussliniengitter – die sich in Größe und angelegtem äußeren Feld unterscheiden – simuliert um die Auswirkungen von Verzerrungen im Gitter auf die Versetzungen zu untersuchen.

Zusätzlich verglichen wir die Energie versetzungsbehafteter Gitter unterschiedlicher Größe mit ungestörten Gittern derselben Größen um die Selbst- und Wechselwirkungsenergiekurven eines Versetzungspaares als Funktion des Abstandes zwischen ihnen zu ermitteln.

Wir konnten zeigen, dass die Scherkraft, die benötigt wird um eine Versetzung entlang einer Gleitebene zu bewegen, innerhalb der durch das Peierls-Nabarro-Modell vorgegebenen Grenzen liegt, wenn wir die Erkenntnisse Brandts et. al. zur elastischen Theorie des Versetzungsgitters miteinbezogen.

Die Simulationen lieferten uns auch erste Indizien dafür, dass die Scherkraft von der Gittergröße selbst unabhängig ist. Ausgehend von den Ergebnissen der Scherkraftrechnung konnten wir eine Abschätzung für den Radius des von den Versetzungen direkt beeinflussten Gebietes treffen.

In dem wir regelmäßige mit versetzungsbehafteten Gittern verglichen – und dabei den Abstand zwischen den Versetzungen erhöhten – konnten wir die Gesamtenergiekurve eines Versetzungspaares simulieren.

Dabei mussten wir nicht nur die Dynamik des Gitters selbst sondern auch die Effekte der periodischen Randbedingungen berücksichtigen. Unter Verwendung der Resultate der Scherkraftrechnungen konnten wir erste Abschätzungen des Verhältnisses von Selbst- und Verzerrungsenergie zur Wechselwirkungsenergie und von Selbst- und Verzerrungsenergie untereinander vornehmen.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	7
2	Historischer Kurzüberblick	8
3	Theoretische Grundlagen der Supraleitung	10
3.1	Kritisches Verhalten	10
3.1.1	Typ-I- und Typ-II-Supraleitung	11
3.1.2	Spezifische Wärme	13
3.2	London-Theorie	14
3.3	Ginsburg-Landau-Theorie	17
3.3.1	Die Ginsburg-Landau-Parameter	19
3.4	BCS-Theorie	21
3.5	Das Flussliniengitter	22
3.6	Energie und Wechselwirkung	24
3.6.1	Räumliche Struktur	25
3.7	Pinning und kritische Ströme	27
3.8	Elastische Theorie der Versetzungen	30
3.8.1	Elastische Moduln	32
3.8.2	Versetzungsbewegung	34
3.9	Versetzungsenergie	36
4	Simulationsprogramm	38
4.1	Genereller Aufbau	40
4.2	Einheiten	41
4.3	Die <code>relax_step</code> -Methode	42
4.4	Der $n - n + 1 - n$ -Konstruktor	44
4.5	Exemplarische Relaxation	46
4.6	Fehlerbehandlung	49
4.7	Externe Kräfte	51
4.8	Numerische Genauigkeit	54
5	Simulationsergebnisse	59
5.1	Umrechnung in SI-Einheiten	59
5.2	Magnetfeldabhängigkeit der Gleitkraft	60
5.2.1	Simulationsaufbau	61
5.2.2	Graphische Beispiele der Simulationsabläufe	62
5.2.3	Ergebnisse der Scherkraftrechnungen	67
5.2.4	Vergleich mit theoretischen Vorhersagen	69
5.3	Selbst- und Wechselwirkungsenergie der Versetzungen	73
5.3.1	Selbst- und Wechselwirkungsenergie	74
5.3.2	Geometrische Verzerrung	79
5.3.3	Abschätzung des konstanten \bar{E}_{56} -Beitrages	81

5.4 Zusammenfassung	85
6 Verbesserungsmöglichkeiten und zukünftige Themen	86
6.1 Problemfelder	86
6.1.1 Algorithmusüberarbeitung	86
6.1.2 Randbedingungen	89
6.2 Ausblick	90
Literatur	91
Abbildungsverzeichnis	92

1 Vorwort

Die vorliegende Diplomarbeit ist als Weiterführung einer vom Autor verfassten Projektarbeit entstanden. Grundsätzlich werden im Rahmen dieser Arbeit die Eigenschaften von Versetzungen in einer speziellen Geometrie des Flussliniengitters in Typ-II-Supraleitern untersucht.

Hierzu wurde ein ursprünglich von Prof. Sauerzopf erstelltes C++-Programm zur Simulation des Flussliniengitters entsprechend modifiziert und erweitert. Diese Erweiterungen umfassten die Implementierung einer neuen Simulationsgeometrie (weitergehend in oben erwähnter Projektarbeit geschehen), die Überarbeitung und Fehlerbehandlung des verwendeten Relaxationsalgorithmus und die Erweiterung des Simulationskernes um die Möglichkeit, externe Kräfte beziehungsweise Ströme an das simulierte Flusslinienfeld anzulegen.

Danach wurde der Verlauf der Selbst- und Wechselwirkungsenergie der Versetzungen in Abhängigkeit der Gittergröße untersucht. Im Weiteren bestimmten wir die nötige Kraft, um Versetzungen entlang einer Gleitebene zu bewegen, in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes. Diese Ergebnisse sollen in Zukunft bei der Formulierung einer elastischen Theorie der Versetzungen im Flussliniengitter helfen, die dann den Einfluss der Versetzungen auf die Eigenschaften des ganzen Supraleiters (insbesondere auf die kritische Stromdichte J_C) beschrieben soll.

In den folgenden Kapiteln dieser Arbeit wird zunächst ein kurzer Überblick über die Geschichte der Supraleitung gegeben, bevor dann auf die Theorie und Phänomenologie der Supraleitung genauer eingegangen wird. Danach folgt eine Beschreibung des verwendeten Programms und der vorgenommenen Ergänzungen zu den jeweiligen Algorithmen. Anschließend werden die Ergebnisse der Simulationsläufe dargestellt und interpretiert, bevor die Arbeit mit einem Überblick über die noch zu untersuchenden Themen und noch zu behandelnden Problemstellungen abschließt.

2 Historischer Kurzüberblick

Das Phänomen der Supraleitung wurde am 8. April 1911 entdeckt, als *Heike Kamerlingh Onnes* das Widerstandsverhalten des Quecksilbers bei tiefen Temperaturen untersuchte. Er verwendete dazu flüssiges Helium, dessen Herstellung ihm erst kurz zuvor gelungen war.

Als *Kamerlingh Onnes* seine Probe auf eine Temperatur unter 4.2 K abgekühlt hatte, bemerkte er das nahezu vollständige Verschwinden des elektrischen Gleichstromwiderstandes. Es war sehr bald klar, dass es sich hierbei um eine neue Art der elektrischen Leitung handeln musste: Ströme, die in einen supraleitenden Ring induziert wurden, hielten sich fast ohne Abschwächung über Jahre hinweg. Er war auch derjenige, der diesem Phänomen den Namen “Supraleitung” gab.

In den darauf folgenden Jahrzehnten beobachtete man Supraleitung bei vielen weiteren Metallen und metallischen Verbindungen. So wurden zum Beispiel 1913 Blei (Sprungtemperatur $T_c = 7\text{ K}$) und 1941 Niobnitrid ($T_c = 16\text{ K}$) als Supraleiter entdeckt.

Den nächsten wichtigen Schritt auf dem Weg zum Verständnis der Supraleitung taten 1933 *Meißner* und *Ochsenfeld*, als sie entdeckten, dass gewisse Supraleiter ein äußeres Magnetfeld fast vollständig aus ihrem Inneren verdrängen.

Supraleitung ist also nicht nur durch das Verschwinden des elektrischen Widerstandes, sondern auch durch idealen Diamagnetismus (magnetische Suszeptibilität $\chi = -1$) gekennzeichnet. Nur zwei Jahre später stellten *Fritz* und *Heinz London* die ersten Gleichungen auf, die das Verhalten eines Supraleiters phänomenologisch beschreiben.

Sie gingen jedoch nicht auf den eigentlichen Mechanismus der Supraleitung ein, der 1935 noch weitgehend unbekannt war. Es existierten bloß Vermutungen, dass die Supraleitung durch die damals noch vergleichsweise junge Quantenphysik zu erklären sei. 1950 gelang es *Witali Lasarewitsch Ginsburg* und *Lew Dawidowitsch Landau* eine detailliertere makroskopische Theorie der Supraleitung zu formulieren. Ausgehend von *Landaus* Theorie der Phasenübergänge zweiter Ordnung stellten sie die freie Energie des Supraleiters nahe der kritischen Temperatur als Funktion eines komplexen Ordnungsparameters dar.

Auf dieser Theorie aufbauend, konnte *Alexei Alexejewitsch Abrikosov* 1957 die sogenannte Typ-II-Supraleitung theoretisch begründen. Die von ihm gefundenen Flusslinien oder Flussschläuche bilden einen integralen Bestandteil der Untersuchungen in dieser Arbeit.

Im selben Jahr lieferten *John Bardeen*, *Leon Neil Cooper* und *John Robert Schrieffer* die erste und bis heute gültige mikroskopische Theorie der Supraleitung.

Die nach ihnen benannte BCS-Theorie postuliert das Auftreten sogenannter *Cooper-Paare* als Träger der Supraleitung. Diese Cooper-Paare bestehen laut Theorie jeweils aus zwei durch Phononen gekoppelte Elektronen. Die Cooper-Paare lassen sich durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschreiben, die sich über den gesamten Supraleiter erstreckt. Zusätzlich konnte *Lew Petrowitsch Gor'kov* 1959 zeigen, dass die Ginsburg-Landau-Gleichungen als Spezialfall in der Nähe der Übergangstemperatur aus der BCS-Theorie hervorgehen.

Bis 1986 herrschte die Überzeugung, mit der BCS-Theorie die endgültige Erklärung der Supraleitung gefunden zu haben. Es stellte sich aber heraus, dass die von *Johannes Georg Bednorz* und *Karl Alexander Müller* entdeckten Hochtemperatursupraleiter sich nicht im Rahmen der BCS-Theorie erklären lassen. Bis zum heutigen Tag, 27 Jahre nach ihrer Entdeckung, existiert keine allgemein akzeptierte und experimentell validierte Theorie derartiger Supraleiter.

3 Theoretische Grundlagen der Supraleitung

In diesem Kapitel wollen wir einen hinreichend detaillierten Überblick über den theoretischen Unterbau der Supraleitung geben. Auf die für diese Arbeit wichtigen Flusslinien, deren Verankerung und die elastische Beschreibung ihres Gitters wird in den entsprechenden Kapiteln näher eingegangen. Da die Theorie der Supraleitung schon etabliert und in verschiedenen Lehrbüchern zusammengefasst ist, wird als Referenz für diesen Abschnitt exemplarisch [3] und [6] angegeben.

3.1 Kritisches Verhalten

Wie schon in der Einleitung kurz erwähnt, zeichnen sich Supraleiter vorwiegend dadurch aus, dass sie ihren elektrischen Widerstand unterhalb einer kritischen Temperatur T_c fast vollständig verlieren. Geringe Restwiderstände lassen sich dadurch erklären, dass ein thermodynamischer Zustand im Gleichgewicht – wie es die Supraleitung ist – immer geringe Schwankungen um den Gleichgewichtszustand ausführt. Folgende Abbildung zeigt das von *Onnes* 1911 gemessene kritische Verhalten des Quecksilbers bei Temperaturen um die 4.2 K.

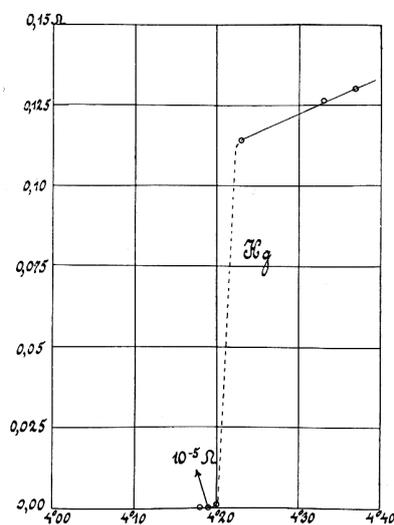


Abbildung 3.1: Erste Messung der Supraleitung an Hg, 1911

Quelle: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Superconductivity_1911.gif,
abgerufen am 25. Feb. 2013

3.1.1 Typ-I- und Typ-II-Supraleitung

Das Auftreten der Supraleitung hängt jedoch nicht nur von der Temperatur des Materials ab. Vielmehr beeinflussen sowohl ein äußeres Magnetfeld als auch ein eventuell angelegter Strom die supraleitenden Eigenschaften einer bestimmten Probe.

Betrachten wir das Verhalten eines sogenannten Typ-I-Supraleiters, so zeigt dieser den Effekt der Feldverdrängung aus seinem Inneren.

Nur am Rand des Supraleiters dringt das Magnetfeld auf einer Skala von etwa 100 nm in das Material ein. Dieses Magnetfeld fällt jedoch exponentiell mit einer charakteristischen, temperaturabhängigen Eindringtiefe λ ab. Wir werden diese Eindringtiefe im Rahmen der nachfolgenden Kapitel noch genauer betrachten und sowohl makroskopisch als auch mikroskopisch erklären.

Legen wir nun an einen solchen Supraleiter einen Strom (beziehungsweise eine Stromdichte) größer als einen Wert j_c respektive J_c an, so bemerken wir das Verschwinden der supraleitenden Phase. Daher nennen wir j_c den kritischen Strom des Supraleiters und analog dazu J_c die kritische Stromdichte.

Legt man an eine supraleitende Probe ein äußeres Magnetfeld an, beobachtet man unterhalb eines kritischen Wertes H_c die gänzliche – bis auf den oben erwähnten Randeffect – Feldverdrängung aus dem Material. Überschreitet das Feld jedoch den kritischen Wert H_c , verschwindet die supraleitende Phase komplett und das Feld durchdringt das Material.

Schon 1916 schlug *Silsbee* vor, das Auftreten eines kritischen Stromes und eines kritischen Magnetfeldes als ein und dasselbe Phänomen zu behandeln.

Demnach ist das kritische Feld jenes Feld, das der kritische Strom erzeugt, und umgekehrt. Die *Silsbee*'sche Hypothese ist in hinreichend dicken Supraleitern valide, bei dünnen Proben nimmt aber die kinetische Energie der Ladungsträger eine bestimmende Rolle ein.

Man entdeckte relativ bald, dass es eine zweite Kategorie von Supraleitern gibt, die ein grundlegend anderes Verhalten in Bezug auf äußere Magnetfelder zeigen.

Diese Supraleiter bezeichnet man heute als Typ-II-Supraleiter. Im Gegensatz zum Typ-I-Supraleiter existieren hier zwei kritische Felder H_{c1} und H_{c2} .

Dementsprechend wird die Magnetisierungskurve des Typ-II-Supraleiters in drei Bereiche geteilt:

- $H < H_{c1}$: In diesem Bereich befindet sich der Supraleiter in der *Meißner*-Phase und zeigt dasselbe Verhalten wie ein Typ-I-Supraleiter.
- $H > H_{c2}$: Ist das äußere Feld größer als H_{c2} , ist der supraleitende Zustand gänzlich verschwunden und das Feld dringt komplett in die Probe ein.
- $H_{c1} < H < H_{c2}$: Zwischen den beiden kritischen Feldern befindet sich der Supraleiter in einem Mischzustand, in dem das magnetische Feld in Form sogenannter Flussschläuche in das Material eindringt. Man nennt diese Phase auch den *Schubnikow*-Zustand, nach dem Physiker, der 1937 erstmals Messungen an Typ-II-Supraleitern durchführte.

Typ-II-Supraleiter zeigen im Allgemeinen deutlich höhere Sprungtemperaturen als Typ-I-Supraleiter; ebenso sind sie gegen Einflüsse äußerer Felder wesentlich toleranter. Das führt dazu, dass für alle momentanen technischen Anwendungen fast ausschließlich Typ-II-Supraleiter in Betracht kommen.

Auf den Mischzustand und die damit verbundenen Flusslinien werden wir im Rahmen der Kapitel 3.3, 3.5 und 3.7 noch detaillierter eingehen.

Die unten stehende Graphik veranschaulicht nochmals die Unterschiede zwischen Typ-I- und Typ-II-Supraleitern (hier für zwei Supraleiter mit demselben thermodynamischen H_c):

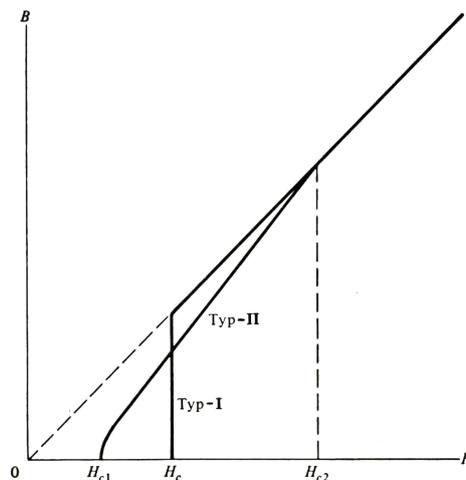


Abbildung 3.2: Vergleich des magnetischen Flusses für Typ-I- und Typ-II-Supraleiter. *Quelle: [3], Abb. 1.6.1*

3.1.2 Spezifische Wärme

Betrachten wir die spezifische Wärme eines Metalls, so können wir diese in Anteile des Elektronensystems c_e und Anteile des Gitters c_g zerlegen:

$$c_{ges} = c_e + c_g \quad (3.1)$$

Im normalleitenden Zustand können wir c_e mittels der Sommerfeldkonstante γ in folgender Form schreiben:

$$c_e = \gamma T \quad (3.2)$$

Für den Gitteranteil ergibt sich aus der Debye-Theorie folgender Ausdruck:

$$c_g = AT^3 \quad (3.3)$$

Da sich an der Gitterstruktur bei dem Übergang zur Supraleitung nichts Wesentliches ändert, können wir

$$c_{gn} = c_{gs} \quad (3.4)$$

setzen.

Das Elektronensystem jedoch verändert seinen Zustand grundlegend. *Rutgers* konnte 1936 zeigen, dass für die Differenz der spezifischen Wärme folgender Zusammenhang gilt:

$$(c_s - c_n)_{T_c} = T_c \mu_0 \left(\frac{dH_c}{dT} \right)_{T_c}^2 \quad (3.5)$$

Diese *Rutgers*-Formel ist experimentell sehr gut bestätigt und gibt den Sprung in der spezifischen Wärme bei T_c und $H = 0$ an. Folgende Graphik zeigt ein Bild des Verlaufes der spezifischen Wärme.

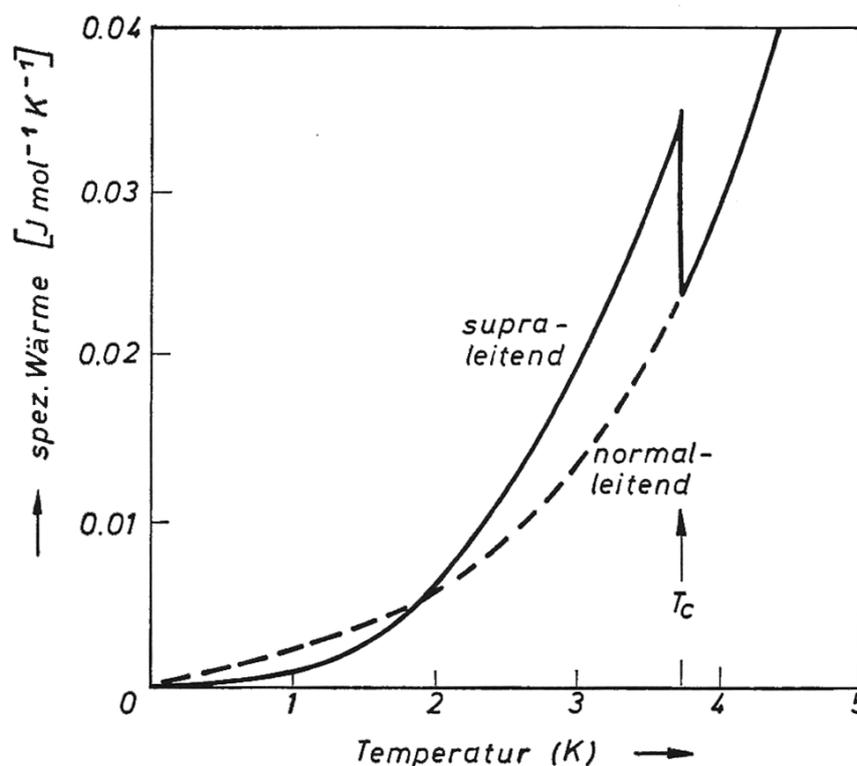


Abbildung 3.3: Verlauf der spezifischen Wärme für Supra- und Normalleiter.
Quelle: [3], Abb. 2.3.1

3.2 London-Theorie

Eine phänomenologische Theorie der Supraleitung muss vor allem zwei Effekte hinreichend genau beschreiben: das Verschwinden des elektrischen Widerstandes unterhalb T_c , und den *Meißner-Ochsenfeld*-Effekt.

Wie schon im historischen Überblick erwähnt, gelang diese elektromagnetische Beschreibung erstmals *F.* und *H. London* im Jahre 1935.

Ausgehend von der Annahme der idealen Leitfähigkeit ergibt sich für die Kraft auf ein Leitungselektron (mit der Elektronenmasse m):

$$m\dot{\vec{v}}_s = e\vec{E} \quad (3.6)$$

Führen wir jetzt die Elektronendichte n_s der Supraleitung ein und definieren die Suprastromdichte $\vec{j}_s = n_s e \vec{v}_s$ ergibt sich die 1. London-Gleichung:

$$\frac{d\vec{j}_s}{dt} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} \quad (3.7)$$

Erinnern wir uns nun an die Maxwell-Gleichungen und gehen davon aus, dass wir uns in der supraleitenden Phase befinden, so können wir schreiben:

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j}_s + \frac{d\vec{D}}{dt} \quad (3.8)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{d\vec{H}}{dt} \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (3.10)$$

Wir gehen im Weiteren davon aus, dass wir den Verschiebungsstrom vernachlässigen können. Damit erhalten wir mit (3.7) und (3.9):

$$\mu_0 \frac{d\vec{H}}{dt} = -\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \nabla \times \left(\frac{d\vec{H}}{dt} \right) \quad (3.11)$$

Schreiben wir nun $\nabla \times \nabla \times = \nabla \cdot \nabla - \Delta$ und verwenden (3.10) erhalten wir:

$$\Delta \frac{d\vec{H}}{dt} = \frac{1}{\lambda_L^2} \frac{d\vec{H}}{dt} \quad (3.12)$$

wobei wir die *London'sche* Eindringtiefe definiert haben:

$$\lambda_L = \frac{m}{\mu_0 n_s e^2} \quad (3.13)$$

Diese Benennung ist insofern sinnvoll, da die Lösung der Gleichung (3.12) auf ein exponentiell abfallendes $\frac{d\vec{H}}{dt}$ führt.

Im eindimensionalen Fall verhält sich also $\frac{d\vec{H}}{dt}$ in der Probe wie $\exp(-x/\lambda_L)$.

Wir fordern jetzt aber, dass λ_L nicht nur für $\frac{d\vec{H}}{dt}$, sondern auch für \vec{H} selbst gilt. Das ist nicht direkt aus (3.12) ableitbar, steht aber auch nicht im Widerspruch dazu.

Fordern wir aber zusätzlich, dass

$$\nabla \times \vec{j}_s = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{H} \quad (3.14)$$

gilt, folgt unmittelbar der gewünschte Zusammenhang. (3.14) bezeichnen wir daher als die 2. Londongleichung.

Aus experimentellen Befunden erkennen wir aber, dass die London-Theorie nur eine Näherung der tatsächlichen Sachverhalte darstellt.

Messen wir nämlich die reale Eindringtiefe λ in einem Typ-I-Supraleiter, zeigt sich, dass immer $\lambda > \lambda_L$ ist. Für Typ-II-Supraleiter, in denen die Ausdehnung der Cooper-Paare klein gegenüber λ_L ist, stellt die London-Theorie eine gute Näherung dar – natürlich erklärt sie aber nicht das Auftreten der Flusslinien. Diese ist erst im Rahmen der im nächsten Kapitel behandelten *Ginsburg-Landau*-Theorie und *Abrikosovs* spezieller Lösung der maßgeblichen *Ginsburg-Landau*-Gleichungen möglich.

3.3 Ginsburg-Landau-Theorie

Ausgehend von *Landaus* 1937 aufgestellter Theorie der Phasenübergänge 2. Ordnung kann man die freie Energie des Supraleiters in der Nähe von T_c als Funktion des Ordnungsparameters Ψ entwickeln:

$$F = F_n + \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 \quad (3.15)$$

Die entscheidende gedankliche Leistung von *Ginsburg* und *Landau* war nun, dass sie den im Allgemeinen ortsabhängigen Ordnungsparameter als Effektivwellenfunktion der Trägerteilchen des Suprastromes auffassten.

Hier ist anzumerken, dass *Ginsburg* und *Landau* noch keine Annahmen über die Ladung der Suprastromträger trafen; wir verwenden hier aber – im Wissen um die Existenz der Cooper-Paare – den korrekten Wert $2e$.

