



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN



Bachelorarbeit

Analyse adjazenter Flusslinien im simulierten Supraleiter

AUSGEFÜHRT AM

Atominstitut der Technischen Universität Wien

UNTER DER ANLEITUNG VON

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Franz Sauerzopf

DURCH

Andreas Burger

11713132

Wien, 20. April 2020

Abstract

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magna aliqua. Nisi porta lorem mollis aliquam ut porttitor. Dignissim cras tincidunt lobortis feugiat. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus. Eleifend donec pretium vulputate sapien. Urna porttitor rhoncus dolor purus non enim praesent. Sed egestas egestas fringilla phasellus faucibus scelerisque eleifend donec pretium. Consequat mauris nunc congue nisi. In nibh mauris cursus mattis molestie a. Viverra vitae congue eu consequat ac felis. Volutpat diam ut venenatis tellus. Lacus viverra vitae congue eu consequat ac. At varius vel pharetra vel turpis nunc.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Theorie und Literatur	2
Flusslinien im Kontext der Simulation	2
Simulationsprinzip	2
Einheiten	3
Berechnung der Stromdichte	3
Vergleich mit dem Paarbrechungsstrom	4
Delaunay Triangulation und bestehende Implementierungen	4
Methodik	7
Analysierte Daten	7
Genutztes Rechensystem	8
Programm zur Analyse: <code>ad_analyze</code>	9
Einbettung in die Simulation	9
Eigen-Bibliothek	9
Input	9
Struktur von <code>ad_analyze</code>	10
Translation	10
Triangulation	11
Adjazenzen	11
Energien	12
Ausgabe und Darstellung	12
Resultate	13
Triangulation und Adjazenten	13
Energiedifferenz zwischen Adjazenten	13
Energieänderung bei Auslenkungen	14
Benchmarks für <code>ad_analyze</code>	15

Diskussion	16
Energien zwischen Flusslinien	16
Stromdichte	16
Energie in der nahen Umgebung	16
Auswirkung gepinnter Flusslinien	16
Fazit und Ausblick zu <code>ad_analyze</code>	17
Literatur	20

Einleitung

Die kritische Temperatur und das kritische Feld sind seit der Entdeckung von Supraleitern Gegenstand der Forschung, in gewisser Weise gelten sie als definierende Eigenschaften. Sie begrenzen fest den operablen Bereich der praktischen Nutzung dieses Phänomens, und werden als solches, mithilfe neuer Materialien, stetig nach oben bemüht.

Aus der Anwendung heraus zeigt sich die *kritische Stromdichte* als ein bedeutungsgleicher, gleichfalls limitierender Parameter. Oberhalb seiner Grenze beginnen magnetische *Flusslinien*, bewegt von der Lorentzkraft, im Typ-II-Supraleiter zu wandern. Es entsteht ein elektrischer Widerstand, ohne das dabei der supraleitende Zustand verlassen wird.

Die Besonderheit liegt nun darin, dass die maximale, kritische Stromdichte eines Materials beeinflussbar ist. Störstellen im Gitter eben jenes können als Verankerungszentren für die Flusslinien dienen, sie können die Flusslinien *pinnen*.

Von wesentlichem Interesse ist dafür die Korrelation zwischen Defekten im Flußliniengitter selbst, und den Verankerungskräften durch eine Wechselwirkung mit Defekten im Kristallgitter. Diesem Kontext nähert sich die Gruppe von Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Franz Sauerzopf über Simulationen der Bewegung von Versetzungen des Flussliniengitters, unter der Einwirkung von äußeren Kräften.

Darin hinein fügt sich die Aufgabenstellung dieser Arbeit. Ein Programm soll entstehen, als Baustein der Simulation, das Versetzungen anhand der gezählten *Adjazenten* charakterisiert, und weiterführende Analysen vornimmt. Dadurch soll, zum Ersten, die Hypothese geklärt werden, dass der *Paarbrechungsstrom* womöglich lokal überschritten werden könnte. Zum Zweiten sollen damit Untersuchungen zur Beweglichkeit des Gitters ermöglicht werden.