Die *Ginsburg-Landau*-Theorie lässt sich aber problemlos mit einem beliebigen q_s formulieren. *Ginsburg* und *Landau* setzten die kinetische Energie der Ladungsträger (und damit deren Kopplung an das \vec{B} -Feld) folgendermaßen an:

$$E_{kin} = \frac{1}{2m} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - 2e\vec{A} \right) \psi \right|^2 \quad (3.16)$$

Wir können damit die freie Energie des Supraleiters in ihrer Gesamtheit angeben:

$$F = F_n + \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - 2e\vec{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{|\vec{B}|^2}{2\mu_0} \quad (3.17)$$

Minimieren wir nun (3.17) in Hinblick auf den Ordnungsparameter $\Psi(\vec{r})$ und das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$, erhalten wir die zwei *Ginsburg-Landau*-Gleichungen:

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - 2e\vec{A} \right)^2 \psi = 0 \quad (3.18)$$

und

$$\vec{j} = \frac{2e}{m} \text{Re} \left\{ \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - 2e\vec{A} \right) \psi \right\} \quad (3.19)$$

Damit wir die Minimierung durchführen können, müssen wir als Nebenbedingung

$$\left[\left(-i\hbar\nabla - 2e\vec{A} \right) \Psi \right]_n = 0 \quad (3.20)$$

fordern.

Hierbei bezeichnet der Index n die Normalkomponente an der Oberfläche. Diese Forderung impliziert, dass keine Supraströme durch die Oberfläche des Supraleiters fließen. Auf eine detaillierte Ableitung verzichten wir an dieser Stelle und verweisen auf [3].

3.3.1 Die Ginsburg-Landau-Parameter

Ein überaus wichtiges Ergebnis der GL-Theorie ist die Postulation zweier, für einen gegebenen Supraleiter charakteristischer, Parameter. Hierbei handelt es sich zum einen um die temperaturabhängige Kohärenzlänge $\xi(T)$ und zum anderen um die sogenannte wahre Eindringtiefe $\lambda(T)$.

Die Kohärenzlänge ξ gibt dabei an, auf welcher Strecke sich die *Dichte* der Supradladungsträger merklich ändern kann. Sie ist auf keinen Fall mit der Kohärenzlänge ξ_0 zu verwechseln, die die Ausdehnung eines Cooper-Paares angibt und sich mit der Temperatur kaum ändert, während $\xi(T)$ bei $T = T_c$ divergiert.

Die zweite charakteristische Länge, λ , ist ausschlaggebend für die Länge, auf der ein Magnetfeld im Supraleiter exponentiell abklingt. Im Grenzfall, wenn wir $|\Psi|^2 = n_s$ schreiben könnten, geht sie wieder in die *London'sche* Eindringtiefe λ_L über.

Setzen wir die Parameter λ und ξ in ein Verhältnis zueinander, erhalten wir den *Ginsburg-Landau-Parameter*:

$$\kappa = \frac{\lambda}{\xi} \quad (3.21)$$

Dieser Parameter gibt uns Auskunft über das Vorzeichen der Oberflächenenergie zwischen normal- und supraleitender Phase – also darüber, ob Typ-I- oder Typ-II-Supraleitung vorliegt.

Ist die Oberflächenenergie positiv, so wird das System in einen Zustand minimaler Grenzfläche zwischen den Phasen streben – das ist genau das Verhalten, das wir als *Meißner-Ochsenfeld-Effekt* beschrieben haben. Es handelt sich also um den Fall der Typ-I-Supraleitung.

Haben wir jetzt aber negative Oberflächenenergie, so wird sich die Grenzfläche zwischen den Phasen immer weiter erhöhen.

Das heißt, dass sich die von magnetischem Fluss durchsetzte Phase so lange in kleinere Bereiche aufteilt, bis ein Quantenlimit erreicht wird. Exakt jenes Verhalten beobachten wir im Fall der Typ-II-Supraleitung. Eine etwas längliche Rechnung – hier sei wiederum auf [3] verwiesen – führt zu dem Ergebnis, dass genau wenn

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.22)$$

gilt, die Oberflächenenergie ihr Vorzeichen ändert.

Sind wir im Bereich $\kappa < 1/\sqrt{2}$, befinden wir uns im Regime der Typ-I-Supraleitung, ist $\kappa > 1/\sqrt{2}$ liegt Typ-II-Supraleitung vor.

Auf die damit einhergehenden Effekte, nämlich die Existenz der Flusslinien und die Flussquantisierung, gehen wir im Kapitel 3.5 näher ein.

3.4 BCS-Theorie

1957 gelang *Bardeen, Cooper* und *Schrieffer* die erste und bis heute gültige mikroskopische Erklärung der Supraleitung. Für diese Leistung erhielten sie 1972 gemeinsam den Nobelpreis für Physik.

Die grundlegende Idee der BCS-Theorie besteht darin, dass eine beliebig schwache, anziehende Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen postuliert wird. Ausgehend davon zeigten *Bardeen, Cooper* und *Schrieffer*, dass es, solange die Wechselwirkung anziehend bleibt, zu einem gebundenen Zweielektronenzustand kommt.

Diese sogenannten *Cooper*-Paare sind in vielerlei Hinsicht als Bosonen zu behandeln und werden durch eine, den gesamten Festkörper umfassende, *Bose-Einstein*-Wellenfunktion beschrieben.

Diese Wellenfunktion wird von lokalen Störstellen (Atomrümpfen und Fehlstellen im Gitter) nicht mehr beeinflusst und führt so zu den Eigenschaften des Supraleiters. Als Mechanismus der Anziehung zwischen den Elektronen konnten Wechselwirkungen mit dem Atomgitter des Supraleiters identifiziert werden. Es handelt sich also bei den *Cooper*-Paaren um einen durch Phononen gekoppelten Zweielektronenzustand.

Die BCS-Theorie wurde sehr schnell akzeptiert, da aus ihr viele experimentelle Tatsachen elegant und schlüssig hervorgehen. So erklärt die Theorie die Entstehung und das Verhalten der Energielücke der Supraleiter, die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme, den *Meißner*- und den Isotopeneffekt; um nur einige Beispiele zu nennen.

Wir verzichten an dieser Stelle auf eine weitergehende Behandlung der BCS-Theorie, da sie für das Verständnis dieser Arbeit nicht zwingend erforderlich ist. Genaue Betrachtungen der Theorie finden sich in den gängigen Lehrbüchern der Supraleitung – siehe hierzu unter anderem die zuvor erwähnten [3] und [6].

3.5 Das Flussliniengitter

Dieses Kapitel soll einen genaueren Überblick über die Entstehung und die Eigenschaften des Flussliniengitters in Typ-II-Supraleitern geben. Es wurde schon an verschiedenen Stellen in dieser Arbeit erwähnt, dass *Abrikosov* erstmals eine periodische Lösung der *Ginsburg-Landau*-Gleichungen fand. Periodisch insofern, als dass der Ordnungsparameter $|\Psi|^2$ wiederholt zwischen 0 und 1 oszilliert.

Jene Bereiche, in denen Ψ verschwindet, identifizierte *Abrikosov* als Regionen, in denen die supraleitende Phase verschwindet und ein äußeres Magnetfeld in den Supraleiter eindringt.

Ein solches Objekt wird im Allgemeinen als Flusslinie, Vortex oder Fluxon bezeichnet.

Wie man sowohl aus *Abrikosovs* Rechnungen als auch aus der experimentellen Beobachtung der Flusslinien erkannt hat, besteht ein einzelner Vortex aus einem normalleitenden “Kern”, um den ein Suprastrom kreist.

Der in einer Flusslinie auftretende magnetische Fluss ist immer ein ganzzahliges Vielfaches des magnetischen Flussquants:

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \quad (3.23)$$

Die beiden im Rahmen der *Ginsburg-Landau*-Theorie eingeführten Parameter, Kohärenzlänge ξ und Eindringtiefe λ , erhalten im Typ-II-Supraleiter eine Erweiterung respektive Neuinterpretation ihrer Bedeutung:

Die Eindringtiefe beschreibt nun (auch) den typischen Radius eines Fluss Schlauches, wohingegen die Kohärenzlänge den Radius des normalleitenden Kerns der Flusslinie angibt.

Betrachten wir den Fall, dass $\kappa \gg 1$, können wir näherungsweise für das Magnetfeld einer isolierten Flusslinie (Gln. 5.14 in [6])

$$B(r) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (3.24)$$

schreiben.

Im obigen Ausdruck ist Φ_0 das magnetische Flussquantum (Flussquantisierung innerhalb der Flusslinie durch supraleitenden “Ring” um den Linienkern) und K_0 eine

modifizierte Besselfunktion 2. Art: (Gl. 9.6.12 in [1]):

$$K_0 = \int_0^\infty \cos(x \sinh t) dt \quad (3.25)$$

Qualitativ strebt $K_0(r/\lambda)$ mit $e^{(-r/\lambda)}$ gegen 0 für $r \rightarrow \infty$ und divergiert logarithmisch wie $\ln(\lambda/r)$ für $r \rightarrow 0$.

Da bei $r \approx \xi$ $|\Psi|^2$ gegen Null fällt, ist $B(r)$ tatsächlich am Flusslinienzentrum endlich. Im Detail verhält sich $B(r)$ im Grenzwert wie:

$$B(r) \rightarrow \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \left(\frac{\pi\lambda}{2r} \right)^{1/2} e^{-r/\lambda} \quad r \rightarrow \infty \quad (3.26)$$

$$B(r) \approx \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \left[\ln \frac{\lambda}{r} + 0.12 \right] \quad \xi \ll r \ll \lambda \quad (3.27)$$

Der Ordnungsparameter $|\Psi|^2$ zeigt in Fall einer isolierten Flusslinie folgendes Näherungsverhalten:

$$|\Psi|^2 \approx \frac{1}{1 + \frac{2\xi^2}{r^2}} \quad (3.28)$$

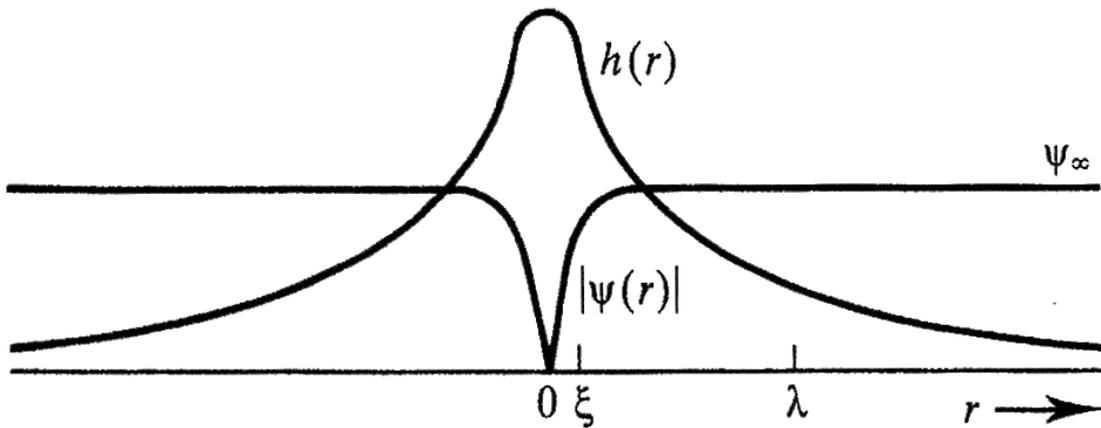


Abbildung 3.4: Verlauf des magnetischen Feldes $h(r)$ und des Ordnungsparameters $|\Psi|$ einer isolierten Flusslinie für einen Supraleiter mit $\kappa \approx 8$.

Quelle: [6], Fig. 5.1

3.6 Energie und Wechselwirkung

In einer hinreichend großen und homogenen Probe können wir davon ausgehen, dass sich die Flusslinien in einem regelmäßigen Gitter parallel anordnen. Dann nähern wir die Wechselwirkungsenergie des Flusslinienfeldes zu [2]:

$$E_{WW} = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\lambda^2\mu_0} \sum_i \sum_{j>1} \left[K_0 \left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda'} \right) - K_0 \left(\frac{|r_i - r_j|}{\xi'} \right) \right] \quad (3.29)$$

Hierbei stellen $\lambda' \approx \frac{\lambda}{\sqrt{1-b}}$ und $\xi' \approx \frac{\xi}{\sqrt{1-b}}$ die effektive Eindringtiefe respektive Kohärenzlänge (mit $b = \frac{B}{B_{c2}}$, B ist das mittlere Feld im Supraleiter) dar.

Die abstoßende Wechselwirkung durch das Überlappen der Magnetfelder der jeweiligen Flusslinien wird im ersten Term der Klammer beschrieben; der zweite Term vermittelt eine anziehende Wechselwirkung zwischen den Flusslinien, die daher rührt, dass Energie – die sog. Kondensationsenergie – frei wird, wenn sich zwei Flusslinienkerne überlappen und zu einer Flusslinie verschmelzen.

Da die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Abstände zwischen den (als punktförmig angenommenen) Flusslinien deutlich größer sind als der Kerndurchmesser, wurde dieser Term in der Energieberechnung vernachlässigt.

Mit $F = -\nabla E$ ergibt sich aus 3.29 – unter Berücksichtigung erwähnter Vereinfachung – die Kraft auf die i . Flusslinie zu:

$$F = -\frac{\Phi_0^2}{2\pi\lambda^3\mu_0} \sum_{i \neq j} K_1 \left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda'} \right) \quad (3.30)$$

(Mit $K_1(x) = -\frac{\partial}{\partial x} K_0(x)$).

3.6.1 Räumliche Struktur

Überlegungen zur freien Energie des Flussliniengitters (z.B. Kap. 4.11. in [6]) führen zu der Erkenntnis, dass sich die Flusslinien – anders als von *Abrikoso*v selbst postuliert – nicht in einem quadratischen, sondern in einem Dreiecksgitter anordnen. Jedoch ist der Energieunterschied zwischen einer quadratischen und hexagonalen Anordnung so minimal, dass es in manchen Materialien zu einer Dominanz zugrundeliegender Matrixsymmetrien kommt. In diesem Fall können sich dann quadratische oder gar rechteckige Gitter ausbilden [6].

Matrixinhomogenitäten beeinflussen die Symmetrie des Flussliniengitters ebenfalls; zum Teil erheblich. Tatsächlich sind die Auswirkungen oft so massiv, dass wichtige Eigenschaften des Typ-II-Supraleiters nur unter Betrachtung dieser Matrixeffekte erklärt werden können. Darauf wird in Kapitel 3.7 noch eingegangen.

Ein weiteres, naheliegendes Argument für eine hexagonale Struktur ist die Tatsache, dass diese Anordnung die dichteste ebene Packung an Flusslinien darstellt.

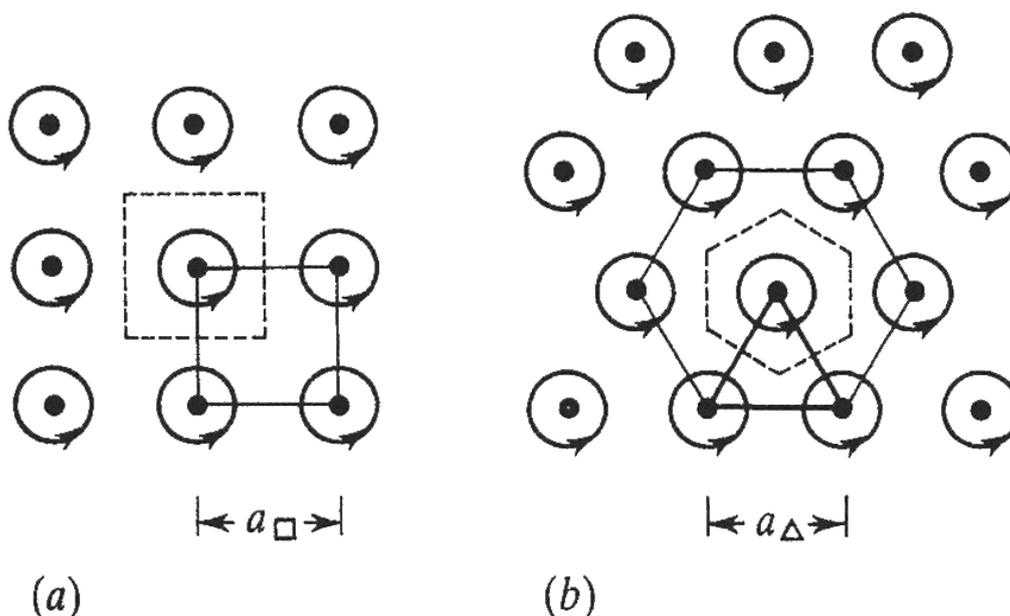


Abbildung 3.5: Vergleich a) quadratischer und b) hexagonaler Flusslinienanordnung.
Quelle: [6], Fig. 4.11

Wenn wir den Abstand zwischen den nächsten Nachbarn in einem quadratischen (a_{\square}) und einem hexagonalen (a_{Δ}) Gitter vergleichen, so erhalten wir:

$$a_{\square} = \left(\frac{\Phi_0}{B}\right)^{1/2} \quad (3.31)$$

$$a_{\Delta} = \left(\frac{4}{3}\right)^{1/4} \left(\frac{\Phi_0}{B}\right)^{1/2} = 1.075 \left(\frac{\Phi_0}{B}\right)^{1/2} \quad (3.32)$$

In Anbetracht der Tatsache, dass sich die Flusslinien gegenseitig abstoßen, ist es nur natürlich, dass das Feld die Anordnung bevorzugt, welche den Abstand zwischen den nächsten Nachbarn maximiert und dennoch die niedrigste Energie bietet. Das quadratische Gitter kann aufgrund der geringen Energiedifferenz zur hexagonalen Anordnung infolge geeigneter Randbedingungen (quasi-)stabil sein.

3.7 Pinning und kritische Ströme

Wenn wir von einer realen Probe eines Typ-II-Supraleiters ausgehen, haben wir auch eine gewisse Anzahl an Störstellen in der Matrix zu erwarten. Selbst eine absolut reine und homogene Probe weist – sofern sie endlichen Ausmaßes ist – prinzipbedingt immer eine Störung auf: ihre Oberfläche.

Es zeigte sich in Theorie und experimenteller Praxis, dass diese Störstellen eine nicht zu vernachlässigende Kraft auf die Flusslinien in ihrer Nähe ausüben.

Da diese Kräfte teils so groß sein können, dass sie die Flusslinien an einer – zum Beispiel durch einen makroskopischen Strom – induzierten Bewegung hindern, spricht man bei der Flusslinien-Störstellen-Wechselwirkung von *pinning* und bezeichnet die Störstellen analog als *Pinningzentren*. Je näher eine Flusslinie einem Pinningzentrum kommt, desto stärker ist der Einfluss der Pinningkraft auf die Flusslinie; gleichzeitig wird auch der Einfluss der Rückstellkraft des Gitters auf die Flusslinie größer. Je nachdem wie sich die elastische Gitterrückstellkraft und die Pinningkraft zueinander verhalten, unterscheiden wir zwischen starkem und schwachem Pinning. Steigt die Pinningkraft mit sich verringerndem Abstand zum Pinningzentrum stärker an als die Rückstellkraft, so wird die betreffende Flusslinie am Pinningzentrum verankert und man spricht von “starkem” Pinning.

In weiterer Folge ist der Mechanismus der Flusslinienverankerung von essentieller Bedeutung bei der Erklärung einer Vielzahl an Phänomenen der Typ-II-Supraleitung:

- Da die Flusslinien nicht mehr nach Belieben aus dem Supraleiter “auswandern” können, wenn das äußere Magnetfeld wieder sinkt, ist die Magnetisierung des Supraleiters $M(H_a)$ irreversibel und beschreibt eine typische Hystereseurve.
- Da die Wechselwirkung zwischen Flusslinie und Pinningzentrum auch das Pinningzentrum – und damit die Matrix des Supraleiters – beeinflusst, entstehen im Supraleiter magnetomechanische Effekte.
- Der wichtigste Punkt ist der, dass eine gewisse Anzahl an verankerten Flusslinien vorhanden sein muss, damit ein Typ-II-Supraleiter Nullwiderstand aufweisen kann.

Jeder Strom $J < J_c$, der durch den Supraleiter fließt, übt eine Lorentzkraft auf die Flussschläuche aus. Ohne Verankerung würde sich das Gitter entspre-

chend dieser Kraft verschoben; jede Gitterbewegung ist aber gleichzeitig eine Energiedissipation im Medium. Dies würde sich unter anderem als elektrischer Widerstand bemerkbar machen.

Sind aber ausreichend viele Pinningzentren vorhanden, stabilisieren die verankerten Flusslinien das Gitter und unterbinden eine Translation der gesamten Flusslinienanordnung. Natürlich hat auch die Pinningkraft ihre Grenzen: Überschreitet der Strom eine kritische Stromstärke, lösen sich die Flusslinien von den jeweiligen Pinningzentren ab.

Die Dichte und Art der Verankerungszentren trägt also direkt zur Höhe von J_c bei.

Wir besprechen hier Pinning-Phänomene, da sie für diese Arbeit direkt zwar nicht wesentlich relevant sind, aber große Bedeutung erlangen, wenn wir die Motivation zu unseren Untersuchungen betrachten.

Das System der Störstellen in der Matrix – und die daran verankerten Flusslinien – bilden für das Flussliniengitter ein absolutes Koordinatensystem. Es ist dem Flussliniengitter also nicht mehr auf einfache Weise möglich, durch elastische Transformationen in einen Zustand niedrigerer Energie überzugehen.

Speziell in Anwesenheit von Versetzungen im Flussliniengitter ist es nicht gesagt, dass diese Versetzungen durch Umordnungen im Gitter – wie in typischen Festkörpern – wieder aufgelöst werden können. Diese Effekte sind wahrscheinlich im Fall des starken Pinnings am deutlichsten ausgeprägt und tragen womöglich in einer noch nicht näher erforschten Art und Weise zum Verhalten der Supraleiter und ihren Eigenschaften bei.

Um hier weitere Aussagen treffen zu können ist es notwendig, die Bewegung und das weitere Verhalten von Versetzungen im Flussliniengitter, bestenfalls unter Anwesenheit äußerer Kräfte und unter dem Vorhandensein von verankerten Flusslinien, zu simulieren. Erst dann können wir abschätzen, wie sehr die Versetzungen tatsächlich den gesamten Supraleiter beeinflussen und auf welche Art die Versetzungen mit den Verankerungszentren wechselwirken.

In dieser Arbeit wurde nun versucht, einen ersten Schritt zur komplexen Simulation eines gestörten Gitters zu unternehmen, indem Versetzungen in einem reinen Flussliniengitter gezielt erzeugt und manipuliert wurden. Die gewonnenen Daten und der Vergleich dieser mit theoretischen Vorhersagen soll es uns dann ermöglichen, die

Modelle und die Simulationen gegenseitig zu verbessern, sodass wir schlussendlich in der Lage sein werden, jene Art von komplexen System zu untersuchen, das Antworten auf die aktuellen Fragen liefern kann.

3.8 Elastische Theorie der Versetzungen

Da die Simulationen dieser Arbeit primär dem Zweck dienen, theoretische Aussagen über die Mobilität von Versetzungen im Flussliniengitter durch ein Computerexperiment nachzuvollziehen, werden wir in diesem Kapitel den theoretischen Unterbau dieser Aussagen behandeln.

Makroskopische Phänomene im Typ-II-Supraleiter, wie die im vorhergehenden Kapitel besprochenen, sind grundsätzlich durch eine über das Probenvolumen gemittelte Volumenhaltekraft P_V – bei einer bestimmten äußeren B-Feldstärke – zu beschreiben. P_V muss jedoch in direkter Weise aus den Einzelkräften, die zwischen Flusslinien und Matrix wirken, hervorgehen. Die Einzelkräfte sind im Experiment, anders als die Volumenkraft, aber kaum zu bestimmen.

Hier setzt unser Computerexperiment an: es erlaubt uns, die auf die Flusslinien re-spektive Versetzungen im Gitter wirkende Kraft exakt zu steuern.

Das ist von großer Bedeutung, da ein versuchtes “Aufsummieren” der Einzelkräfte zur Volumenkraft kein korrektes Ergebnis bringt [3]. Die Volumenspinningkraft, die sich aus solchen Superpositionsrechnungen ergibt, ist deutlich kleiner als die experimentell beobachtete Kraft. Jedoch wurde innerhalb der direkten Summationsrechnungen keine Rücksicht auf die speziellen elastischen Eigenschaften des Flussliniengitters und der Defekte im Flussliniengitter genommen.

Experimentelle Beobachtungen realer Typ-II-Supraleiter zeigen aber, dass Versetzungen im Flussliniengitter nicht etwa die Ausnahme, sondern eher die Regel sind. Sobald nämlich das Flussliniengitter einer Spannung ausgesetzt wird, entstehen zwangsläufig Bereiche unterschiedlicher Vortex-Dichten. Das führt dazu, dass der Gitterparameter des Flussliniengitters nicht mehr – wie im “normalen” Festkörper – weitgehend positionsunabhängig ist. Damit dieses Verhalten energetisch möglich ist, müssen Versetzungen auftreten; ansonsten würde das “Ansammeln” von Verzerrungen im Gitter zu einem quadratisch wachsenden Verzerrungsenergiebeitrag führen.

Erst die Arbeiten von *Labusch* konnten 1969 eine elastische Theorie des Flussliniengitters aus den *Ginsburg-Landau*-Gleichungen mittels einer Kontinuumsnäherung ableiten. Die Grundlage der heutigen Betrachtungsweise stellen die von *E.H. Brandt* vorgenommenen Erweiterungen und Verallgemeinerungen auf anisotrope Supraleiter dar (siehe [2], 1492ff.).

Wir werden jetzt die Ergebnisse dieser Berechnungen vorstellen, bevor wir dann die in dieser Arbeit zum Teil untersuchten Erweiterungen dieser Formulierung um die Behandlung von Versetzungen im Flussliniengitter besprechen. Es leiten sich dann mehrere Vorhersagen aus der Einbeziehung der Versetzungen ab, von denen schlussendlich zwei im Zuge dieser Arbeit überprüft wurden.

3.8.1 Elastische Moduln

Der einfachste Weg, einen Ausdruck für die lineare elastische Energie F_{elast} anzugeben, führt über den k -Raum [2]. Wir schreiben zuerst die Verschiebung der Flusslinie aus ihrer Idealposition $R_i = (X_i; X_i; z)$ als $u_i(z) = r_i(z) - R_i = (u_{i,x}; u_{i,y}; 0)$. Dann drücken wir die einzelnen u_i durch ihre Fourier-Komponenten aus:

$$u_i(z) = \int_{BZ} \frac{d^3k}{8\pi^3} u(k) e^{ikR_i} \quad u(k) = \frac{\Phi_0}{B} \sum_i \int dz u_i(z) e^{-ikR_i} \quad (3.33)$$

Damit schreiben wir die allgemeinste quadratische Form der $u(k) = (u_x; u_y; 0)$:

$$F_{\text{elast}} = \frac{1}{2} \int_{BZ} \frac{d^3k}{8\pi^3} u_\alpha(k) \Psi_{\alpha\beta}(k) u_\beta^*(k) \quad (3.34)$$

Die Integrale in 3.33 und 3.34 laufen über die 1. Brillouin-Zone des Flussliniengitters und $-\xi^{-1} \leq k_z \leq \xi^{-1}$; mit $(\alpha, \beta) = (x, y)$.

Die Matrix $\Psi_{\alpha\beta}$ nennen wir elastische Matrix. Sie ist reell, symmetrisch und periodisch im k -Raum.

Ihre Elemente ergeben sich (mit dem uniaxialen Kompressionsmodul c_{11} , dem Schermodul c_{66} und dem Kippmodul c_{44}) zu:

$$\Psi_{xx} = c_{11}k_x^2 + c_{66}k_y^2 + c_{44}k_z^2 + \alpha_L(k) \quad (3.35)$$

$$\Psi_{yy} = c_{66}k_x^2 + c_{11}k_y^2 + c_{44}k_z^2 + \alpha_L(k) \quad (3.36)$$

$$\Psi_{xy} = \Psi_{yx} = (c_{11} - c_{66})k_x k_y \quad (3.37)$$

Diese Überlegungen sind jetzt nicht nur für das Flussliniengitter im Speziellen gültig, sondern beschreiben auch adäquat Verzerrungen in "typischen" Festkörpergittern. Der einzige Unterschied besteht in der Einführung des *Labusch*-Parameters $\alpha_L(k)$, der der Wechselwirkung der Flusslinien mit der Matrix Rechnung trägt und an die jeweilige experimentelle oder theoretische Situation angepasst werden muss.

Die spezielle Physik des supraleitenden Gitters geht auch in die Ausformulierung der elastischen Konstanten ein. Hier kommen die oben erwähnten Arbeiten von *Labusch* et al. ins Spiel.

Durch Ableitungen aus den *Ginsburg-Landau*-Gleichungen ergeben sich folgende Zusammenhänge für die Moduln (*Labusch*, 1969, zitiert aus [2] Glgn. (4.4)) unter Annahme uniformer Verformungen des Dreiecksgitters:

$$c_{11} - c_{66} = B^2 \frac{\partial^2 F}{\partial B^2} = \frac{B^2}{\mu_0} \frac{\partial B_a}{\partial B} \quad (3.38)$$

$$c_{44} = B \frac{\partial F}{\partial B} = B \frac{B_a}{\mu_0} \quad (3.39)$$

$$c_{66} \approx \frac{B\Phi_0}{16\pi\lambda^2\mu_0} \left(1 - \frac{1}{2\kappa^2}\right) (1-b)^2 (1 - 0.58b + 0.29b^2) \quad (3.40)$$

($b = B/B_{c2}$ und $B_a/\mu_0 = \partial F/\partial B$ ist das angelegte Feld, das im Gleichgewicht mit zum Flussliniengitter mit B ist)

Interessant ist, dass die Näherung von c_{66} zeigt, dass $c_{66} = 0$ wenn $\kappa = 1/\sqrt{2}$, da alle Anordnungen der Flusslinien dann dieselbe Energie haben. Zusätzlich verschwindet c_{66} für $\lambda \rightarrow \infty$ (Überlappende Vortex-Magnetfelder) und $B \rightarrow B_{c2}$ (Überlappende Kerne).

Im allgemeinen Fall sind die elastischen Konstanten c_{11} und c_{44} nicht mehr \vec{k} -unabhängig [2]. Entsprechend unserer Simulationsgeometrie nehmen wir an, dass das äußere B -Feld parallel zur c -Achse des Supraleiters verläuft und fordern weiter, dass $b = B/B_{c2} < 0.25$ und $\kappa > 2$.

Dann gelten folgenden Beziehungen für die Moduln (Gln. 4.9 - 4.12 in [2]; mit $\Gamma = \lambda_c/\lambda_{ab}$):

$$c_{11}(k) = \frac{B^2}{\mu_0} \frac{1 + \lambda_c^2 k^2}{(1 + \lambda_{ab}^2 k^2)(1 + \lambda_c^2 k_{\perp}^2 + \lambda_{ab}^2 k_z^2)} \quad (3.41)$$

$$c_{44}(k) = \frac{B^2}{\mu_0} \left[\frac{1}{1 + \lambda_c^2 k_{\perp}^2 + \lambda_{ab}^2 k_z^2} + \frac{f(k_z)}{\lambda_{ab}^2 k_{BZ}^2} \right] \quad (3.42)$$

$$f(k_z) = \frac{1}{2\Gamma^2} \ln \frac{\xi_c^{-2}}{\lambda_{ab}^{-2} + k_z^2 + \Gamma^2 k_0^2} + \frac{\ln [1 + k_z^2/(\lambda_{ab}^{-2} + k_0^2)]}{2k_z^2 \lambda_{ab}^2} \quad (3.43)$$

$$c_{66} \approx \frac{B\Phi_0}{16\pi\lambda_{ab}^2\mu_0} \quad (3.44)$$

Speziell Gleichung (3.44) ist hier von Bedeutung, da sie eine der Vorhersagen ist, die diese Arbeit schlussendlich zum Vergleich mit dem Computerexperiment verwendet.

3.8.2 Versetzungsbewegung

Mit obigen Gleichungen für die Moduln können wir mittels des grundlegenden *Peierls-Nabarro*-Modells zur Versetzungsbewegung die notwendige Spannung im Flussliniengitter abschätzen, um eine Versetzung entlang einer Gleitebene im Flussliniengitter zu bewegen. Das *Peierls-Nabarro*-Modell ist eine vergleichsweise einfache Beschreibung einer Versetzungsbewegung parallel zu ihrem *Burgers*-Vektor. Es existieren wesentlich komplexere Beschreibungen der Versetzungsbewegung, deren Verwendung eventuell nötig sein wird, um genauere Aussagen treffen zu können. Sowohl das *Peierls-Nabarro*-Modell als auch weiterführende Beschreibungen sind genau in [4] dargelegt.

Die *Peierls-Nabarro*-Spannung berechnet sich wie folgt (Glg. 8-39 in [4]):

$$\tau_{PN} = \frac{2c_{66}}{1-\nu} e^{-\frac{2\pi\sqrt{3}a_0}{2a_0(1-\nu)}} \quad (3.45)$$

mit der Poissonzahl

$$\nu = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{c_{66}}{c_{11}}\right) \quad (3.46)$$

wie man aus $\lambda = c_{11} - 2c_{66}$, $\mu = c_{66}$ und $\nu = \frac{\lambda}{2(\mu+\lambda)}$ leicht sieht (Glg. 2-50 in [4]), wenn $\frac{c_{66}}{c_{11}} \ll 1$, was in unseren Rechnungen immer der Fall ist (s. Kap. 5.2.4). Dabei ist $c_{66} = c_{66}(B)$ und $c_{11} = c_{11}(\vec{k}, B)$; damit ist auch $\nu = \nu(\vec{k}, B)$.

Um eine obere und untere Grenze der möglichen Scherkraftwerte zu erhalten, werden wir die numerischen Daten mit Berechnungen für $k^2 = 0$ und $k^2 = k_{BZ}^2$ vergleichen. Als \vec{k}_{BZ} bezeichnen wir das maximale \vec{k} in einer kreisförmigen Näherung der (hexagonalen) Brillouin-Zone des Gitters mit der Fläche πk_{BZ}^2 :

$$k_{BZ}^2 = 4\pi \frac{B}{\Phi_0} \quad (3.47)$$

Da sich unser Gitter nur in der *ab*-Ebene periodisch verhält und die Flusslinien in *z*- beziehungsweise *c*-Richtung als unendlich lang angenommen werden, ergibt sich $k_z = 0$ und wir können $k^2 = k_{\perp}^2$ schreiben.

Für die anderen benötigten Parameter substituieren wir typische YBCO-Werte bei tiefen Temperaturen ($T \approx 5$ K):

$\lambda_{ab} = 140$ nm, $\lambda_c = 800$ nm, $\xi_{ab} = 200$ nm und $\xi_c = 0.4$ nm.

Wir können nun die Plausibilität unserer Ergebnisse überprüfen, da die Scherkraftwerte zwischen den oben angegebenen Grenzen liegen müssen um physikalischen Sinn zu ergeben.

Vergleichen wir die Resultate des Experiments mit den beiden Grenzwerten, erlaubt uns das zusätzlich eine Abschätzung der Lokalität beziehungsweise der Reichweite der Versetzungswechselwirkung. Dazu ermitteln wir die k_{\perp}^2 -Werte, welche die beste Übereinstimmung mit unseren Daten ergeben und berechnen daraus den Gitterparameter a_{dis} eines hypothetischen hexagonalen Versetzungsgitters mittels der exakten Beziehung für k_{BZ} im reziproken hexagonalen Gitter:

$$k_{BZ} = \frac{4\pi}{\sqrt{3} a_{dis}} \quad (3.48)$$

Dieses so ermittelte a_{dis} definiert dann die Längenskala, auf der wir typischerweise Auswirkungen der Versetzungen erwarten können.

Zusätzlich sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass wann immer wir von einer “Kraft” sprechen, wir – durch die fehlende z -Dimension unserer Simulation – eine Kraft pro Längeneinheit meinen, dieses aber zugunsten des besseren Leseflusses im Text nicht immer explizit erwähnen, bei der Angabe von physikalischen Einheiten jedoch immer die korrekten Dimensionen angeben.

3.9 Versetzungsenergie

Wir behandeln in diesem Abschnitt die Energie eines Versetzungspaars, da aus Symmetriegründen innerhalb unserer Simulationsgeometrie immer zwei Versetzungen erzeugt wurden. Da diese Überlegungen von unserem speziellen Aufbau der Simulationsgeometrie ausgehen, ist es für das bessere Verständnis des folgenden Abschnitts sicherlich förderlich, die Kapitel 4.4 und 4.5 im Voraus zu betrachten, da sie den “Experimentaufbau” näher beschreiben. Da das aktuelle Kapitel dennoch zum theoretischen Unterbau (wenn auch mit spezifischen, experimentellen Bezug) beiträgt, steht es der konzeptuellen Einheitlichkeit halber an dieser Stelle.

Die Auswirkungen, die solch ein Versetzungspaar auf das Flussliniengitter zeigt, gehen über rein geometrische Veränderungen weit hinaus. Wie schon im Laufe dieser theoretischen Einführung besprochen, stellen Versetzungen einen wichtigen Aspekt der Typ-II-Supraleitung dar. Unabhängig von ihren sonstigen Eigenschaften lassen sich Versetzungen unter anderem darüber charakterisieren, in welcher Art sie die Energiebilanz eines gegebenen Flussliniengitters verändern.

Im Zuge dieser Arbeit wurde durch Vergleiche gestörter und regelmäßiger Gitter – unter Variation des äußeren Feldes und der Flusslinienzahl – versucht, einen genaueren Einblick darin zu erhalten, wie sich der Energiebeitrag einer Versetzung zur Gesamtenergie des Flussliniengitters im Detail verhält.

Hierzu ist es sinnvoll, die Gesamtenergie der Flusslinienanordnung in drei Energiebeiträge aufzuspalten:

$$E_{tot} = \sum E_{FL} \cong N \cdot \bar{E}_{FL} + E_{WW} + E_{selbst} \quad (3.49)$$

Der erste Term in diesem Ausdruck, $N \cdot \bar{E}_{FL}$, steht für die Energie eines ungestörten Gitters mit N Flusslinien und der mittleren Energie pro Flusslinie \bar{E}_{FL} . Diesen Term bestimmen wir aus Simulationen der Gitterkonfigurationen ohne Versetzungen, aber unter sonst gleichen Randbedingungen.

Der zweite Term, E_{WW} , repräsentiert die Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Versetzungen des erzeugten Versetzungspaars.

Der Verlauf dieser Kraft ist vom Abstand zwischen den beiden Versetzungen abhängig und könnte durch die Simulation von Gittern mit der gleichen Flusslinienzahl,

aber einer anderen Positionierung der Versetzungen, ermittelt werden. Diese Simulation wird jedoch dadurch erschwert, dass die Versetzungen aufgrund der von uns gewählten periodischen Randbedingungen eine symmetrische Gleichgewichtsposition einnehmen und Gittereffekte (zum Beispiel der Widerstand der Versetzungen gegen Bewegungen zwischen Gleitebenen) ein Ausüben von Kraft entlang der Verbindungslinie der Versetzungen behindern und die “Messung” stark beeinflussen. Wir haben versucht dieses Problem zu lösen, indem wir bei einem gegebenen Gitter den Abstand zwischen den Versetzungen in der $n + 1$ -Region sukzessive verringerten. Dabei veränderte sich zwangsläufig die Flusslinienanzahl. Vergleichen wir die Energie der gestörten Gitter mit ungestörten Gittern gleicher Flusslinienanzahl, sollten wir – nach dem Herausrechnen der anderen Energiebeiträge – eine Abschätzung des Verlaufes der Wechselwirkungsenergie erhalten.

Der letzte Term in (3.49) definiert die Selbstenergie der Versetzung (jene Energiemenge, die aufgebracht werden muss, um im ursprünglich fehlerfreien Gitter eine Versetzung zu erzeugen).

Dieser Energiebeitrag ist naturgemäß vom Abstand zwischen den bereits existierenden Versetzungen unabhängig – da aber ein äußeres Magnetfeld den Gitterabstand a_0 maßgeblich beeinflusst, ist die Selbstenergie möglicherweise von der Magnetfeldstärke abhängig. In diesen Term geht auch die, durch die periodischen Randbedingungen verursachte, geometrische Verzerrung des Gitters ein. Es ist dem Gitter in unserer Situation nämlich nicht möglich, eine nur durch die Versetzungen beeinflusste Konfiguration einzunehmen, da das Gitter auch immer die geometrischen Einschränkungen der periodischen Randbedingungen erfüllen muss.

4 Simulationsprogramm

Das `fsim`-Simulationsprogramm wurde ursprünglich von Prof. *Franz Sauerzopf* geschrieben. Im Zuge der langen Lebensgeschichte des Programmes wurde der Code vielfach erweitert, optimiert und überarbeitet.

Speziell herauszuheben sind dabei die Arbeiten von *Thomas Hausmaninger*, der das `fsim`-Programm im Juni 2010 mittels des `OpenMP`-Frameworks [7] parallelisiert und die verwendeten Besselfunktionen tabellarisiert hat. Viele Berechnungen der vorliegenden Arbeit sind erst dadurch in annehmbarer Zeit möglich geworden [9].

`fsim` geht in seinen Berechnungen davon aus, dass es ein Flusslinienfeld in einem energetisch ungünstigen Zustand vorfindet. Ausgehend von dieser Konfiguration – und unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen – berechnet es die Kräfte auf die einzelnen Flusslinien und verschiebt sie dementsprechend. Im Idealfall wird das simulierte Feld durch Wiederholungen dieser Relaxation in den Grundzustand gelangen.

Um die Stabilität der Relaxationsschritte zu gewährleisten, wird jede Flusslinie mit einer bestimmten Kraft als verankert angenommen. Diese Kraft wird in jedem Relaxationsschritt reduziert, bis sie schließlich vernachlässigbar klein wird. Wir stellen damit sicher, dass die Relaxation geordnet und kontrolliert abläuft. Zusätzlich dazu sorgt unser Vorgehen dafür, dass das System nicht versucht, direkt in den Grundzustand zu springen – was eventuell zu sehr langen Rechenzeiten und unvorhergesehen Problemen führen kann – sondern diesen Prozess in einer stetigen Art und Weise durchläuft.

Dennoch mussten einige zusätzliche Anpassungen vorgenommen werden um “Endlosläufen” des Programmes, speziell bei vorhandenen Versetzungen, vorzubeugen.

Prof. *Sauerzopf* erstellte ebenfalls ein auf dem VTK-Toolkit [5] basierendes Tool – `movmnt` –, das die simulierten Flussliniengitter und ihre Eigenschaften visualisiert. Das Programm ermöglicht es uns, Bewegungsrichtung und -betrag der Flusslinien, ebenso wie die Energie- bzw. B-Feldverteilung intuitiv darzustellen und zu erfassen. Alle Abbildungen in dieser Arbeit, die die simulierten Gitter darstellen wurden, soweit nicht anders angemerkt, mittels des `movmnt`-Programmes erstellt.

`fsim` speichert die Daten der einzelnen Berechnungsschritte, je nach Einstellung, in einem reinen Binärformat oder einem menschenlesbaren Textformat.

Beide Speicherformate ermöglichen ein späteres Weiterrechnen ausgehend von einer bestimmten Konfiguration. Diese Funktionalität ist nicht nur bei der Fehlersuche extrem hilfreich, sie ermöglicht uns auch, äußere Parameter anzupassen ohne redundante Schritte der Berechnung wiederholt durchführen zu müssen.

Im weiteren Verlauf des Kapitels wird zuerst der allgemeine Aufbau des Programmes beschrieben, bevor dann auf die Implementierung der zugrundeliegenden Physik und auf die vom Autor an den Berechnungsroutinen vorgenommenen Veränderungen eingegangen wird. Abschließend folgt noch eine kurze Abschätzung der erzielten Rechengenauigkeit der durchgeführten Simulationen.

4.1 Genereller Aufbau

Kern des Programmes bildet die `vortex_field`-Klasse, die der Abbildung aller Eigenschaften eines 2D-Flusslinienfeldes dient. Der Benutzer hat dabei große Freiheit, sowohl die geometrischen Parameter des Feldes (wie z.B. Flusslinienanordnung, abgebildete Feldgröße, Anzahl und Position verankerter Flusslinien) zu verändern, als auch äußere Größen (hauptsächlich die Charakteristik des erzeugenden B-Feldes) anzupassen.

`vortex_field` stellt den von ihr abgeleiteten Objekten eine Reihe an `public`-Methoden zu Verfügung. Diese Methoden erlauben zum einen das Speichern und Laden einer momentanen Feldkonfiguration und zum anderen die Manipulation des Feldes sowie – wahrscheinlich am wichtigsten – den Start und die Durchführung der Relaxation mittels `relax` und `relax_step`. Für eine genauere Auflistung eines Großteils der Methoden sei auf [9] verwiesen.

Das Programm stellt – abhängig von den Ausmaßen des simulierten Feldes und der Komplexität der Randbedingungen – teils erhebliche Anforderungen an die verwendete Computerhardware. So liegt alleine die Größe des benötigten RAM bei einer Feldgröße im Bereich von 10^4 Flusslinien schon bei mehreren GB. Durch die saubere Implementierung des OpenMP-Frameworks können auch Vielkernsysteme mit hoher Effizienz ausgelastet werden. Dennoch nimmt der Kommunikations- und Scheduling-Overhead mit steigender Anzahl der Rechenkerne überproportional zu, so dass ab 6-8 verwendenden CPU-Kernen keine signifikanten Performancesteigerungen mehr zu erzielen waren.

Alle Berechnungen dieser Arbeit wurden entweder mittels des Phoenix2-Computing-Clusters des ZID der TU Wien [10] oder einer eigens für diesen Zweck am ATI angeschafften Workstation (Intel Core-i7-2600, 3.4 GHz, 16 GB RAM) durchgeführt.

4.2 Einheiten

Durch die Gleichungen (3.29) und (3.30) ergibt sich ein der Problemstellung angepasstes, natürliches Einheitenssystem. Wir verwenden dieses Einheitensystem innerhalb des Programmes, bei Präsentation der Ergebnisse in vorliegender Arbeit rechnen wir in SI-Einheiten um.

Als Längeneinheit verwenden wir einen üblichen YBCO-Wert für die Eindringtiefe λ :

$$[l] = \tilde{\lambda} = 1.4 \cdot 10^{-7} \text{ [m]} \quad (4.1)$$

Wir messen Energieeinheiten in Vielfachen des Vorfaktors aus (3.29):

$$[E] = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\tilde{\lambda}^2\mu_0} \quad (4.2)$$

Betrachten wir die Kraft pro Längeneinheit, die auf eine gegebene Flusslinie wirkt und dividieren wir diesen Wert durch den Vorfaktor in (3.30), erhalten wir die verwendete Krafteinheit, die gleichzeitig auch den Startwert der angenommenen, allgemeinen Haltekraft auf jede Flusslinie darstellt:

$$[F] = \frac{J_{Cmax} \cdot 2\pi\tilde{\lambda}^3\mu_0}{\Phi_0} = \frac{(2\pi\tilde{\lambda})^2 \cdot 2\tilde{\lambda} \cdot 10^{-7}}{\Phi_0} \quad (4.3)$$

mit – einem andern YBCO-Parameter –

$$J_{Cmax} = 2 \cdot 10^{11} \left[\frac{\text{A}}{\text{m}^2} \right] \quad (4.4)$$

Vorteilhaft an dieser Wahl ist, dass sich die Berechnung der Wechselwirkungskraft auf eine Berechnung der modifizierten Bessel-Funktion, beziehungsweise dem Nachschlagen des benötigten Wertes in der erstellten Wertetabelle, reduziert.

4.3 Die relax_step-Methode

`relax_step` stellt fast die gesamte “Intelligenz” des Programmes dar. Die Methode berechnet für eine gegebene Flusslinienkonfiguration die Kräfte auf jede einzelne Flusslinie. Um der aufwändigen Berechnung der Besselfunktion K_1 in (3.30) zu entgehen, führen wir die Berechnung der Kraft auf eine Energieberechnung zurück.

Dazu bewegen wir jede Flusslinie nacheinander um ein – natürlicherweise kleines – Δx respektive Δy aus ihrer Ursprungsposition und berechnen so für die fünf Positionen (“oben”, “links”, “rechts”, “Mitte”, “unten”) den Energiewert des gesamten Gitters. Aus den jeweils drei horizontalen und vertikalen Werten ergibt sich dann eine Energieparabel in x- und y-Richtung.

Hierbei ist es sehr wichtig nochmals anzumerken, dass das Programm jede Flusslinie mit einer – über einen Berechnungsschritt konstanten – kollektiven Haltekraft als verankert ansieht. Die Flusslinien bewegen sich also nur dann, wenn die auf sie ausgeübte Kraft größer als die Haltekraft ist.

Aus der Ableitung der Energieparabeln ergibt sich dann die Kraft auf die Flusslinie in x- und y-Richtung.

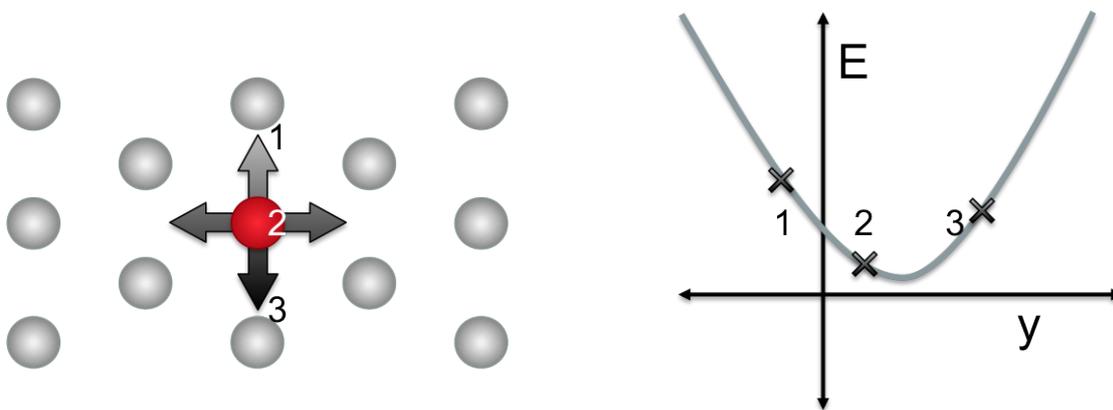


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Energieberechnung im `relax_step`-Ablauf.

Wenn diese Werte für alle Flusslinien vorliegen, werden die Flusslinien proportional zur Stärke der Kraft entlang der Wirkungsrichtung verschoben. Das Programm überprüft anschließend, ob eine Verschiebung um einen kleineren Betrag eine größere Energieeinsparung brächte und trägt dann gegebenenfalls diese in das Gitter ein. Der Vorgang des Kräfte-Berechnens und anschließenden Verschiebens wird solange durchgeführt, bis die Kraft auf jede Flusslinie unter die gerade herrschende, kollektive Haltekraft gefallen ist. Ist dies der Fall – für Ausnahmen siehe den Abschnitt 4.6 – wird die kollektive Haltekraft um 5% reduziert und die Berechnung startet von neuem.

Wir bezeichnen eine Relaxation als abgeschlossen, wenn die Haltekraft 300-mal reduziert wurde; also nur noch ungefähr das $2 \cdot 10^{-7}$ -fache ihres Ausgangswertes beträgt. Das System verhält sich dann in jeder Hinsicht so, als würde keine Verankerungskraft mehr existieren. Zusätzlich haben wir dadurch sichergestellt, dass sich das Flussliniengitter in einem Gleichgewichtszustand befindet, da die Kräfte auf die einzelnen Flusslinien ebenfalls in derselben Größenordnung wie die Gesamthaltekraft liegen.

4.4 Der $n - n + 1 - n$ -Konstruktor

Um kontrolliert Versetzungen im Flusslinienfeld zu erzeugen, ist es nötig, dass sich zwei Bereiche, die sich um genau eine "Ebene" an Flusslinien voneinander unterscheiden, berühren. Durch die Symmetrie, die unserem System durch die periodischen Randbedingungen auferlegt wird, entstehen zwingend zwei Grenzflächen zwischen den Regionen unterschiedlicher Flussliniendichte und somit auch zwei symmetrisch angeordnete Versetzungen.

Prinzipiell ist das Größenverhältnis der zwei Flusslinienbereiche beliebig wählbar, doch haben vom Autor in einer Projektarbeit durchgeführte Simulationen gezeigt, dass bei stark asymmetrischen Größen der Bereiche die Stabilität der Simulation nicht mehr gewährleistet ist [8]. Wir haben uns daher dazu entschlossen, die Bereiche mit anfänglich gleicher Größe anzulegen. Das hat noch dazu den Vorteil, dass eine visuelle Darstellung und Interpretation der Ergebnisse erleichtert wird.

Für die Details der Implementierung des $n-n+1-n$ -Konstruktors sei auf [8] verwiesen. Die unten stehende Graphik ist ebenfalls aus [8] entnommen und zeigt zum besseren Verständnis den prinzipiellen Aufbau eines der simulierten Flusslinienfelder:

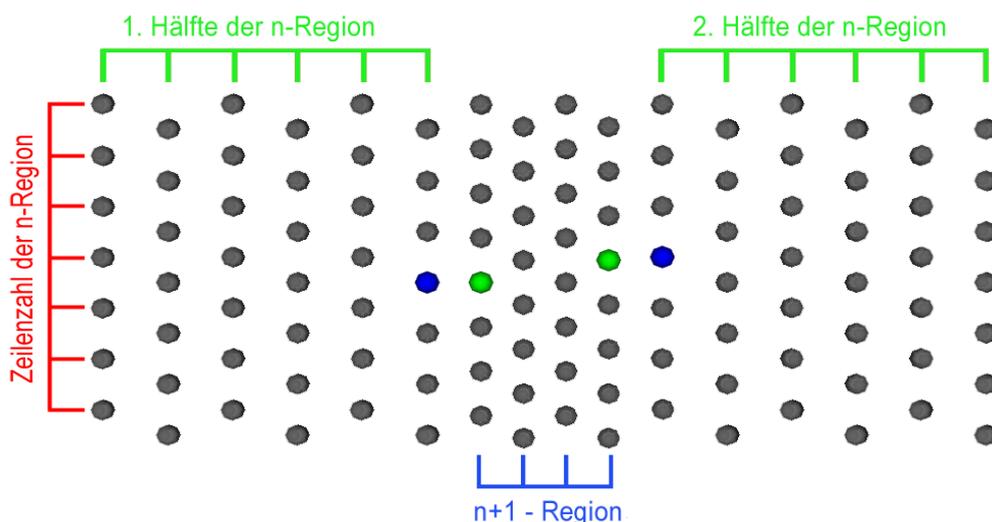


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung eines Flusslinienfeldes.

Quelle: [8], Abb. 4.1

Sobald ein System charakterisiert werden muss, erfolgt das durch die Angabe der Gesamtzahl an Flusslinien und der Anzahl an Zeilen / Spalten im n - resp. $n + 1$ -System im Format

Anzahl-FL - (Spalten im n -Gitter ; Zeilen im n -Gitter ; Spalten im $n + 1$ -Gitter).

4.5 Exemplarische Relaxation

Folgende Bilder zeigen exemplarisch den Verlauf einer Relaxation ohne die Einwirkung externer Kräfte an einem 5656-(56;50;56)-Feld. Die Farbe codiert von rot (niedrig) bis blau (hoch) die relativen Werte des lokalen B-Felds, das der lokalen Flussliniendichte entspricht.

Man muss hier – und für alle weiteren Darstellungen der Flusslinienfelder – besonders beachten, dass die Farbkodierung immer relative Werte (zwischen Maximum und Minimum des jeweiligen Schrittes) kodiert und wir daher die mittlere Energiedifferenz in Programmeinheiten zu jedem Abbild angeben. Dadurch wird dann deutlich, dass im 250. Relaxationsschritt der B-Feldgradient tatsächlich durch die Versetzungen bestimmt wird.

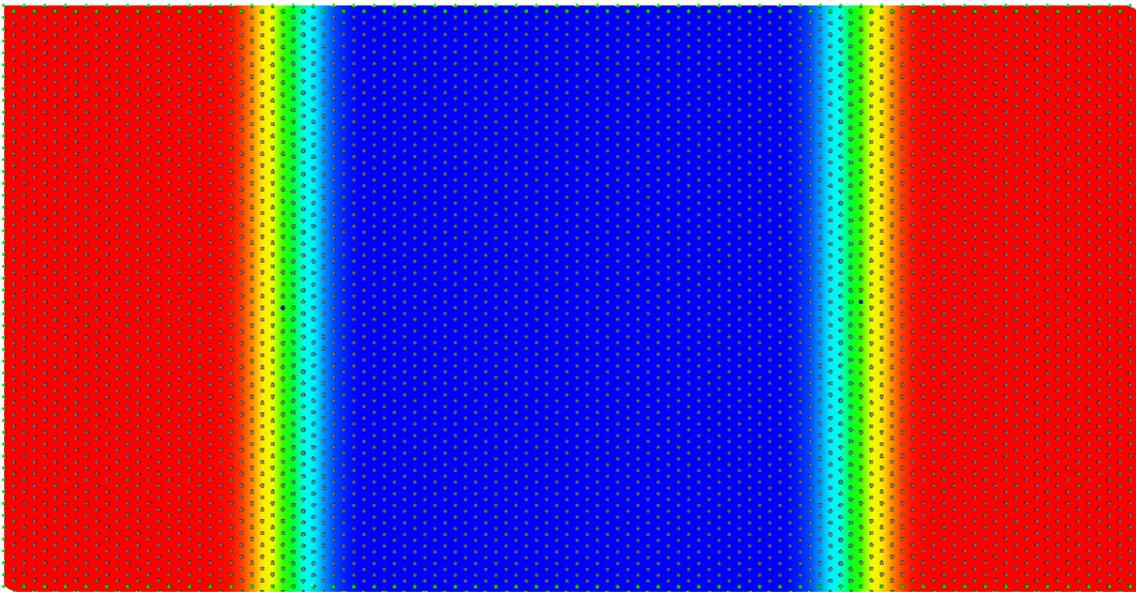


Abbildung 4.3: Erster Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 20$)

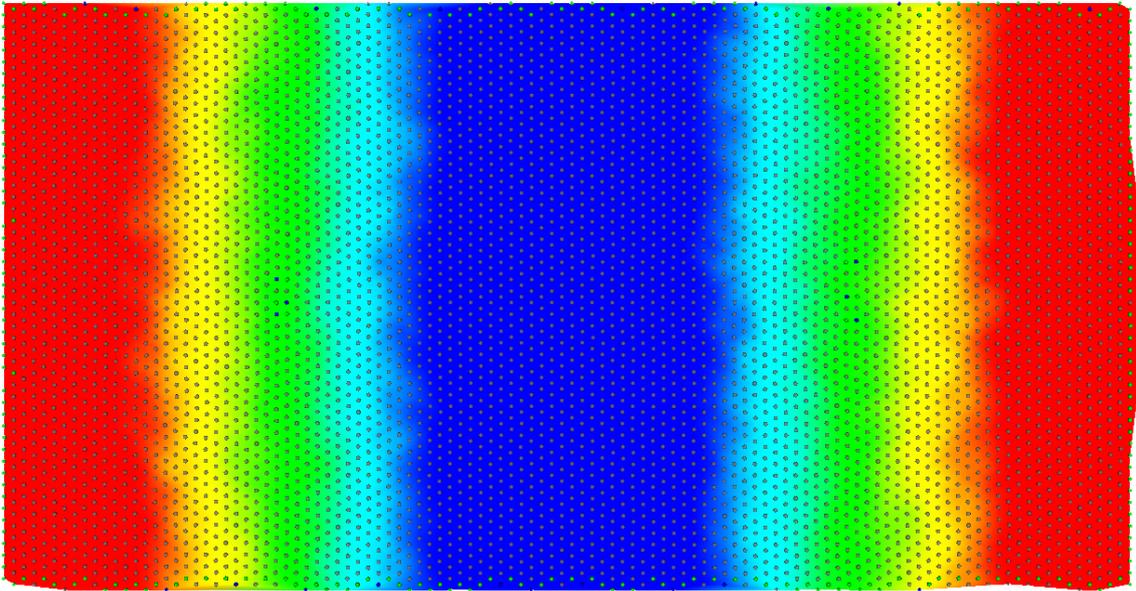


Abbildung 4.4: 50. Relaxationsschritt ($\Delta \bar{E} = 1.2$)

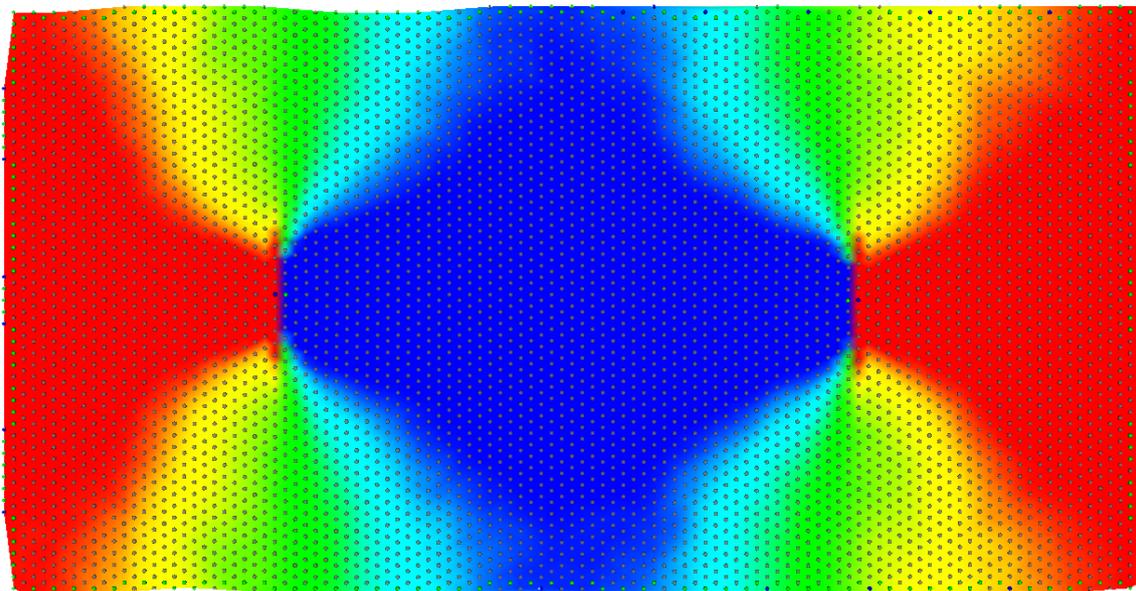


Abbildung 4.5: 150. Relaxationsschritt ($\Delta \bar{E} = 0.02$)

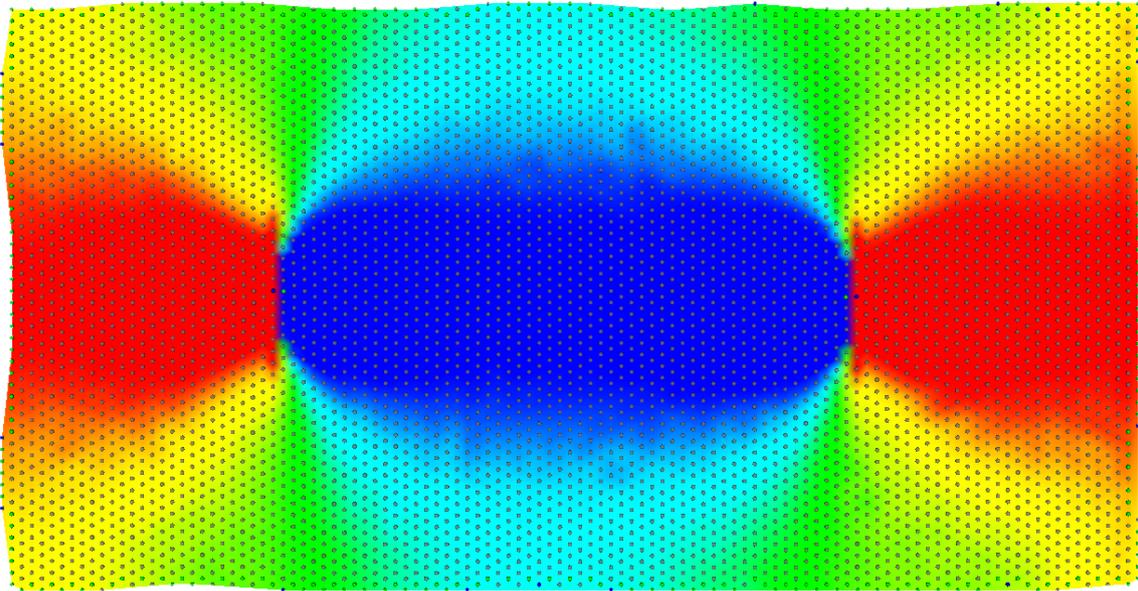


Abbildung 4.6: 250. Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 0.01$)

4.6 Fehlerbehandlung

Bedingt durch die lange Lebensdauer des Programmes und die Anzahl an Personen, die ihren Beitrag zum Quellcode geliefert haben, ist der Source-Code immer unübersichtlicher geworden. Viele Funktionen wurden nur teilweise implementiert; sei es weil sie nur zu Testzwecken benötigt, oder aber später andere Problemlösungswege verfolgt wurden. Auch sind die gewählten Namenskonventionen der Variablen von Autor zu Autor verschieden und leider mit unterschiedlicher Qualität im Code durch Kommentare erläutert. Dazu wurde, durch die Unterstützung des OpenMP-Frameworks, das Programm zwar deutlich schneller, aber der Programmablauf im Quellcode nicht unbedingt verständlicher.

Da sowohl *David Seppi* als auch der Autor Änderungen am Programm vornehmen mussten, stand am Anfang unserer Arbeit also ein gründliches, gemeinsames “Scannen” und Bereinigen des Quellcodes. Während dieses Vorgangs wurden einige nicht mehr verwendete Methoden entfernt, die Kommentare an vielen Stellen verbessert und überarbeitet und auch einige mögliche Fehlerquellen behoben.

Den größten Nutzen dieser Detailarbeit stellte aber nicht die gesteigerte Übersichtlichkeit des Quellcodes dar. Der Vorteil bestand vor allem in der eingehenden Beschäftigung mit den inneren Mechanismen und Abläufen des Programmes.

Sobald nämlich Feldgrößen in der Dimension von 10^4 Flusslinien mit einem eingefügten Versetzungspaar relaxiert wurden, traten spontan und undeterministisch Endlosläufe im Programm auf. Das Programm konnte einfach einen Relaxationsschritt nicht beenden – starteten wir aber die Simulation von einem kurz zuvor gespeicherten Stand aus neu, durchlief das Programm den “Problemschritt” anstandslos. Genauso trat der Fehler beim mehrmaligen Durchführen derselben Simulation manchmal gar nicht und manchmal an unterschiedlicher Stelle auf.

Erster Schritt zur Problemlösung war ein genaues Studium der log-Dateien der Endlosläufe. Wir stellten fest, dass es immer dazu kam, dass eine einzelne Flusslinie nicht in ihr Energieminimum verschoben werden konnte und daher das Programm immer und immer wieder versuchte, diese Flusslinie zu bewegen.

Ließen wir dieselbe Simulation testweise auf unterschiedlichen Rechnern (teils Einkern- teils Mehrkernsysteme; sowohl Intel- als auch AMD-CPU) laufen, trat dieser Fehler manchmal gar nicht und manchmal sehr häufig auf.

Das lieferte uns – gemeinsam mit der Nichtreproduzierbarkeit – einen ersten Hinweis dahin, dass das Programmverhalten möglicherweise nicht algorithmisch bestimmt war, sondern seinen Ursprung vielmehr in der Akkumulation von “Rundungsfehlern” durch die hohe, aber dennoch beschränkte Rechengenauigkeit lag.

Mit diesem Gedanken im Hinterkopf warteten wir auf einen weiteren Endlosschritt des Programmes und hängten uns mittels `gdb` an den Ablauf an. Wir zwangen das Programm, den aktuellen Berechnungsschritt zu beenden und den nächsten Relaxationsschritt zu starten. Interessanterweise lief die Simulation ab diesem Zeitpunkt reibungslos ab und lieferte ein sinnvolles Endergebnis, das mit anderen Simulationsläufen konsistent war. Die ursprüngliche Entscheidung, die Simulation in mehreren, diskreten Schritten ablaufen zu lassen erweist sich hier als vorteilhaft.

Da es uns als nicht mit vertretbarem Aufwand möglich erschien, die Genauigkeit des Programmes signifikant zu verbessern, entschlossen wir uns zu einer “quick&dirty”-Lösung: Wir speichern in jedem Berechnungsschritt die Anzahl und den Indizes der bewegten Flusslinien und bestimmen, ob sich zum vorherigen Schritt eine Änderung ergab. Jedes Mal, wenn dieselben Flusslinien – selbe Indizes, selbe Anzahl – bewegt wurden, wird ein Counter hochgezählt. Ändert sich, welche oder wie viele Flusslinien sich bewegen, wird der Zähler zurück auf Null gesetzt.

Erreicht der Zähler einmal den Wert “100”, sieht das Programm den Berechnungsschritt als beendet an und springt in die nächste Iteration – mit, wie in 4.3 erwähnt, verringerter “Gesamthaltekraft”.

Durch dieses Vorgehen haben wir es mit minimalen Aufwand erreicht, Endlosläufen des Programmes effektiv vorzubeugen – und durch die vergleichsweise hohe Wahl des Counter-Grenzwertes stellten wir sicher, dass das Programm tatsächlich nur in einer Endlosschleife, und nicht etwa in einem langen Unterschnitt, abbricht. Trotzdem bleibt natürlich ein gewisser Rest an Zweifel, weshalb wir sowohl die vom “bad hack” beeinflussten Resultate einer genauen Prüfung unterzogen, als auch Wege in Betracht ziehen, wie wir in zukünftigen Arbeiten den Endlosläufen eleganter vorbeugen können.

4.7 Externe Kräfte

Eine wesentliche Aufgabe dieser Arbeit war es, auf die Versetzungen im Gitter gezielt Kräfte entlang ihrer Gleitebenen ausüben zu können. Damit dieser Vorgang physikalisch korrekt abläuft, müssen die durch die Versetzungen “begrenzten” Gebiete des Gitters gegeneinander verschert werden. Diese Verscherung hat dann zur Folge, dass die Versetzungen – abhängig von ihrer Orientierung zur relativen Bewegungsrichtung der Scherung – die Gleitebene in die positive oder negative Richtung entlangzuwandern beginnen. Um besagte Verscherung des Gitters zu erreichen, müssen wir also auf jede einzelne Flusslinie dieselbe Kraft in die positive beziehungsweise negative y -Richtung ausüben.

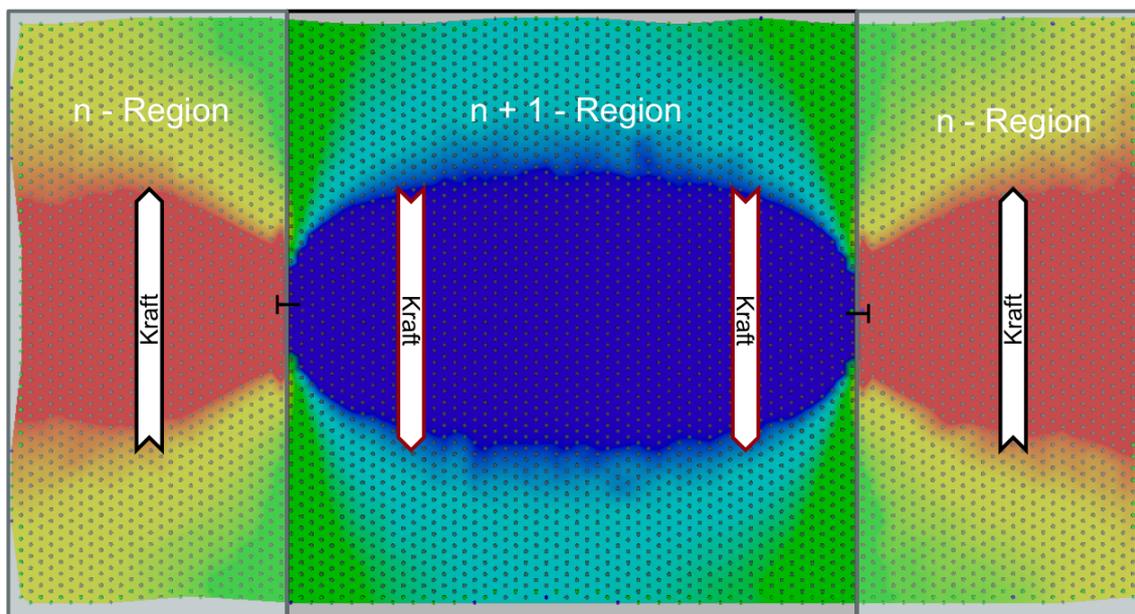


Abbildung 4.7: Schematische Darstellung der Verscherung des Flusslinienfeldes

Durch die Kombination von periodischen Randbedingungen und der Art und Weise, wie unser Programm Kräfte über den Energiegradienten “indirekt” berechnet, war es uns jetzt nicht einfach möglich, der Energieparabel ein lineares Potential (= konstante Kraft) zu superponieren.

Hätten wir das getan, hätten wir zwangsläufig durch die periodischen Randbedingungen an der “oberen” und “unteren” Nahtstelle (Punkte A und B in Abb. 4.8) des Gitters einen unendlichen Kraftgradienten erzeugt. Schon ein einziger, kurzer Simulationslauf hat unsere Befürchtungen dahingehend bestätigt. Das System zeigte ein höchst unphysikalisches Verhalten, indem sich die einzelnen Flusslinien an der Nahtstelle regelrecht “stauten”.

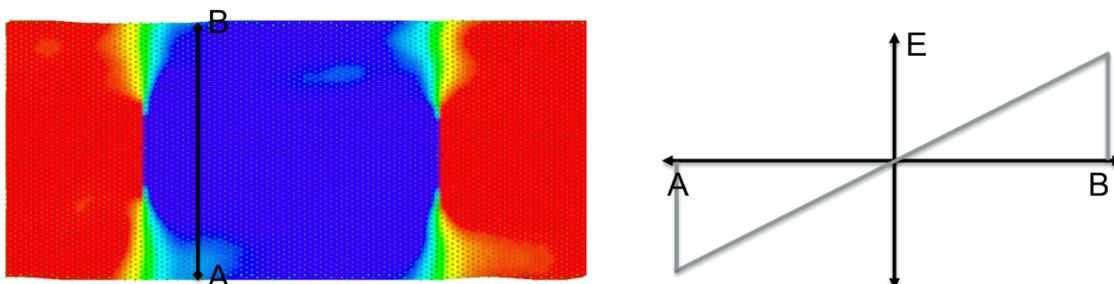


Abbildung 4.8: Schematische Darstellung des unstetigen Verhaltens des linearen Potentials

Damit wir dennoch Kräfte auf die Flusslinien ausüben konnten, entschlossen wir uns, die Energieparabeln direkt nach ihrer Berechnung aus den Stützwerten im Quellcode in die positive oder negative y -Richtung zu verschieben. Dadurch erzielen wir dieselben Effekte, die uns auch ein lineares Potential verursacht hätte; umgehen aber die Unstetigkeit an den Nahtstellen des Gitters. Damit die Kraft während des Programmablaufes einfach beeinflussbar bleibt, haben wir öffentliche Methoden integriert, die die Kraft in y -Richtung (und gegebenenfalls auch in x -Richtung, wobei diese in unseren Simulationen immer $= 0$ war) verändern können.

Während der Simulationsläufe ließen wir nun die Scherkraft zuerst exponentiell ansteigen, bis eine Versetzungsbewegung eintrat. Da diese Werte aber durch die Natur der Exponentialfunktion vergleichsweise ungenau waren, berechneten wir den “Kraftanstieg” vom vorhergegangenen Exponentialschritt aus neu - nur diesmal mit einem linearen Anstieg und einer Genauigkeit von $5 \cdot 10^{-4}$ unserer Kräfteinheiten (siehe Abschnitt 4.2).

An dieser Stelle kam uns unser oben eingeführter “bad hack” wieder zugute: Sobald eine Versetzung sich zu bewegen beginnt, stoppt diese Bewegung in der Regel nicht mehr. Unser Programm würde also nicht mehr abbrechen – glücklicherweise fängt aber die Abbruchbedingung im “bad hack” diese Fälle größtenteils auf; wir mussten nur wenige Simulationsläufe manuell beenden.

4.8 Numerische Genauigkeit

Um unsere Ergebnisse in Bezug auf ihre Validität beurteilen zu können, ist es von großer Bedeutung, dass wir eine Vorstellung der numerischen Genauigkeit unserer Simulation erhalten. Im Folgenden gehen wir daher auf die Fehlerquellen in der Kraft- und Energieberechnung ein und leiten daraus Abschätzungen für die statistischen Fehler unserer Simulation ab.

Betrachten wir zuerst die Kraftberechnung. Wie wir nochmals in Kap. 5.2.1 erwähnen werden, legten wir an die zu simulierenden Felder zuerst eine exponentiell wachsende Kraft an und steigerten diese so lange, bis wir eine Bewegung der Versetzung bemerkten. Dann gingen wir mit dem Kraftwert auf den letzten Wert zurück, der keine Bewegung auslöste und starteten von dort aus einen Simulationslauf mit linear ansteigender Kraft.

Sollten wir einen falschen Startwert wählen, so wären die Auswirkungen gering: entweder der Startwert ist zu gering gewählt, dann läuft die Simulation im linearen Teil dementsprechend länger, oder der Startwert ist zu hoch gewählt; dann würden wir eine sofortige Versetzungsbewegung bemerken und den Startwert dementsprechend verringern. Dieses Verhalten ist aber nicht aufgetreten.

Viel wichtiger ist jedoch das lineare Verhalten. Da wir die Kraft nicht kontinuierlich erhöhen können, sondern den Wert immer um eine fixes Inkrement steigern, beschränkt sich unsere Genauigkeit folglich auf dieses Inkrement - entweder wir sehen die Bewegung einen Schritt zu spät oder zu früh. Da unser Inkrement $5 \cdot 10^{-6}$ `kforce` betrug, erhalten wir nach Umrechnung in SI-Einheiten (s. Kap. 5.1) für den Kraftfehler Δf :

$$\Delta f = \pm 5.2 \cdot 10^{-10} \left[\frac{\text{N}}{\text{m}} \right] \quad (4.5)$$

Damit wir nicht den Eindruck einer überhöhten Präzision erwecken, muss hier nochmals erwähnt sein, dass obiger Fehler – und auch die nachfolgende Betrachtung – bloß eine Abschätzung der numerischen Auflösung unserer Arbeit ausgehend von bekannten Größen ist. Wir sind überzeugt davon, dass *finite-size*-Effekte eine nicht zu unterschätzende Auswirkung auf die Simulationseffekte haben.

Betrachten wir im Folgenden den Prozess der Energieberechnung in `fsim`: Der Aufruf der Methode `getE()` startet einen zweistufigen Prozess: Zuerst berechnet `fsim` die Wechselwirkungsenergie zwischen einer Flusslinie und allen $N - 1$ verbleibenden. Diese Berechnung findet in der Methode `CalcWdirect`, welche zuerst den quadrierten Abstand zwischen den beiden fraglichen Flusslinien berechnet und zu diesem dann den entsprechenden Wert der tabellierten Besselfunktion nachschlägt.

Gehen wir von einer, konservativ geschätzten, numerischen Genauigkeit von 10^{-14} (eig. $52 \log(2) \approx 15.65 \dots$ Stellen) aus, ergibt sich für den absoluten Fehler von r^2 ein Wert von $\pm 1.5 \cdot 10^{-13}$. Vergleichen wir das mit der Genauigkeit der Tabellierung (für eine detaillierte Betrachtung siehe [9]) von $3 \cdot 10^{-9}$, sehen wir, dass die Auflösung der Tabellierung deutlich größeren Einfluss auf die Ergebnisse als die numerische Genauigkeit hat.

Die so erhaltenen Energiewerte für die einzelnen Flusslinien summieren wir dann, um die Gesamtenergie des Feldes zu erhalten – wir müssen nur noch einen Faktor N dividieren um den Mehrfachzählungen Rechnung zu tragen. Gehen wir davon aus, dass die auftretenden Fehler innerhalb der Energieberechnung statistisch verteilt sind, können wir davon ausgehen, dass diese Summation die Genauigkeit der Simulation schlimmstenfalls um einen Faktor \sqrt{N} verschlechtert. Für diese Abschätzung nehmen wir $N = 10^4$ an und erhalten somit daher $3 \cdot 10^{-7}$ als Abschätzung unseres mittleren absoluten Energiefehlers. Nachdem wir diesen Betrag wiederum in SI-Einheiten umrechnen, ergibt sich für uns:

$$\Delta E = \pm 8.3 \cdot 10^{-18} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}} \right] \quad (4.6)$$

In weiterer Folge berechnet `fsim` die neue Position der Flusslinien mittels einer quadratisch genäherten Energieparabel (siehe 4.3). Um hier eine sinnvolle Aussage treffen zu können, betrachten wir die beiden Grenzfälle der Flusslinienposition:

Erstens kann sich die Flusslinie in einem energetisch sehr ungünstigen Zustand befinden, dann ist $E(x - \delta x) \gg E(x + \delta x)$ oder $E(x - \delta x) \ll E(x + \delta x)$.

Zweitens besteht die Möglichkeit, dass sich die Flusslinie schon nahe dem lokalen Energieminimum aufhält; in diesem Fall ist $E(x - \delta x) \approx E(x + \delta x)$. Dieser Fall ist insbesondere von Bedeutung, da er den Endzustand unserer Berechnungen widerspiegelt.

Für beide Fälle führen wir im Folgenden eine Fehlerabschätzung mit typischen Werten durch.

Allgemein gilt für unsere quadratische Näherung, dass wir das Minimum der Energieparabel aus

$$2a \cdot x_{min} + b = 0 \quad (4.7)$$

mit

$$a = \frac{E(x - \delta x) + E(x + \delta x)}{2(\delta x)^2} \quad (4.8)$$

und

$$b = \frac{E(x - \delta x) - E(x + \delta x)}{2(\delta x)} \quad (4.9)$$

wobei $\delta x = 0.05 \cdot \tilde{\lambda}$ die von uns gewählte Verschiebung der Flusslinie entlang der x -Achse ist. Obige Ausführungen gelten in gleicher Art und Weise für $y + \delta y$.

Im ersten Fall ergeben sich, unter der Annahme, dass $E(x - \delta x) = 600$ und wir daher $E(x + \delta x)$ vernachlässigen können, folgende Werte für a , b , x_{min} und ihre jeweiligen absoluten und relativen Fehler:

$$\begin{array}{lll} a = & 1.2 \cdot 10^5 & b = & 15 & x_{min} = & 6.3 \cdot 10^{-5} \\ \Delta a = & 6.0 \cdot 10^{-5} & \Delta b = & 7.5 \cdot 10^{-9} & \Delta x_{min} = & 6.3 \cdot 10^{-14} \\ \frac{\Delta a}{a} = & 5.0 \cdot 10^{-5} & \frac{\Delta b}{b} = & 5.0 \cdot 10^{-10} & \frac{\Delta x_{min}}{x_{min}} = & 1.0 \cdot 10^{-9} \end{array}$$

Für die Betrachtung des zweiten Falles gehen wir ja davon aus, dass die Flusslinie ihrem (lokalen) Minimum schon sehr nahe ist und können daher $E(x - \delta x) - E(x + \delta x) \approx 10^{-4}$ und $E(x - \delta x) + E(x + \delta x) \approx 2 \cdot \bar{E} = 2 \cdot 58$ als Abschätzung verwenden. Damit ergibt sich in analoger Weise zum obigen Fall:

$$\begin{array}{lll}
 a = & 2.3 \cdot 10^4 & b = & 2.5 \cdot 10^{-6} & x_{min} = & 5.4 \cdot 10^{-11} \\
 \Delta a = & 1.2 \cdot 10^{-4} & \Delta b = & 1.5 \cdot 10^{-8} & \Delta x_{min} = & 3.2 \cdot 10^{-13} \\
 \frac{\Delta a}{a} = & 5.2 \cdot 10^{-9} & \frac{\Delta b}{b} = & 6 \cdot 10^{-3} & \frac{\Delta x_{min}}{x_{min}} = & 6 \cdot 10^{-3}
 \end{array}$$

Vergleichen wir die beiden Fälle miteinander sehen wir, dass sich der absolute Fehler in der Positionsbestimmung – der dann im nächsten Rechenschritt über r^2 und folglich $E(r) \approx K_0(r^2)$ wieder in die Berechnung eingeht – in der selben Größenordnung wie die absolute Genauigkeit der zugrundeliegenden Rechenarchitektur liegt. Selbst wenn wir vom *worst case* ausgehen, dass sich der Fehler immer in der ungünstigsten Art und Weise aufsummiert würde erst nach $2 \cdot 10^6$ Iterationen ein Wert erreicht, der der Genauigkeit der Tabellierung der Besselfunktion entspricht.

Wir können diese Tatsache noch mittels einer weiteren Beobachtung verdeutlichen. Bei der Ausgabe eines jeden Simulationsschrittes berechnet unser Programm die Energie des gegebenen Flusslinienfeldes: Dieser Berechnungsschritt liefert uns die Energie jeder einzelnen Flusslinie und wird als Ergebnis protokolliert. Zusätzlich dazu berechnet das Programm im allerletzten Schritt einer Simulation die Gesamtenergie des Feldes. Dabei wird nochmals – mit den selben Flusslinienpositionen (im Rahmen der berechneten Genauigkeit) – die Energie jeder Flusslinie berechnet und aufsummiert. Multipliziert man nun den Energiemittelwert aller einzelnen Flusslinien, und zieht davon die tatsächliche Gesamtenergie ab, sollte sich im Falle beliebiger Genauigkeit Null ergeben.

Tatsächlich war das nicht der Fall und die sich ergebenden Differenzen stehen in guter Übereinstimmung mit unserer Abschätzung des Energiefehlers ($\Delta E \approx 3 \cdot 10^{-7}$ Programmeinheiten) von dem sich die “empirischen” Fehler nur um einen Faktor 3 unterscheiden.

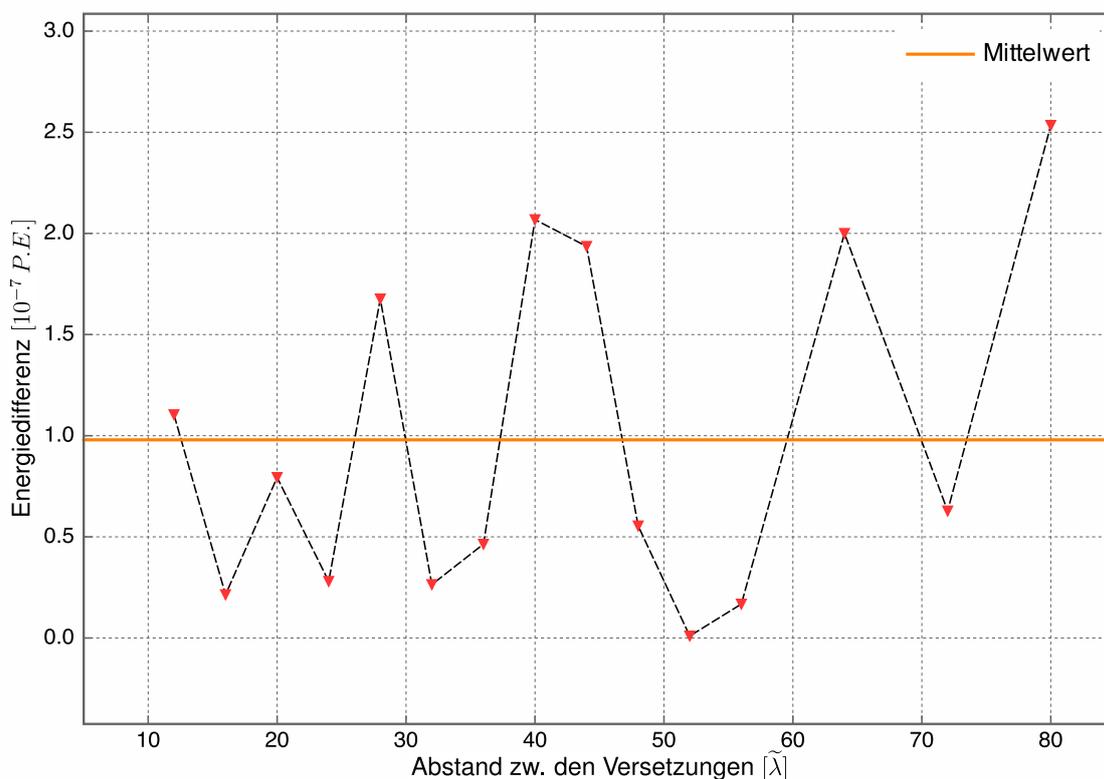


Abbildung 4.9: Betrag der Differenzen zwischen Gesamtenergie und mittlerer Energie mal Flusslinienzahl

5 Simulationsergebnisse

5.1 Umrechnung in SI-Einheiten

Wie bereits an mehreren Stellen erwähnt, rechnet `fsim` in “natürlichen”, das heißt problemangepassten, Einheiten. Alle Simulationsergebnisse mussten daher zuerst in SI-Einheiten überführt werden und die verwendeten Umrechnungsfaktoren sollen hier, der Übersichtlichkeit und Vollständigkeit halber, nochmals tabellarisch angegeben werden.

Ergänzend sind die rechnerisch ermittelten Werte für den feldspezifischen Horizontalabstand zwischen benachbarten Flusslinien $h_0(B)$ aller untersuchten B-Feldstärken angegeben, da speziell Abstände zwischen den Versetzungen in Vielfachen des jeweiligen h_0 gerechnet wurden und eine Umrechnung der *Peierls-Nabarro*-Spannung in eine Kraft pro Längeneinheit ebenfalls das h_0 erfordert.

	Energie [J/m]	Länge [m]	Kraft [N/m]
1 Programmeinheit $\hat{=}$	$2.763028969 \cdot 10^{-11}$	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$1.047751324 \cdot 10^{-4}$
	$= (\Phi_0^2)/(2\pi\tilde{\lambda}^2\mu_0)$	$= \tilde{\lambda}$	$= ((2\pi\tilde{\lambda})^2 \cdot 2\tilde{\lambda} \cdot 10^{-7})/(\Phi_0)$

Tabelle 1: Umrechnungsfaktoren für Kraft, Länge und Energie

Rechnerisch ergibt sich also für die jeweiligen Felder mit

$$h_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a_\Delta = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \left(\frac{4}{3}\right)^{1/4} \left(\frac{\Phi_0}{B}\right)^{1/2} \quad (5.1)$$

ein jeweiliges $h_0(B)$ von:

B-Feld [T]	h_0 [nm]
0.2	94.62549
0.4	66.91032
0.6	54.63205
0.8	47.31274
1.0	42.31780

Tabelle 2: $h_0(B)$ für alle simulierten B-Feldstärken

5.2 Magnetfeldabhängigkeit der Gleitkraft

Um die Frage zu beantworten, ob das *Peierls-Nabarro*-Modell ausreichend ist, um die Versetzungsbewegung auch im supraleitenden Flussliniengitter zu beschreiben, simulierten wir zwei Felder unterschiedlicher Größe bei fünf verschiedenen B-Feldwerten (0.2 T bis 1 T in 0.2 T-Inkrementen). Wir bestimmten dann, wie in Kap. 4.7 erläutert, die benötigte Scherkraft und verglichen die Ergebnisse der beiden Felder miteinander und mit den in 3.8.2 besprochenen Grenzfällen des *Peierls-Nabarro*-Modells.

Wir erwarteten uns, dass

- die Gleitkraft unabhängig von der Feldgröße sein wird,
- die Kraft mit steigendem B-Feld deutlich zunimmt, und
- dass die Kraftwerte grundsätzlich durch das *Peierls-Nabarro*-Modell angenähert werden können und Werte für a_{dis} liefern, die in der Größenordnung der Abmessungen der durch die Versetzungen verzerrten Bereiche liegen.

Aus der begrenzten Genauigkeit der Simulation und den grundlegenden Einschränkungen durch die periodischen Randbedingungen lässt sich auch im besten Fall keine genaue Übereinstimmung zwischen Modell und Theorie erwarten. Wir vergleichen daher die ermittelten Kraftwerte mit ihrer theoretischen oberen und unteren Schranke ($k^2 = 0$ und $k^2 = k_{BZ}^2$) (s. Kap. 3.8.2) und berechnen, welches k_{fit}^2 zu einer Kraft wie der beobachteten führen würde.

5.2.1 Simulationsaufbau

Wie oben erwähnt simulierten wir zwei Felder: Zum einen ein kleineres Feld (zur Erinnerung an 4.4: Anzahl-FL-(Spalten im n-Gitter ; Zeilen im n-Gitter ; Spalten im n + 1-Gitter)) 10152-(72;70;72) und ein deutlich größeres Feld mit 17376-(96;90;96). Da sich mit steigendem B-Feld a_{Δ} verkleinert, verkleinert sich – bei konstanter Flusslinienzahl – auch die betrachtete Feldfläche.

Wir haben diesen Weg gewählt, da bei der Betrachtung einer konstanten, großen Fläche der Rechenaufwand mindestens quadratisch mit B gestiegen wäre. Zusätzlich hätte die geringe Flusslinienzahl in den Niedrig-B-Fällen zu einer überproportional starken Störung durch die periodischen Randbedingungen geführt.

Wir ließen nun beide Felder bei allen betrachteten Feldstärken (gibt $2 \times 5 = 10$ Felder) ohne äußere Krafteinwirkung relaxieren.

Diese Felder verwendeten wir dann als Ausgangskonfiguration für die Verscherung. Um die Felder korrekt verscheren zu können, mussten zuerst in jedem Feld die Positionen der Versetzungen bestimmt werden, sodass die Verscherung tatsächlich in der “Mitte” der jeweiligen Versetzungen stattfand.

Danach wurde dem Feld eine exponentiell steigende Scherkraft aufgezwungen und jener Wert ermittelt, an dem sich die Versetzungen zu bewegen begannen.

Um jetzt einen genaueren Wert zu erhalten, wurde die Simulation nochmals von dem letzten stabilen, beziehungsweise “unbewegten”, Schritt aus gestartet. Der Startwert der Kraft lag daher beim Wert des letzten Exponentialschrittes, der keine Bewegung zur Folge hatte, und stieg dann linear an.

Nachdem dieser Vorgang für alle Flusslinienfelder durchgeführt worden war, folgte eine Auswertung der Ergebnisse und schließlich der Vergleich mit den theoretischen Werten.

5.2.2 Graphische Beispiele der Simulationsabläufe

Zuerst zeigen wir in der schon bekannten B-Feld-Farbdarstellung, dass sich die Versetzungen tatsächlich von einem Schritt auf den anderen zu bewegen beginnen:

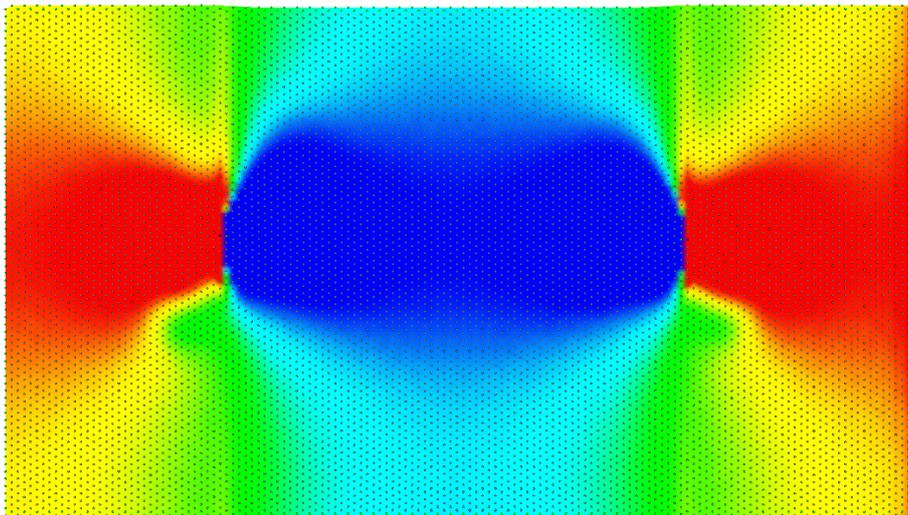


Abbildung 5.1: Schritt 94 im linearen Kraftanstieg des 10152-(72;70;72)-Feldes bei 800mT ($\Delta\bar{E} = 0.09$)

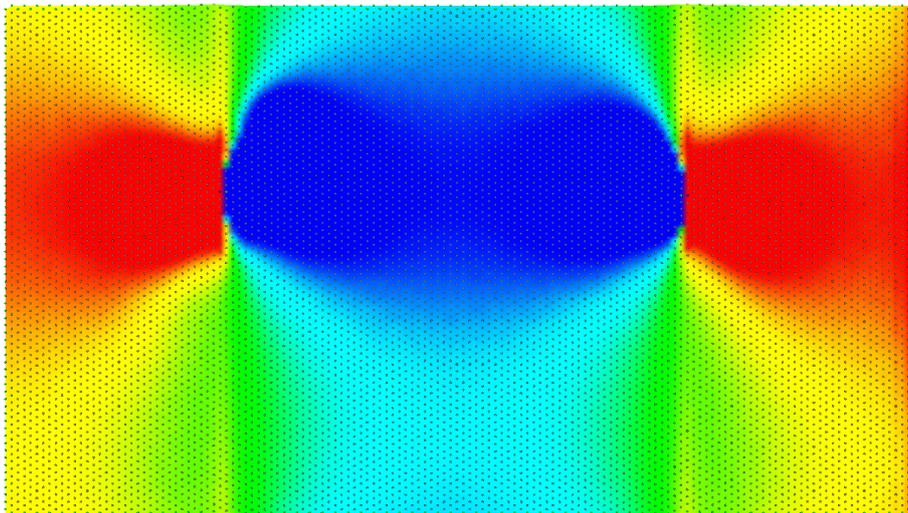


Abbildung 5.2: Schritt 95 im linearen Kraftanstieg des 10152-(72;70;72)-Feldes bei 800mT ($\Delta\bar{E} = 0.09$)

Man sieht hier deutlich, dass sich die Versetzung aus ihrer ursprünglichen Position sprungartig fortbewegt.

Die nächsten Graphiken zeigen uns die Möglichkeit von `movmnt`, Bewegungen im Gitter direkt als Bewegungsvektoren in das Gitter einzuzeichnen. Hierbei entsprechen grüne Vektoren einer starken relativen Verschiebung und gelbe Vektoren symbolisieren eine geringe Bewegung. Zusätzlich sieht man, dass die Versetzungsbewegung mit steigender Schrittzahl nicht mehr aufhört. Das bedeutet insbesondere, dass die folgenden Bilder durch Auslösung des “bad hacks” (Abbruch der Simulation, wenn sich die Anzahl und der Index der bewegten Flusslinien für 100 Schritte nicht ändert) entstanden sind und die Position der Versetzung in den Bildern daher mehr oder weniger zufällig ist. Im Extremfall würden wir eine Bewegung, bei der die Versetzung, nach dem Durchwandern des ganzen Simulationsbereiches, wieder an ihrer Ausgangsposition ankommt also solche gar nicht wahrnehmen, da sich ihre Position relativ zum vorhergehenden Schritt scheinbar nicht verändert hat. Die Wahrscheinlichkeit für dieses Fall ist aber so gering, dass dieses Verhalten in unseren Simulationen nicht vorgekommen ist.

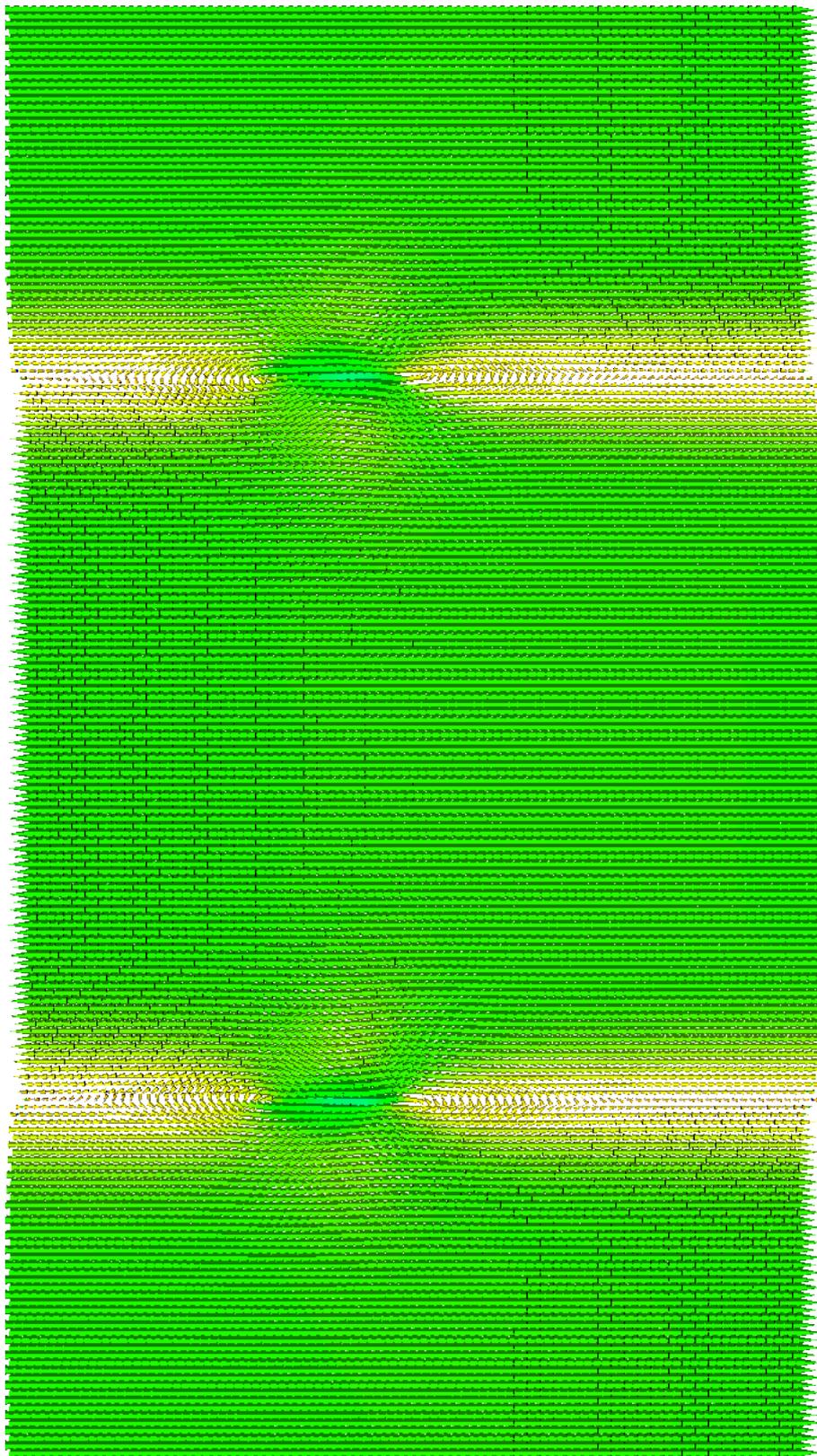


Abbildung 5.3: Schritt 107 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)

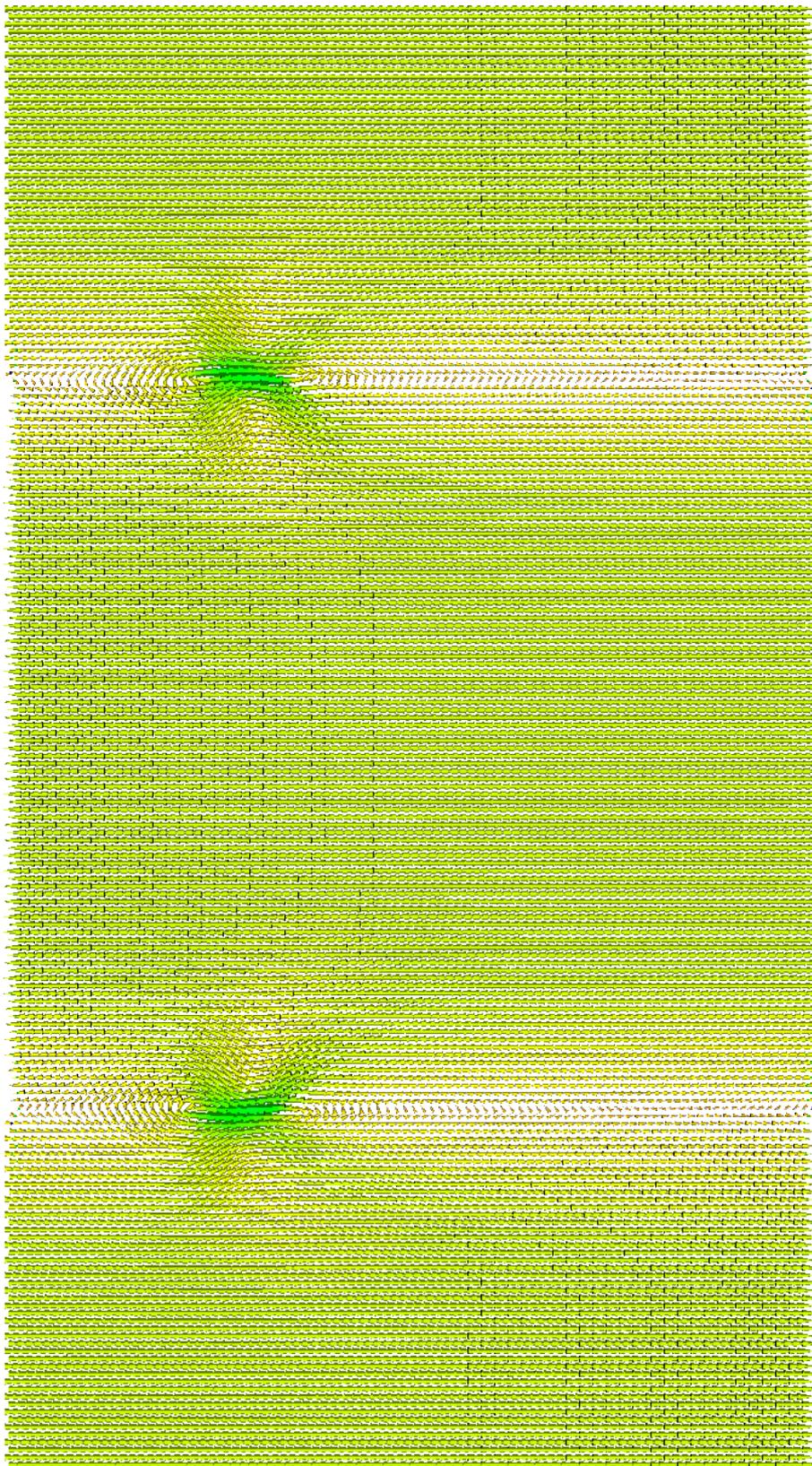


Abbildung 5.4: Schritt 108 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)

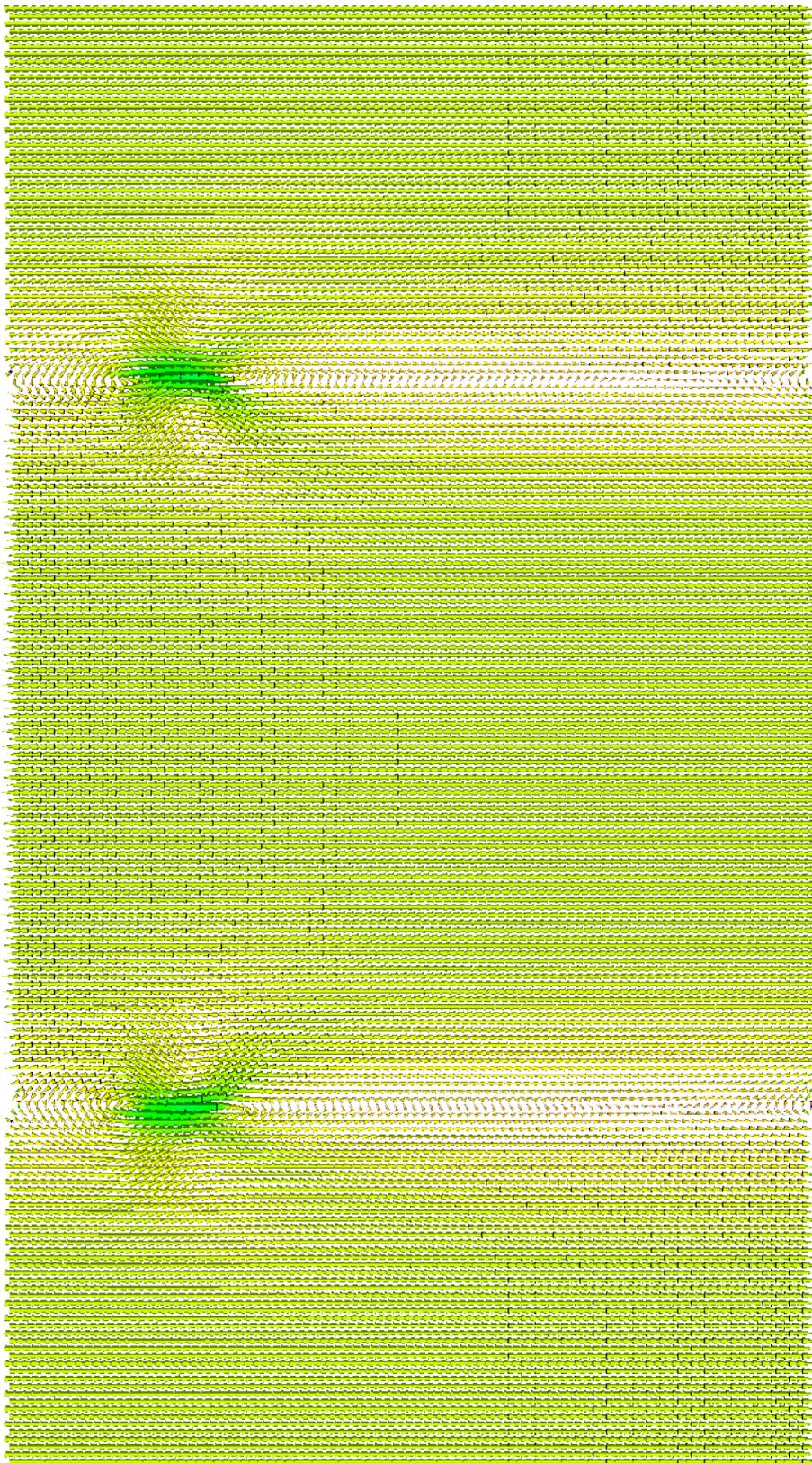


Abbildung 5.5: Schritt 109 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)

5.2.3 Ergebnisse der Scherkkraftrechnungen

Folgende Abbildungen und Tabellen stellen die Resultate der Berechnungen dar. Betrachten wir zuerst die in SI-Einheiten umgerechneten Ergebnisse für beide Felder:

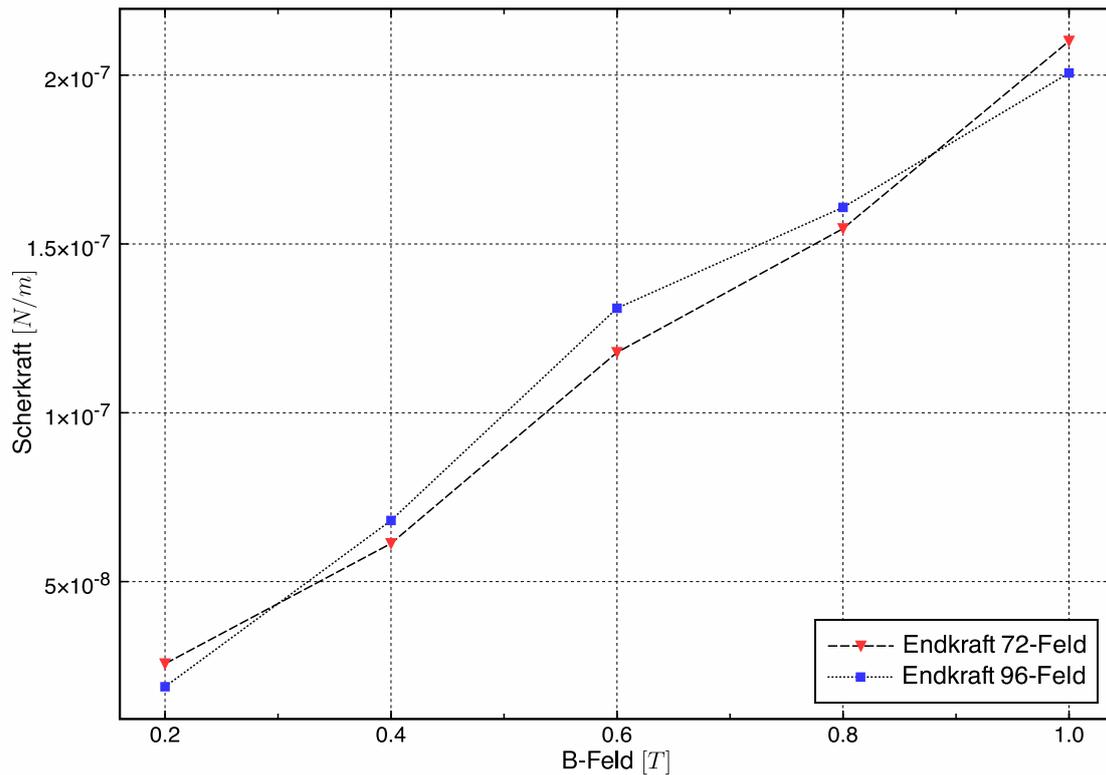


Abbildung 5.6: Magnetfeldabhängigkeit der Gleitkraft im 72- und 96-Gitter

Die genauen Werte für die Kraft pro Längeneinheit ergaben sich wie folgt:

B-Feld [T]	Kraft [N/m] (72;70;72)-Feld	Kraft [N/m] (96;90;96)-Feld
0.2	$2.56699 \cdot 10^{-8}$	$1.88595 \cdot 10^{-8}$
0.4	$6.12935 \cdot 10^{-8}$	$6.81038 \cdot 10^{-8}$
0.6	$1.17872 \cdot 10^{-7}$	$1.30968 \cdot 10^{-7}$
0.8	$1.54543 \cdot 10^{-7}$	$1.60829 \cdot 10^{-7}$
1.0	$2.10074 \cdot 10^{-7}$	$2.00644 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 3: Scherkkraftwerte in den untersuchten Gittern

Es zeigt sich also, dass die Schwellenwerte der Scherkraft nicht, oder nur in einem verschwindend geringen Ausmaß von der Größe des betrachteten Gitters abhängen. Hierbei muss man aber unbedingt beachten, dass aufgrund der periodischen Randbedingungen die Simulationsergebnisse erst ab einer vergleichsweise hohen Anzahl an Flusslinien und der damit verbundenen großen Gitterdimensionen Sinn ergeben. Davor dominieren unseren Beobachtungen nach die Einflüsse durch die Randbedingungen und führen zu überraschendem beziehungsweise unphysikalischem Verhalten.

Wir gehen jedoch davon aus, dass die Ergebnisse ab einer Flusslinienzahl von ungefähr $5 \cdot 10^3$ zumindest die Größenordnung der gesuchten Effekte korrekt wiedergeben. Desweiteren gibt es offenbar eine Abstandsgrenze zwischen den Versetzungen, die diese nicht unterschreiten dürfen, da sonst das Relaxationsverhalten unvorhersehbar wird. Dieses Phänomen wird in Kap. 5.3 einer näheren Betrachtung unterzogen werden.

5.2.4 Vergleich mit theoretischen Vorhersagen

Wie wir in Kapitel 3.8.2 schon dargelegt haben, berechneten wir eine obere und untere Grenze für die gesuchte Scherkraft. Dabei nahmen wir an, dass $c_{66}/c_{11} \ll 1$, was wir hier durch die Angabe der errechneten Werte für c_{11} und c_{66} nachträglich rechtfertigen wollen. Dazu betrachten wir jene k_{fit}^2 -Werte (mit $0 \leq k_{fit}^2 \leq k_{BZ}^2$), die unsere gefundenen Kraftwerte ergeben würden. Aus diesen Werten lassen sich dann unter Verwendung der Beziehungen (3.41) ff. die gesuchten Moduln berechnen.

B [T]	k_{fit}^2	c_{66}	c_{11}	c_{66}/c_{11}
0.2	$1.342195867 \cdot 10^{10}$	$3.340487308 \cdot 10^2$	$3.155988749 \cdot 10^4$	$1.058459828 \cdot 10^{-2}$
0.4	$2.684391589 \cdot 10^{10}$	$6.680974615 \cdot 10^2$	$1.251734611 \cdot 10^5$	$5.337373078 \cdot 10^{-3}$
0.6	$4.027995522 \cdot 10^{10}$	$1.002146192 \cdot 10^3$	$2.792793084 \cdot 10^5$	$3.588329540 \cdot 10^{-3}$
0.8	$5.368988691 \cdot 10^{10}$	$1.336194923 \cdot 10^3$	$4.923769923 \cdot 10^5$	$2.713763933 \cdot 10^{-3}$
1	$6.710955390 \cdot 10^{10}$	$1.670243654 \cdot 10^3$	$7.630036225 \cdot 10^5$	$2.189037646 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 4: c_{11} und c_{66} für $k^2 = k_{fit}^2$

Wir sehen jetzt unsere Annahme bezüglich c_{66}/c_{11} bestätigt und können daher im Verlauf die in Kapitel 3.8.2 dargestellten Beziehungen verwenden.

Ein weiterer Punkt, der an dieser Stelle erwähnenswert ist, ist der, dass das *Peierls-Nabarro*-Modell nur Vorhersagen über die benötigte Scherspannung macht. Wir haben aber auf die Versetzungen eine Scherkraft ausgeübt – daher hatten wir τ_{PN} noch mit dem jeweiligen, feldspezifischen h_0 zu multiplizieren, um auf die gesuchte Kraft pro Längeneinheit zu kommen.

Die Resultate für die obere und untere Schranke stellen sich wie folgt dar:

B-Feld [T]	Näherung $k^2 = 0$ [N/m]	Näherung $k^2 = k_{BZ}^2$ [N/m]
0.2	$2.37433 \cdot 10^{-9}$	$9.68375 \cdot 10^{-8}$
0.4	$3.35781 \cdot 10^{-9}$	$2.69728 \cdot 10^{-7}$
0.6	$4.11246 \cdot 10^{-9}$	$4.88060 \cdot 10^{-7}$
0.8	$4.74867 \cdot 10^{-9}$	$7.40221 \cdot 10^{-7}$
1.0	$5.30917 \cdot 10^{-9}$	$1.01923 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 5: Genäherte Kraftwerte

Ein kurzer Vergleich mit den Werten aus Tab. 3 zeigt uns, dass die simulierten Werte tatsächlich innerhalb des physikalisch plausiblen Bereiches liegen und – da die ermittelten Kraftwerte deutlich weniger von den Werten für $k^2 = k_{BZ}^2$ abweichen als von den ($k^2 = 0$)-Werten – lassen den Schluss zu, dass es sich bei der Versetzungsbewegung um ein lokales Phänomen handelt, welches jedoch einen vergleichsweise großen Bereich eines gegebenen Flussliniengitters betrifft.

Zuerst betrachten wir die simulierten Werte und die Schranken in einem logarithmisch skalierten Diagramm, um sowohl die relative Unabhängigkeit von der Systemgröße, als auch das Einhalten der ‘Grenzwerte’ zu veranschaulichen:

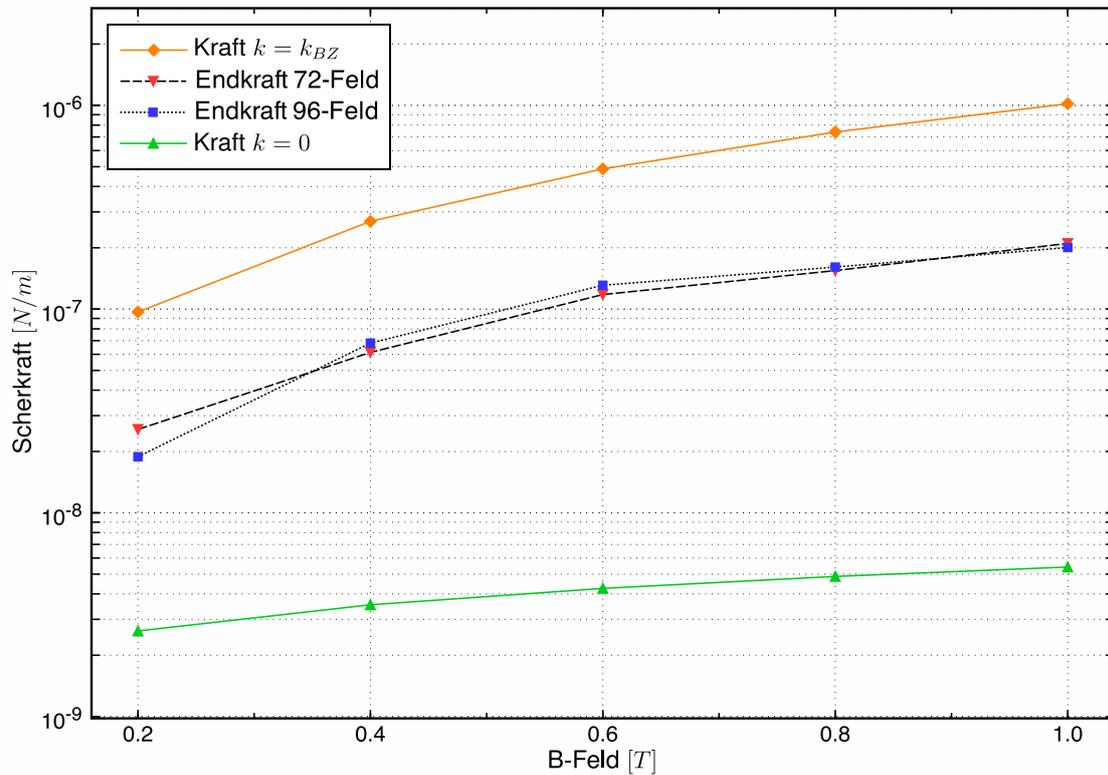


Abbildung 5.7: Darstellung der simulierten Scherkraftwerte und ihrer theoretischen oberen und unteren Schranke

Um eine Abschätzung für die tatsächliche Reichweite der “Auswirkungen” (verursachte Verzerrungen, Kraft auf andere Versetzungen) der Versetzungen zu erhalten, berechneten wir den zu den k_{fit}^2 gehörenden Gitterparameter a_{dis} mittels Gl. (3.48):

B-Feld [T]	a_{dis} [m]	a_{dis}/a_0
0.2	$1.108794709 \cdot 10^{-6}$	10.14784086
0.4	$6.380960844 \cdot 10^{-7}$	8.25892611
0.6	$4.658848103 \cdot 10^{-7}$	7.385190145
0.8	$3.944358245 \cdot 10^{-7}$	7.219861252
1	$3.404061047 \cdot 10^{-7}$	6.966342861

Tabelle 6: Werte von a_{dis}

Damit wir auch einen Eindruck für den quantitativen Verlauf der Scherkraftwerte im Vergleich zum vorhergesagten Kraftverlauf bei $k^2 = k_{BZ}^2$ bekommen, können wir die Werte für $k^2 = k_{BZ}^2$ und $k^2 = k_{fit}^2$ vergleichen.

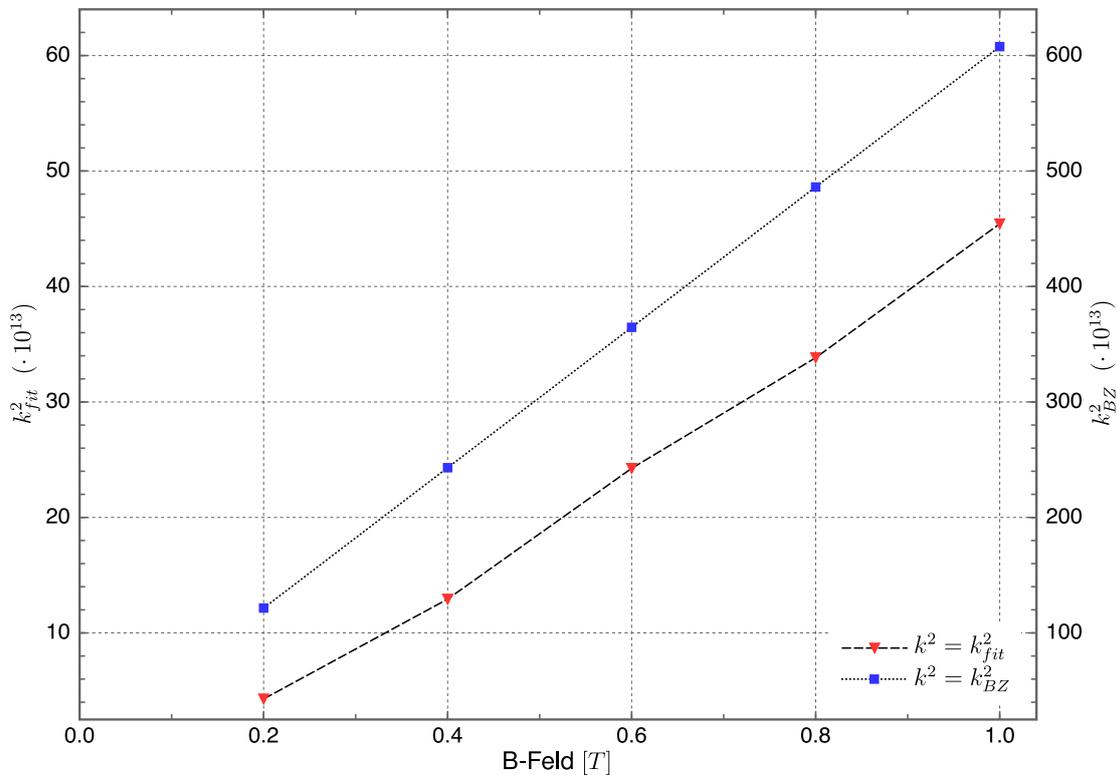


Abbildung 5.8: Vergleich der Werte für k_{fit}^2 und k_{BZ}^2
NB: Unterschiedliche Skalierung der k^2 -Werte

Aus Graphik 5.8 sehen wir, dass beiden Kraftverläufen ($k^2 = k_{BZ}^2$ und der Mittelwert der Simulationsergebnisse) ein in guter Näherung lineares Verhalten der k^2 -Werte zugrunde liegt. Die k -Abhängigkeit der Scherkraftwerte der Versetzungen zeigt einen vergleichbaren Anstieg und es ist hierbei besonders interessant, dass der Vorfaktor von k_{fit}^2 im betrachteten B-Feld-Bereich in guter Näherung konstant bleibt. Erst bei kleinen B-Feldern muss sich der Verlauf dann gegen $k^2 = 0$ bewegen. Ob dies abrupt oder stetig geschieht, können wir aber aus den vorhandenen Daten nicht ableiten.

5.3 Selbst- und Wechselwirkungsenergie der Versetzungen

Zweites Ziel der Arbeit war es, die in Kap. 3.9 beschriebenen Energiebeiträge und ihre Abstandsabhängigkeit für ein Versetzungspaar numerisch zu ermitteln. Alle der folgenden Simulationen wurden bei $B = 1.0 \text{ T}$ durchgeführt.

Der einfachen Lesbarkeit und der Erinnerung halber sei hier noch einmal Glg. (3.49) angegeben:

$$E_{tot} = \sum E_{FL} \cong N \cdot \bar{E}_{FL} + E_{WW} + E_{selbst}$$

Zur Bestimmung der unterschiedlichen Energiebeiträge verglichen wir jeweils Felder mit und ohne Versetzung bei unterschiedlichen Abständen zwischen den Versetzungen. Da sich bei unserer Art, den Versetzungsabstand zu ändern auch zwangsläufig die Gittergröße ändert (wir entfernen "Spalten" im Gitter, beziehungsweise fügen sie hinzu), berechneten wir immer die Energie pro Flusslinie und verglichen diese dann mit dem entsprechenden Wert der ungestörten Gitter mit nahezu gleicher Größe – die Gitter unterscheiden sich immer um jene Teilreihe an Flusslinien, die einem ungestörten Gitter hinzugefügt wurde, um die Versetzungen zu erzeugen (= $n + 1$ -Region). Aus diesem Vergleich heraus lässt sich abschätzen, wie groß die Summe der letzten beiden Terme in in obiger Gleichung ist. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind im folgenden Kapitel 5.3.1 zu finden.

Da unser Feld durch die periodischen Randbedingungen eine geometrische Verzerrung erfährt, die in einem realen System so nicht auftreten würde, müssen wir versuchen, den Energiebeitrag, der durch die Verzerrung zur eigentlichen Selbstenergie addiert wird, abzuschätzen und dementsprechend herauszurechnen.

Wir betrachteten dazu einen Feldbereich, der möglichst weit von den Versetzungen entfernt lag – dem liegt die Annahme zugrunde, dass dieser Bereich nur "geometrisch" verzerrt ist und nicht mehr durch die Versetzungen beeinflusst wird – und verglichen die mittlere Energie pro Flusslinie dieses Bereiches mit dem jeweiligen gesamten, gestörten Gitter, um so die geometrische Verzerrung zu eliminieren. Auch diese Analyse wurde für alle Gittergrößen durchgeführt und liefert uns eine Abschätzung über die Summe aus (konstanter) Selbstenergie und (abstandsabhängiger) Wechselwirkungsenergie der Versetzungen.

5.3.1 Selbst- und Wechselwirkungsenergie

In unseren Untersuchungen betrachten wir ein 5656-(56;50;56)-Gitter. Diesem Gitter entfernten wir in der n -Region schrittweise Gitterebenen, bis der Abstand zwischen den Versetzungen nur noch 12 Spalten betrug. Wir gingen dabei immer in Schritten von 4 Gitterebenen vor.

Zusätzlich nahmen wir in die Betrachtung noch drei Gitter hinein, die uns ebenfalls vorlagen und größer als das ursprüngliche 5656-(56,56,50)-Gitter sind. Diese Gitter haben ebenfalls einen $n + 1$ -Abstand von 56 Gitterebenen, sind also in dieser Hinsicht mit unseren Gittern vergleichbar; es wurde aber nicht nur der n -Abstand erhöht, sondern auch in y -Richtung weitere "Zeilen" hinzugefügt – daher der unterschiedliche Verlauf der Flusslinienanzahlen.

Für diese Gitter lagen uns keine ungestörten Entsprechungen vor, sodass wir die ungestörten mittleren Energiewerte extrapolierten, indem wir den Mittelwert aller mittleren (ungestörten) Energiewerte verwendeten. Das erscheint uns plausibel, da die mittleren Energiewerte in den ungestörten Gittern eine sehr gute Übereinstimmung zeigen. Alle Berechnungen wurden an den gestörten, großen Gittern genauso wie an ihren "kleineren" Pendants ausgeführt.

Wir konnten leider in allen 56-Gittern die $n + 1$ -Region nicht verkleinern, da wir wieder auf instabiles Verhalten des Gitters stießen, sobald wir auch nur versuchten, einen Schritt an 4 Gitterebenen zu entfernen. Offensichtlich ist hier immer noch das selbe Verhalten oder Problem zu sehen, das schon in [8] beschrieben wurde. Da aber unabhängig davon Verbesserungen am Relaxationsalgorithmus geplant sind (s. Kap. 6.1.1), gehen wir davon aus, dass dadurch auch dieses Problem behoben wird. Sollte das nicht der Fall sein, muss eine detaillierte Untersuchung stattfinden, ob das Verhalten durch die Randbedingungen verursacht wird oder ob der Algorithmus selbst dem Problem zugrundeliegt.

Für die Arbeit und die Betrachtung der Ergebnisse bedeutet das, dass wir den E_{56} -Beitrag (oder, genauer gesagt, den mittleren Beitrag zur Flusslinienenergie \bar{E}_{56}) durch den Vergleich des (56;50;56)-Feldes mit dem größten simulierten Feld abschätzen müssen. Das erlaubt uns dann auch, eine Abschätzung für die tatsächliche, nicht durch die periodischen Randbedingungen beeinflusste, Selbstenergie des Versetzungspaares anzugeben.

Unsere Betrachtung beginnt in Folge mit der Darstellung des Gesamtenergieverlaufes, der dann sukzessive um die Beiträge des ungestörten Gitters, der geometrischen Verzerrung und des 56-Feldrestes bereinigt wird.

Die erste Graphik zeigt demnach den Gesamtenergieverlauf:

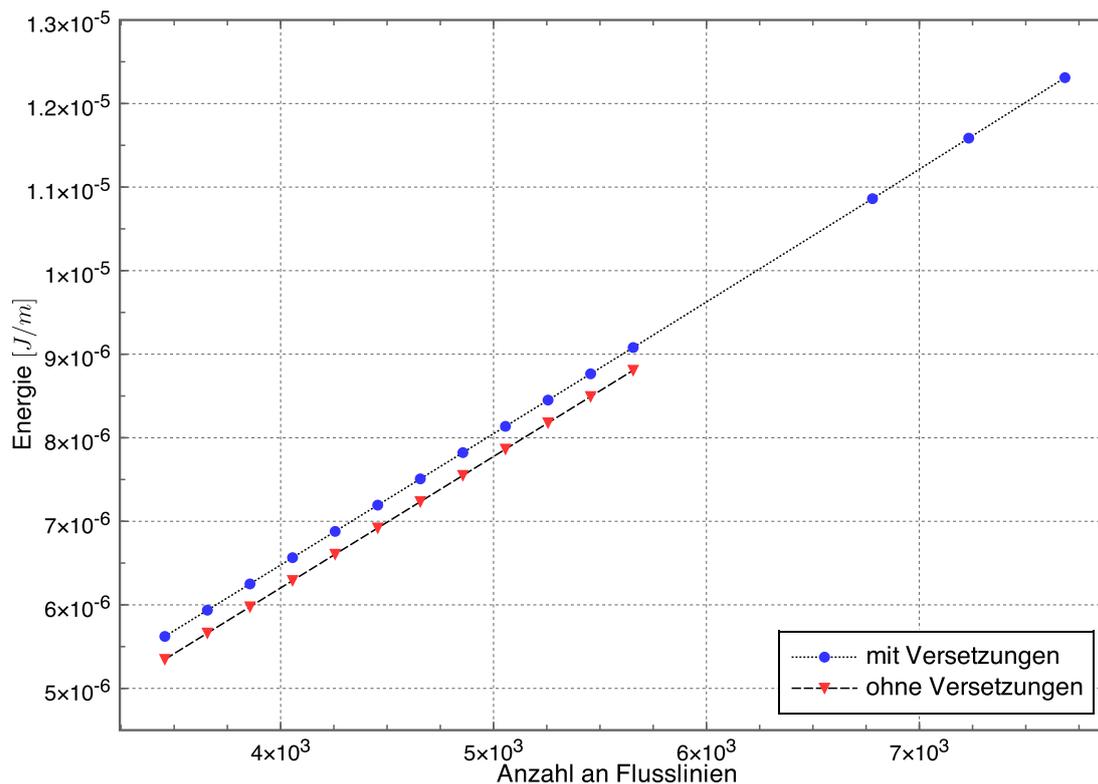


Abbildung 5.9: Gesamtenergie für gestörte und ungestörte Gitter in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes

Wir sehen hier deutlich den linearen Verlauf der Gesamtenergie mit der Gittergröße; desweiteren merken wir zwar, dass die Versetzungen die Gesamtenergie des Gitters erhöhen, können aber aus dieser Darstellungsform nichts Näheres über den qualitativen Verlauf dieses zusätzlichen Energiebetrages aussagen.

Erst wenn wir die mittlere Energie pro Flusslinie betrachten, tritt ein deutlicher Unterschied zu Tage:

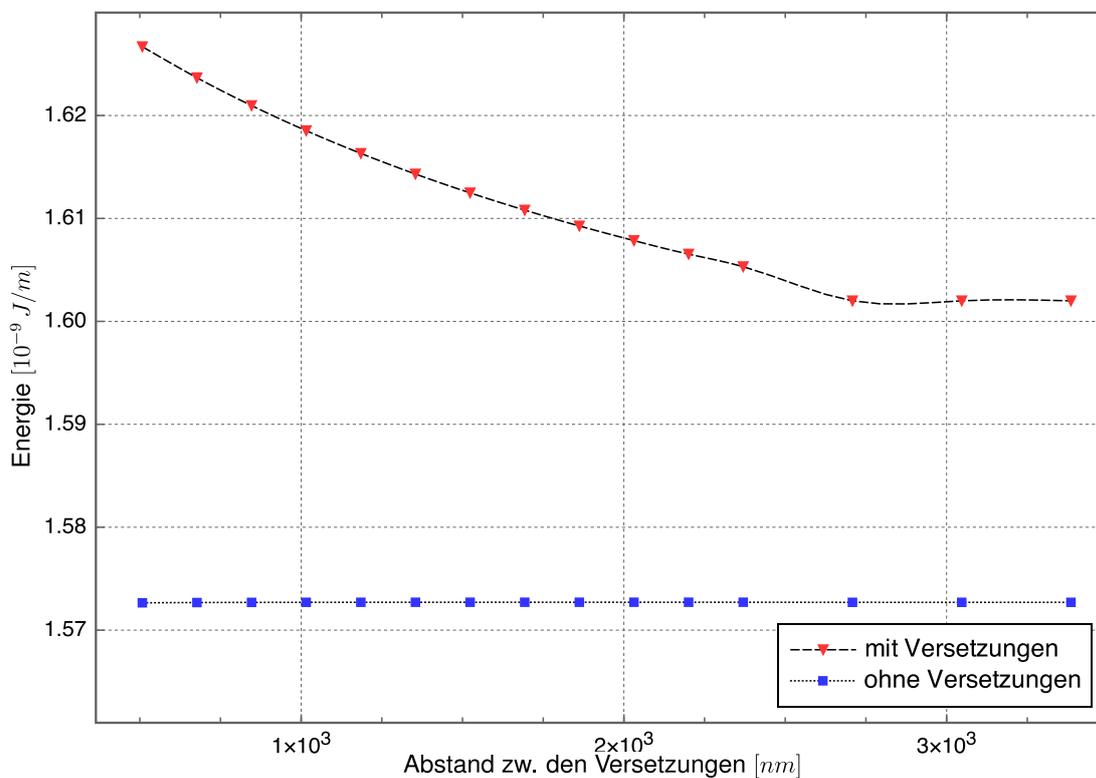


Abbildung 5.10: Mittlere Energie pro Flusslinie für gestörte und ungestörte Gitter in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes

Jetzt sehen wir deutlich, dass der Gesamtenergieanstieg im ungestörten Gitter einfach durch die Erhöhung der Flusslinienzahl verursacht wird, da die mittlere Energie pro Flusslinie in sehr guter Näherung konstant bleibt. Im gestörten Gitter jedoch nimmt die mittlere Energie kontinuierlich ab – die Versetzungen wechselwirken nicht mehr so stark – bleibt aber dennoch immer deutlich über dem Niveau des ungestörten Gitters. Wir erreichen in den großen Gittern einen Punkt, in dem der Energiebeitrag der Versetzung annähernd konstant wird: Ab diesem Punkt spielt die Wechselwirkung der Versetzungen nur noch eine untergeordnete Rolle und es verbleibt nur noch der Selbstenergieanteil gemeinsam mit E_{56} .

Die Werte der Gesamtenergie und der mittleren Energie pro Flusslinie stellen sich im Detail wie folgt dar:

Abstand [h_0]	Abstand [nm]	E_{ges} (mit Vers.) [J/m]	E_{ges} (ohne Vers.) [J/m]
12	507,8136522	$5,621833246 \cdot 10^{-6}$	$5,347029243 \cdot 10^{-6}$
16	677,0848696	$5,936136183 \cdot 10^{-6}$	$5,661651772 \cdot 10^{-6}$
20	846,3560871	$6,250433324 \cdot 10^{-6}$	$5,976240533 \cdot 10^{-6}$
24	1015,627304	$6,564736609 \cdot 10^{-6}$	$6,290809551 \cdot 10^{-6}$
28	1184,898522	$6,879052142 \cdot 10^{-6}$	$6,605367160 \cdot 10^{-6}$
32	1354,169739	$7,193381893 \cdot 10^{-6}$	$6,919918062 \cdot 10^{-6}$
36	1523,440957	$7,507726640 \cdot 10^{-6}$	$7,234465175 \cdot 10^{-6}$
40	1692,712174	$7,822085976 \cdot 10^{-6}$	$7,549010122 \cdot 10^{-6}$
44	1861,983392	$8,136458877 \cdot 10^{-6}$	$7,863553892 \cdot 10^{-6}$
48	2031,254609	$8,450844331 \cdot 10^{-6}$	$8,178096989 \cdot 10^{-6}$
52	2200,525826	$8,765240970 \cdot 10^{-6}$	$8,492639730 \cdot 10^{-6}$
56	2369,797044	$9,079648073 \cdot 10^{-6}$	$8,807182242 \cdot 10^{-6}$
64	2708,339479	$1,086152615 \cdot 10^{-5}$	–
72	3046,881913	$1,158562752 \cdot 10^{-5}$	–
80	3385,424348	$1,230972874 \cdot 10^{-5}$	–

Tabelle 7: Gesamtenergie der betrachteten Felder

NB: Werte der mit “–”bezeichneten Felder wurden nicht ermittelt

Abstand [h_0]	Abstand [nm]	\bar{E} (mit Vers.) [J/m]	\bar{E} (ohne Vers.) [J/m]
12	507,8136522	$1,626687854 \cdot 10^{-9}$	$1,572655662 \cdot 10^{-9}$
16	677,0848696	$1,623669631 \cdot 10^{-9}$	$1,572681054 \cdot 10^{-9}$
20	846,3560871	$1,620962996 \cdot 10^{-9}$	$1,572694869 \cdot 10^{-9}$
24	1015,627304	$1,618524816 \cdot 10^{-9}$	$1,572702385 \cdot 10^{-9}$
28	1184,898522	$1,616318648 \cdot 10^{-9}$	$1,572706474 \cdot 10^{-9}$
32	1354,169739	$1,614313711 \cdot 10^{-9}$	$1,572708657 \cdot 10^{-9}$
36	1523,440957	$1,612484255 \cdot 10^{-9}$	$1,572709817 \cdot 10^{-9}$
40	1692,712174	$1,610808478 \cdot 10^{-9}$	$1,572710453 \cdot 10^{-9}$
44	1861,983392	$1,609267978 \cdot 10^{-9}$	$1,572710784 \cdot 10^{-9}$
48	2031,254609	$1,607847091 \cdot 10^{-9}$	$1,572710950 \cdot 10^{-9}$
52	2200,525826	$1,606532442 \cdot 10^{-9}$	$1,572711061 \cdot 10^{-9}$
56	2369,797044	$1,605312592 \cdot 10^{-9}$	$1,572711116 \cdot 10^{-9}$
64	2708,339479	$1,601994995 \cdot 10^{-9}$	$1,572701105 \cdot 10^{-9}$ *
72	3046,881913	$1,601994968 \cdot 10^{-9}$	$1,572701105 \cdot 10^{-9}$ *
80	3385,424348	$1,601994885 \cdot 10^{-9}$	$1,572701105 \cdot 10^{-9}$ *

Tabelle 8: Energie pro Flusslinie \bar{E} der betrachteten Felder.

NB: * markiert interpolierte Werte

Eliminieren wir jetzt den konstanten Anteil des ungestörten Gitters an der mittleren Energie der versetzungsbehafteten Gitter, erhalten wir ein Diagramm, das uns den Verlauf des folgenden Energiebetrages wiedergibt:

$$E_{plot} = \bar{E}_{selbst} + \bar{E}_{WW}(r) + \bar{E}_{56} \quad (5.2)$$

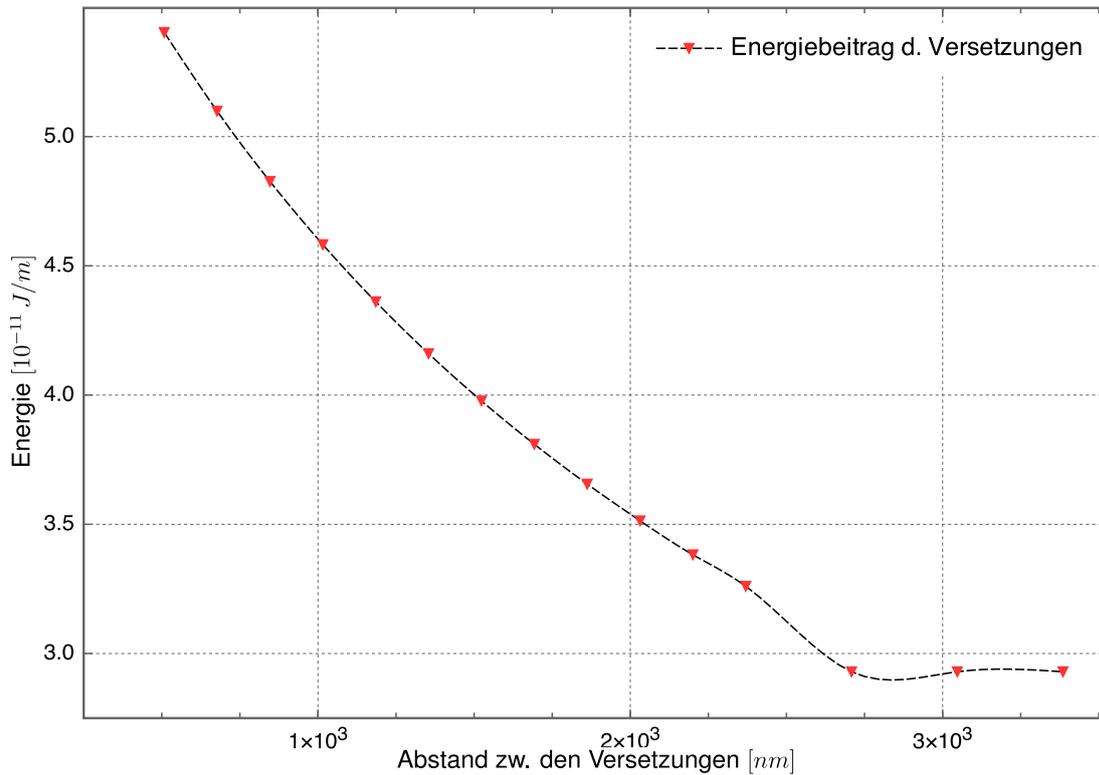


Abbildung 5.11: Mittlerer Energiebeitrag der Versetzung (mit \bar{E}_{56}) zur mittleren Energie in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes

Hierbei setzt sich E_{selbst} aus den zwei schon erwähnten Teilen zusammen:

$$E_{selbst} = E_{geom} + E_{disl} \quad (5.3)$$

Als E_{geom} bezeichnen wir jetzt den Energiebeitrag der geometrischen Verzerrung des Gitters, der durch die periodischen Randbedingungen verursacht wird. Diesen Beitrag werden wir im nächsten Abschnitt noch bestimmen und dann aus unserer Versetzungsenergierechnung entfernen. Daneben steht E_{disl} , mit dem wir die "tatsächliche" Selbstenergie der Versetzung bezeichnen. Um eine exakte Bestim-

mung des quantitativen Verlaufes durchführen zu können, müssten wir noch Rechnungen im Bereich kleiner Abstände (weniger als 12 Gitterebenen) durchführen. Dabei stießen wir wieder auf instabiles Verhalten und gehen davon aus, dass die Überarbeitung des Relaxationsalgorithmus Abhilfe schaffen wird.

5.3.2 Geometrische Verzerrung

Durch die periodischen Randbedingungen ist es dem Gitter nicht möglich, die Konfiguration einzunehmen, die der physikalischen Realität entsprechen würde. Es kommt nämlich im $n+1$ -Bereich immer zu einer Stauchung der Einheitszellen entlang der y -Achse; dementsprechend sind die Einheitszellen im n -Bereich gestreckt. Dieser Effekt überlagert sich dann mit der durch die Versetzung hervorgerufenen Deformation (= äquivalent zur Selbstenergie) und führt so zu einem falschen Wert der Selbstenergie des Versetzungspaares.

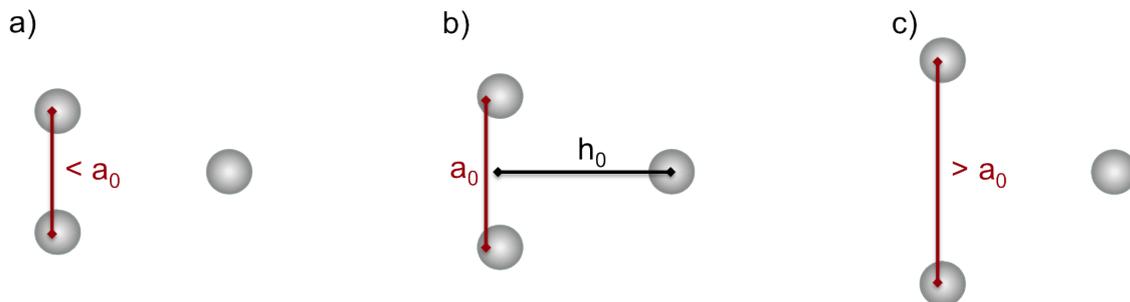


Abbildung 5.12: Geometrische Verzerrung der Einheitszellen durch die periodischen Randbedingungen (schematisch)

a) in der $n+1$ -Region b) im ungestörten Fall c) in der n -Region

Damit wir unsere Energiewerte korrigieren können, müssen wir das Ausmaß der geometrischen Verzerrung in jedem Gitter bestimmen. Unsere erste Annahme dazu war, dass die durch die Versetzung verursachte Deformation mit steigender Entfernung vom Versetzungszentrum geringer wird und daher am horizontalen Rand des Simulationsbereiches kaum mehr Einfluss hat. Das hieße dann für uns, dass in diesem Randbereich die geometrische Deformation dominierend für den Unterschied zwischen der mittleren Energie im gesamten System und dem lokalen Energiemittel im Randbereiches ist. Wir bestimmten daher das Energiemittel einer, drei und fünf horizontalen Flusslinienebenen und entschieden uns dann – aus Genauigkeitsgründen – den “Fünf-Linien-Mittelwert” zu verwenden.

Die Ergebnisse, die aus einem konsequenten Verfolgen dieses Ansatzes resultierten, decken sich aber nicht mit den Vorhersagen der etablierten elastischen Theorie der Versetzungen. Der Unterschied ist insbesondere so gravierend – eine Abweichung mehrerer Größenordnungen –, dass wir unsere ursprüngliche Annahme revidieren mussten. Wir gehen nunmehr davon aus, dass sich die durch die Versetzung hervorgerufene Verzerrung auf das ganze Flussliniengitter gleichermaßen verteilt. Dafür spricht, dass zum einen, bedingt durch die periodischen Randbedingungen, keine Gebiete innerhalb der Simulationsgeometrie ausgezeichnet sind. Zum anderen ist die Kopplung zwischen den Flusslinien vergleichsweise stark und die Pinningkraft im relaxierten Gitter vernachlässigbar klein.

Diese Energieverteilung hat aber zur Folge, dass wir zwischen dem Verzerrungsbeitrag der Randbedingungen und dem der Versetzungen nicht unterscheiden können – ein Vergleich mit der Vorhersage des *Peierls-Nabarro*-Modells sollte uns wenigstens eine Abschätzung der Größenordnung der Selbstenergie im Vergleich zur geometrischen Verzerrung erlauben.

5.3.3 Abschätzung des konstanten \overline{E}_{56} -Beitrages

Um unsere Betrachtung des Energieverlaufes zu vervollständigen, müssen wir noch den Beitrag des konstanten 56-Feldbereiches mit der Energie E_{56} zum mittleren Energieverlauf behandeln. Wir verbleiben also mit folgender Zusammensetzung der mittleren Energie pro Flusslinie:

$$E_{mean} = \overline{E}_{selbst} + \overline{E}_{WW}(r) + \overline{E}_{56} \quad (5.4)$$

Wir gehen jetzt davon aus, dass die Wechselwirkung zwischen den Versetzungen im größten betrachteten Gitter nur noch über die zentrale 56-Region hinweg stattfindet. Das bedeutet also in diesem Fall, dass

$$\overline{E}_{WW}(80 \cdot h_0) \approx 0 \quad (5.5)$$

Wir können diese Aussage nicht mit absoluter Sicherheit treffen, da wir noch keine Simulationen mit einem Versetzungsabstand $r \gg 80 \cdot h_0$ durchgeführt haben, gehen aber aufgrund der uns vorliegenden Simulationsergebnisse davon aus, dass der mögliche Fehler durch diese Annahme vertretbar gering ist. Dennoch sei darauf hingewiesen, dass der in weiterer Folge ermittelte Wert für \overline{E}_{56} nur als Näherungswert zu verstehen ist. Im Weiteren gehen wir auch davon aus, dass

$$\overline{E}_{WW}(56 \cdot h_0) \approx \overline{E}_{56} \quad (5.6)$$

Ausgehend von diesen Überlegungen können wir jetzt die Energiezusammensetzung für das 56- und 80-Gitter angeben:

$$\begin{aligned} \overline{E}_{mean}^{56} &= \overline{E}_{selbst} + \overline{E}_{WW}(56 \cdot h_0) + \overline{E}_{56} \\ &= \overline{E}_{selbst} + 2 \overline{E}_{56} \end{aligned} \quad (5.7)$$

und

$$\begin{aligned} \overline{E}_{mean}^{80} &= \overline{E}_{selbst} + \overline{E}_{WW}(80 \cdot h_0) + \overline{E}_{56} \\ &= \overline{E}_{selbst} + \overline{E}_{56} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Subtrahieren wir nun (5.8) von (5.7) erhalten wir unseren Näherungswert für \bar{E}_{56} :

$$\begin{aligned}\bar{E}_{mean}^{56} - \bar{E}_{mean}^{80} &= \bar{E}_{56} \\ &= 3.308 \cdot 10^{-12} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}} \right]\end{aligned}\quad (5.9)$$

Führen wir unsere Abschätzungen konsequent fort, erhalten wir – durch elementare Umformungen von (5.8) und (5.7) – auch einen Wert für die kombinierte Selbst- und Verzerrungsenergie \bar{E}_{selbst} :

$$\begin{aligned}\bar{E}_{selbst} &= \bar{E}_{mean}^{80} - \bar{E}_{56} = \bar{E}_{mean}^{56} - 2 \cdot \bar{E}_{56} \\ &= 2.599 \cdot 10^{-11} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}} \right]\end{aligned}\quad (5.10)$$

Zum Vergleich dieser Werte mit den Vorhersagen der etablierten Theorie der Versetzungen in Festkörpern gehen wir von folgender Gleichung aus (Glg. 8-25 in [4]):

$$E_{dist}(\hat{r}) = \frac{c_{66} a_{\Delta}^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{\hat{r}}{2\zeta} \right) \quad (5.11)$$

Obiger Ausdruck beschreibt – mit $2\zeta = h_0/(1-\nu)$ die gesamte Verzerrungsenergie in einem zylindrischen Volumen mit Radius \hat{r} und Höhe 1 um die Versetzung. Für eine Ableitung aus dem *Peierls-Nabarro*-Modell sei wieder auf [4] verwiesen.

Glg. (5.11) ist direkt von \hat{r} , k^2 und k_{\perp}^2 abhängig, so dass wir für unseren Vergleich sinnvolle Annahmen für diese Größen treffen müssen. Wir haben in Kap. 5.2.4 und speziell in Tab. 4 charakteristische k^2 -Werte für das Versetzungs-“Gitter” angegeben, die wir in dieser Berechnung verwenden. Die Größe des ln-Terms nähern wir bequemerweise mit 2π . Zur Erklärung dieser üblichen Vereinfachung bei der Betrachtung der Versetzungsenergien siehe Kap. 8.6. in [4]

Der resultierende Ausdruck

$$E_{dist} = \frac{c_{66} a_{\Delta}^2}{2(1-\nu)} \quad (5.12)$$

ist für gegebenes $c_{66}\Phi_0/B$ konstant und dann nur noch über den $(1-\nu)$ -Term von B abhängig. Alle anderen Größen (a_{Δ} , c_{11} , c_{66} , h_0 und ν) berechnen sich nach den jeweiligen Ausdrücken in Kapitel 3.

Führt man die Berechnung mit diesen Werten durch, ergibt sich

$$E_{disl} \approx 2.474 \cdot 10^{-12} \left[\frac{J}{m} \right] \quad (5.13)$$

Es zeigt sich eine Abweichung um einen Faktor 10 zwischen den Simulationsergebnissen und den theoretischen Berechnungen. Dabei muss man aber, wie schon erwähnt, im Auge behalten, dass wir zwischen der geometrischen Verzerrung des Gitters und der Selbstenergie der Versetzungen nicht unterscheiden können – ob der Schluss zulässig ist, dass die geometrische Verzerrung einen neunmal größeren Energiebeitrag als die Selbstenergie der Versetzung zur Folge hat, ist erst durch weitere Simulationen abschließend zu klären.

Folgende Graphik fasst die Ergebnisse zusammen und stellt den Verlauf von $\bar{E}_{WW}(r)$ dar:

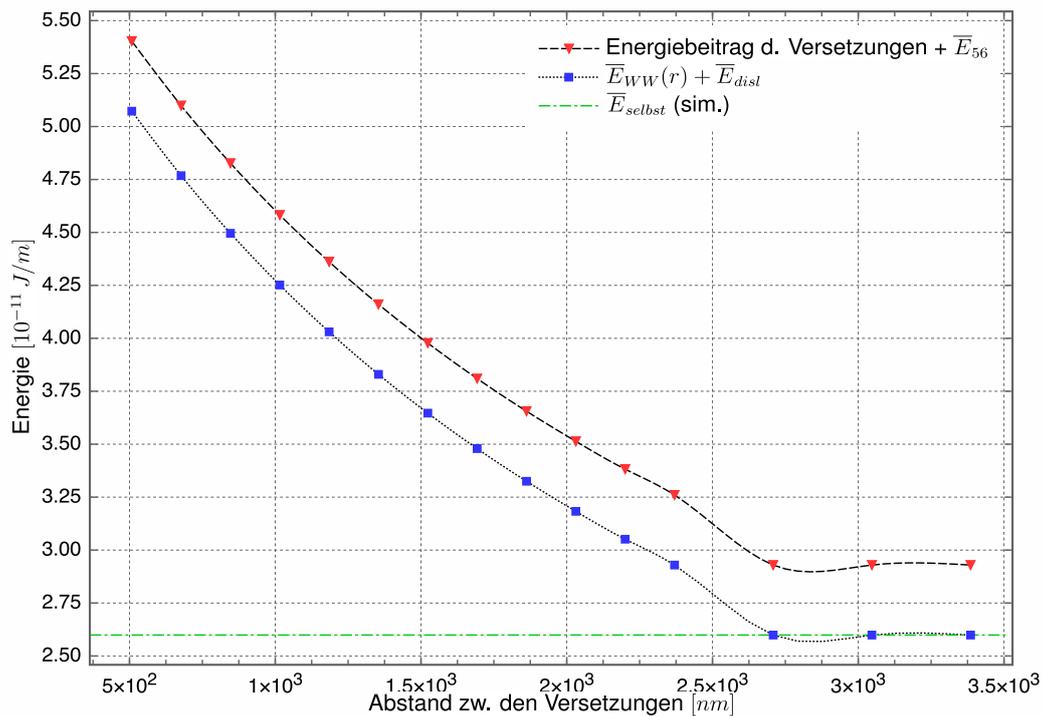


Abbildung 5.13: Wechselwirkungs- und Selbstenergieanteil pro Flusslinie

Wir haben also einen Verlauf für $\overline{E}_{WW}(r)$ gefunden und bemerken, dass wir diesen Verlauf grob in zwei Bereiche gliedern können:

1. **$0 < r \leq 2500 \text{ nm}$** : Dieser Bereich ist von einem Verhalten bestimmt, das unseren Erwartungen genau entspricht. Der Energieanteil nimmt stetig mit dem Abstand ab, da die Wechselwirkung zwischen den Versetzungen natürlicherweise abnimmt, je weiter sie sich voneinander entfernen. Kleine Abweichungen in den Daten führen wir hier auf zwangsläufig auftretende numerische Ungenauigkeiten zurück; die Abweichungen bewegen sich aber alle in einem absolut tolerablen Rahmen.
2. **$r > 2500 \text{ nm}$** : In diesem Bereich tritt ein sehr spannender Effekt auf: Die Energiekurve beginnt sich stark abzuflachen und nähert sich – so unsere Vermutung – einem asymptotischen Grenzwert an. Grund dafür ist, dass der Abstand zwischen den Versetzungen so groß wird, dass ihre Wechselwirkung untereinander vernachlässigbar wird und der Energiebetrag in diesem Fall nur noch aus E_{selbst} besteht. Wir haben diesen Effekt auch schon in Abb 5.11 beobachtet, konnten uns dort noch nicht sicher sein, ob es sich nicht um ein Deformationsartefakt handelt; dennoch müssen weitere Simulationen den genauen Verlauf der Energiekurve bestätigen.

5.4 Zusammenfassung

Wir haben – bis auf einige Punkte, die schon im Text erwähnt wurden und im nachfolgenden Kapitel noch genauer erläutert werden – alle unsere gesetzten Ziele erreicht.

Es ist uns gelungen, Kraft auf Versetzungen im Gitter auszuüben und dadurch die Versetzungen gezielt zu bewegen. Wir konnten die dafür notwendige Kraft bestimmen, zeigen, dass diese von der Gittergröße unabhängig ist und ein theoretisches Modell finden, das uns eine hinreichende Übereinstimmung mit dem Computerexperiment liefert. Es muss nur noch ein Abgleich der Daten mit den Resultaten von Hrn. *David Seppi* – er führte vergleichbare Untersuchungen an einer anderen Geometrie durch – erfolgen, um zu sehen, ob hier Übereinstimmung herrscht.

Leider lagen diese Werte zum Zeitpunkt des Verfassens dieser Arbeit noch nicht vor; daher müssen wir den Vergleich an dieser Stelle schuldig bleiben und verweisen den Leser an die zukünftige Arbeit Hrn. *Seppis*, in der beide Wertemengen gegenübergestellt werden.

Betrachten wir unsere Resultate zur Versetzungsenergie, so haben wir auch hier die für uns interessanten Punkte erforschen können. Wir sind nun in der Lage, zumindest grob darüber Auskunft zu geben, wie groß die Reichweite der Versetzungswechselwirkung ist, wie diese Kraft mit dem Abstand abnimmt und in welcher Größenordnung sie liegt.

Zusätzlich ist es uns gelungen, die Auswirkungen der periodischen Randbedingungen und die der damit einhergehenden geometrischen Verzerrungen zu bestimmen und herauszurechnen; wir konnten auch Abschätzungen für \bar{E}_{56} und \bar{E}_{selbst} angeben. Mit diesen Bemerkungen wollen wir die Präsentation unserer Ergebnisse beenden und wenden uns im nächsten Kapitel den Problemen und Herausforderungen zu, denen wir uns in der Zukunft von `fsim` stellen müssen.

6 Verbesserungsmöglichkeiten und zukünftige Themen

Im Laufe der Forschungsarbeit, dem Analysieren der Ergebnisse und der fortgesetzten Diskussion innerhalb der Arbeitsgruppe haben wir einige Punkte gefunden, an denen noch Verbesserungsarbeit zu leisten ist.

Dieses Kapitel stellt diese Themen überblicksmäßig vor, um einen objektiven und vollständigen Einblick in unsere Arbeit zu gewähren.

Danach möchten wir kurz skizzieren, welche weiteren Schritte geplant sind, um ein tieferes Verständnis des Versetzungsverhaltens in Typ-II-Supraleitern zu erreichen.

6.1 Problemfelder

Wir haben schon an einigen Stellen der Arbeit auf unterschiedliche Problemfelder hingewiesen – die wir hier kurz zusammenfassen, bevor wir sie im Detail besprechen:

- Instabilitäten im Algorithmus
- seltenes, nicht-reproduzierbares Verhalten
- periodische Randbedingungen

Die ersten zwei Punkte lassen sich wahrscheinlich durch eine gemeinsame Maßnahme “beheben”: der geplanten Überarbeitung des Relaxationsalgorithmus, weswegen wir sie hier gemeinsam abhandeln werden.

6.1.1 Algorithmusüberarbeitung

In Kap. 4.6 haben wir offengelegt, dass unser Algorithmus nicht immer stabil läuft und wir deswegen einen “bad hack” in das Programm eingebaut haben. Genauso erwähnten wir an verschiedenen Stellen, dass bestimmte Simulationsgeometrien dazu neigen, instabiles Verhalten zu zeigen – eine direkte Konsequenz daraus ist der konstante E_{56} -Term in den Versetzungsenergieberechnungen.

Ein weiterer Punkt, der bisher keine Erwähnung fand, tritt beim Abspeichern und anschließendem Weiterrechnen von diesem gespeicherten Zustand aus in Erscheinung. Rechnen wir von einem bestimmten Zwischenstand aus mehrmals dieselbe

Relaxation, sollten wir uns erwarten, dass das System auch jedes Mal exakt den selben Endzustand einnimmt, da es sich bei unserem Flussliniengitter a priori um ein deterministisches System handelt.

Genau das ist aber nicht der Fall. Wir beobachten beim mehrmaligen Relaxieren immer kleine – aber durchaus wahrnehmbare und über der Systemungenauigkeit liegende – Abweichungen der einzelnen Ergebnisse voneinander; sowohl was die Endposition, als auch damit einhergehend die Endenergie der einzelnen Flusslinien anbelangt.

Zwar sind alle Ergebnisse, soweit wir das beurteilen konnten, physikalisch korrekt; jedoch müssen wir diesem Verhalten auf den Grund gehen.

In unseren Überlegungen dazu haben sich drei mögliche Ursachen herauskristallisiert:

- Das System ist nicht vollständig genau bestimmt. Das kann darin begründet liegen, dass beim Abspeichern mit zu geringer Genauigkeit gespeichert wird (unwahrscheinlich, da das Binärfile de facto ein Arbeitsspeicherauszug des Flusslinienfeldes ist) oder aber, dass
- sich die durch die begrenzte Genauigkeit der Rechenarchitektur auftretenden Rundungsfehler sukzessive aufsummieren und so zu den geringen Abweichungen führen.
- Es kann auch sein, dass der Algorithmus einen bislang unerkannten Fehler aufweist oder sich sogar mehrere Fehler innerhalb des Algorithmus annähernd gegenseitig aufheben.

Gerade in Anbetracht der langen Entstehungsgeschichte und der großen Anzahl an Personen, die einen Beitrag zum Quellcode geleistet haben, ist es aufgrund der damit einhergehenden Komplexität und der nicht besonders “lesefreundlichen” Mischung aus unterschiedlichen Programmierstilen gut möglich, dass sich noch immer Fehler im Quellcode verbergen.

Da alle oben genannten Probleme zumindest als mögliche Fehlerursache den Algorithmus selbst haben, haben wir uns entschlossen, die Arbeitsweise des Algorithmus umzugestalten.

Momentan berechnet der Algorithmus, wie in 4.3 erläutert, die Energie einer Flusslinie an unterschiedlichen Positionen, um daraus die Energieparabeln abzuleiten.

Nachdem die Flusslinien proportional zur Kraft bewegt wurden, überprüft der Algorithmus auch, ob auch eine *geringere* Verschiebung entlang der Krafrichtung eine Energieeinsparung brächte. Dazu teilt der Algorithmus die zurückgelegte Strecke maximal neun Mal und überprüft an den jeweiligen Positionen die Energie.

Wir planen jetzt, diesen Vorgang umzukehren – das heißt, der Algorithmus beginnt mit kleinen Verschiebungen entlang der Krafrichtung und *vergrößert* diese dann schrittweise. Dabei eliminieren wir das momentan vorhandene Risiko, ein lokales Minimum in unphysikalischer Weise zu “überspringen”. Genauso wird dadurch verhindert, dass eine Versetzung – speziell dann, wenn eine Kraft auf sie wirkt – zu weit in Krafrichtung springt und dadurch die Deformation des Gitters “überholt”, sodass das Gitter dann einige Relaxationsschritte braucht, um die Versetzung wieder “einzuholen”.

Wir vermuten auch die Ursache für das instabile Verhalten in der oben beschriebenen Reihenfolge der Bewegungsverkürzungen, da auch hier, speziell in der Nähe der Versetzungen, lokale Minima nicht erreicht bzw. übersprungen werden können, was dann naturgemäß zu einem nicht-physikalischen Systemverhalten führen kann.

Die Neuprogrammierung des Relaxationsalgorithmus gibt uns auch gleich die Möglichkeit, die Codestruktur zu vereinheitlichen und für zukünftige Änderungen mit hilfreichen und aussagekräftigen Kommentaren zu versehen. Wir sind uns natürlich bewusst, dass dieses Unterfangen zeitaufwändig ist, sind aber gleichzeitig überzeugt davon, dass die dadurch hoffentlich erzielten Verbesserungen und Problembehebungen den Aufwand mehr als rechtfertigen.

6.1.2 Randbedingungen

Die schon an vielen Stellen dieser Arbeit erwähnten periodischen Randbedingungen sind eine permanente Quelle der Unsicherheit, da wir nie genau wissen können, inwieweit das Systemverhalten durch die Randbedingungen beeinflusst wird oder tatsächlich der physikalischen Realität entspricht. Da es für uns aber keine andere und praktikable Möglichkeit gibt, diese Systeme zu simulieren, befinden wir uns hier auf einer permanenten Gratwanderung.

In vielerlei Hinsicht können wir die Auswirkungen der Randbedingungen dadurch minimieren, dass wir die Systemgröße an der oberen Grenze der Berechenbarkeit wählen. Hier sind wir aber zwangsläufig durch die beschränkten Hardwarekapazitäten und die damit einhergehenden, langen Simulationslaufzeiten limitiert. Wir haben daher immer versucht, einen Mittelweg zwischen Systemgröße, Beeinflussung und Rechendauer zu finden.

Ob uns das tatsächlich gelungen ist, ist nur aufgrund eines Vergleiches unserer Ergebnisse mit fundierten und mehrfach experimentell bestätigten, theoretischen Aussagen möglich. Das gestaltet sich leider insofern schwierig, da das Flussliniengitter einer gezielten und direkten Manipulation im Experiment kaum zugänglich ist – was ja genau der Grund dafür ist, dass wir uns den Computerexperimenten zugewandt haben.

Es bleibt uns also zur Verifikation nur noch die Möglichkeit zu versuchen, dieselben Resultate auf unterschiedlichen, unabhängigen Wegen zu erreichen. Genau daher arbeitet nicht nur der Autor, sondern auch sein Kollege *David Seppi* daran, Scherkraftwerte zu ermitteln; Hr. *Seppi* geht dabei aber von einer anderen Geometrie des Flusslinienfeldes aus.

Ob es uns tatsächlich jemals gelingen wird, die Auswirkungen der Randbedingungen nicht nur zu verstehen, sondern auch aktiv in unseren Simulationen auszunützen beziehungsweise zu minimieren, wird wohl nur die Zukunft und die weitere Arbeit am System zeigen.

6.2 Ausblick

Viele der im vorherigen Kapitel angesprochenen Punkte weisen uns zumindest den Weg für die nächste Zukunft.

Wir müssen zuerst die bekannten Probleme des Programmes beseitigen, bevor wir uns ernsthaft daran machen, weitere Funktionalität hinzuzufügen und unsere Simulationen auszuweiten. Wenn wir das abgeschlossen haben, stehen zwei entscheidende Punkte auf der Agenda. Um genauere und weiterführende Simulationen – unter anderem mit mehreren Versetzungen und deutlich größeren Feldern – in akzeptabler Zeit durchführen zu können, müssen wir die Geschwindigkeit des Algorithmus drastisch erhöhen. Durch die geplanten Änderungen hoffen wir schon einmal, nicht nur ein stabileres Verhalten, sondern auch, durch die mit den Veränderungen einhergehenden Code- Ablaufbereinigungen, eine höhere Geschwindigkeit erzielen zu können.

Um noch höhere Rechengeschwindigkeit zu erzielen, müssen wir das Programm nicht nur auf mehreren Prozessorkernen, sondern auch auf mehreren Maschinen bzw. Knoten eines Clusters lauffähig machen. Dazu ist eine tiefgreifende Veränderung der Programmstruktur, gemeinsam mit einem hohen Arbeitsaufwand, was Datenaustausch und Koordination der einzelnen Subprozesse betrifft, nötig. Es sind aber im Programm viele Routinen (zum Beispiel die Energieberechnung) vorhanden, die von solch einer massiven Parallelisierung stark profitieren dürften.

Jedoch vergessen wir nicht, dass eine Verbesserung des Algorithmus – ein “genialer” Einfall reicht hier schon – uns mit deutlich geringerem Aufwand eine extreme Leistungssteigerung bringen könnte. Doch leider liegt es in der Natur der Sache, dass wir uns nicht auf diese Art unvorhersagbarer Kreativität verlassen können und daher den anstrengenden, aber erprobten Weg der Parallelisierung auf jeden Fall verfolgen.

Hat unser Programm dann die notwendige Leistungsfähigkeit, ist es an der Zeit, das Verhalten der Flussliniengitter und der Versetzungen in Anwesenheit von Verankerungszentren und – das ist der wesentliche Punkt – äußerer Ströme zu simulieren. Das übergeordnete Ziel unserer Anstrengungen ist es ja herauszufinden, wie und in welchem Ausmaß Verankerungszentren und Versetzungen zusammenspielen um die kritischen Parameter der Typ-II-Supraleiter zu beeinflussen.

Literatur

- [1] Abramowitz, Milton und Stegun, Irene, editor. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, 9th Dover edition, 1964.
- [2] Ernst Helmut Brandt. The flux-line lattice in superconductors. *Rep. Prog. Phys.*, 58:1465–1594, 1995.
- [3] H.W. Weber, O. Hittmair. *Supraleitung*. Thiemig Verlag, 1979.
- [4] John Price Hirth, Jens Loth. *Theory of Dislocations*. © John Wiley & Sons, 1982. Krieger Publishing Company, 2nd edition edition, 1982.
- [5] Kitware, Inc. VTK - Visualisation Toolkit. <http://www.vtk.org/>, Oktober 2012.
- [6] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. Dover Publications Inc., second edition, 2004.
- [7] OpenMP Architecture Review Board. OpenMP Application Program Interface. <http://www.openmp.org/mp-documents/OpenMP3.1.pdf>, Juli 2011.
- [8] Sebastian Singer. Erzeugung von Versetzungen im Flussliniengitter von Typ-II-Supraleitern, Projektarbeit TU Wien, 2011.
- [9] Thomas Hausmaninger. Untersuchung von Flussliniengittern im Supraleiter mittels numerischer Simulation, Projektarbeit TU Wien, 2010.
- [10] ZID der TU Wien. ZID Phoenix Cluster. http://www.zid.tuwien.ac.at/hpc/phoenix_linux_cluster/, Oktober 2012.

Abbildungsverzeichnis

3.1	Erste Messung der Supraleitung an Hg, 1911 <i>Quelle: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Superconductivity_1911.gif, abgerufen am 25. Feb. 2013</i>	10
3.2	Vergleich des magnetischen Flusses für Typ-I- und Typ-II-Supraleiter. <i>Quelle: [3], Abb. 1.6.1</i>	12
3.3	Verlauf der spezifischen Wärme für Supra- und Normalleiter. <i>Quelle:</i> <i>[3], Abb. 2.3.1</i>	14
3.4	Verlauf des magnetischen Feldes $h(r)$ und des Ordnungsparameters $ \Psi $ einer isolierten Flusslinie für einen Supraleiter mit $\kappa \approx 8$. <i>Quelle:</i> <i>[6], Fig. 5.1</i>	23
3.5	Vergleich a) quadratischer und b) hexagonaler Flusslinienanordnung. <i>Quelle: [6], Fig. 4.11</i>	25
4.1	Schematische Darstellung der Energieberechnung im <code>relax_step</code> -Ablauf.	42
4.2	Schematische Darstellung eines Flusslinienfeldes. <i>Quelle: [8], Abb. 4.1</i>	44
4.3	Erster Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 20$)	46
4.4	50. Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 1.2$)	47
4.5	150. Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 0.02$)	47
4.6	250. Relaxationsschritt ($\Delta\bar{E} = 0.01$)	48
4.7	Schematische Darstellung der Verscherung des Flusslinienfeldes	51
4.8	Schematische Darstellung des unstetigen Verhaltens des linearen Po- tentials	52
4.9	Betrag der Differenzen zwischen Gesamtenergie und mittlerer Energie mal Flusslinienzahl	58
5.1	Schritt 94 im linearen Kraftanstieg des 10152-(72;70;72)-Feldes bei 800mT ($\Delta\bar{E} = 0.09$)	62
5.2	Schritt 95 im linearen Kraftanstieg des 10152-(72;70;72)-Feldes bei 800mT ($\Delta\bar{E} = 0.09$)	62
5.3	Schritt 107 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)	64
5.4	Schritt 108 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)	65
5.5	Schritt 109 im linearen Kraftanstieg des 17376-(96;90;96)-Feldes bei 800mT ($E_{max} = 45.698$ PE, Feldgröße $64\tilde{\lambda} \times 35\tilde{\lambda}$)	66

5.6	Magnetfeldabhängigkeit der Gleitkraft im 72- und 96-Gitter	67
5.7	Darstellung der simulierten Scherkraftwerte und ihrer theoretischen oberen und unteren Schranke	70
5.8	Vergleich der Werte für k_{fit}^2 und k_{BZ}^2 NB: <i>Unterschiedliche Skalierung der k^2-Werte</i>	71
5.9	Gesamtenergie für gestörte und ungestörte Gitter in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes	75
5.10	Mittlere Energie pro Flusslinie für gestörte und ungestörte Gitter in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes	76
5.11	Mittlerer Energiebeitrag der Versetzung (mit \bar{E}_{56}) zur mittleren Energie in Abhängigkeit des Versetzungsabstandes	78
5.12	Geometrische Verzerrung der Einheitszellen durch die periodischen Randbedingungen (schematisch) a) in der $n + 1$ -Region b) im ungestörten Fall c) in der n -Region	79
5.13	Wechselwirkungs- und Selbstenergieanteil pro Flusslinie	83