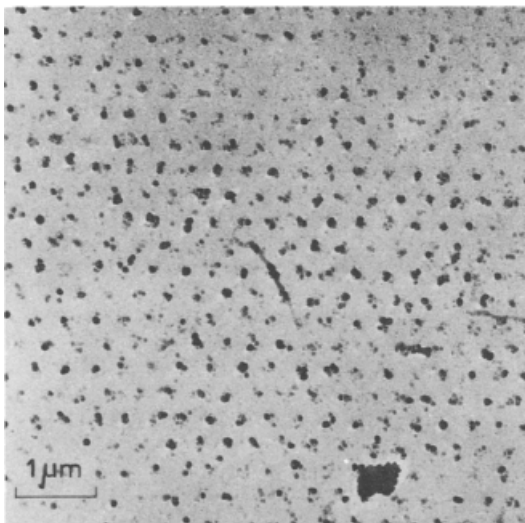
Dieses Programm heißt `ad_analyze`, und wird, gemeinsam mit den dadurch entstandenen Resultaten, in dieser Arbeit präsentiert.

Theorie und Literatur

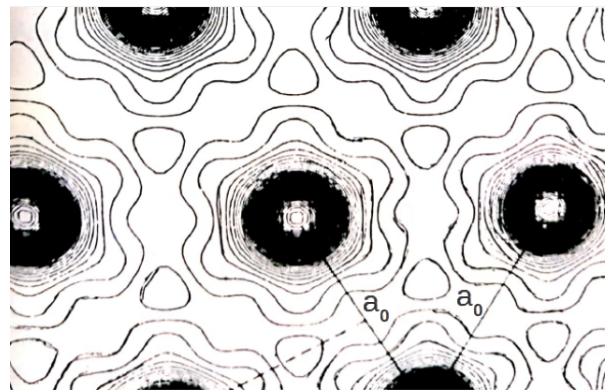
Ausgehend von bekannter Literatur, soll dieses Kapitel nur wesentliche Überlegungen diskutieren, die als weitere Grundlage genutzt werden. Für Hintergrundwissen über die Supraleitung, wird stattdessen auf (H. W. Weber & Hittmair, 1979) verwiesen.

Flusslinien im Kontext der Simulation

Simulationsprinzip. Betrachtet wird eine zweidimensionale, unendlich ausgedehnte Anordnung von Flusslinien, im Stile eines Abrikosov-Gitters. Dafür geht das Modell von einem rechteckigen Bereich aus, welches dann, mithilfe periodischer Randbedingungen, omnidirektional in der Ebene fortgedacht wird. Beginnend bei einem reinen, hexagonalen Gitter, werden manche Flusslinien stationär gepinnt, um dann schrittweise eine externe Kraft an die Anordnung anzulegen. Dadurch entstehen in weiterer Folge die Verschiebungen und Versetzungen.



(a) STM-Bild eines Abrikosov-Gitters
(Essmann & Träuble, 1967)



(b) Räumliche Verteilung des Magnetfeldes
(H. Weber & Riegler, 1973)

Abbildung 1. Abrikosov-Gitter und die Magnetfeldverteilung darin

Ein reales Flussliniengitter ist in Abbildung 1 dargestellt. Daneben schematisch die räumliche Verteilung der Magnetfeldstärke, inklusive dem Abstand a_0 zwischen den Vortices.

Einheiten. Wie auch das Simulationsprogramm selbst, bedient sich diese Arbeit weitestgehend an einem, angepassten, Einheitensystem.

Längen werden als Vielfaches der *Londonsche Eindringtiefe* des Supraleiters *YBCO* angegeben. (Sun et al., 1987)

$$[L\ddot{a}nge] = \tilde{\lambda} \approx 1.4 \cdot 10^{-7} [\text{m}] \quad (1)$$

Ebenso sind Energien in Einheiten von

$$[Energie] = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\tilde{\lambda}^2\mu_0} \approx 1.22 \cdot 10^{-10} [\text{V A s}] \quad (2)$$

geschrieben. Der Vorfaktor entstammt dabei der Berechnung der Wechselwirkungsenergie zwischen Flusslinien (Brandt & Das, 2010).

Damit lässt sich, zum Beispiel, der Abstand zwischen Flusslinien im Gitter schreiben als:

$$a_0 = 0.349214 [\tilde{\lambda}m] \approx 4.9 \cdot 10^{-8} [m] \quad (3)$$

Berechnung der Stromdichte. Für die Berechnung der Stromdichte zwischen zwei Flusslinien, wird von dem Verhältnis $\frac{\Delta E_{ad}^{WW}}{\Delta x_{ad}}$ ausgegangen. Der Zähler beschreibt die Differenz zweier Adjazenten in Energie, welche durch Wechselwirkung mit anderen Flusslinien entsteht. Dazugehörend ist der Nenner der Abstand der beiden Adjazenten zueinander.

Um daraus die Größenordnung der Stromdichte abzuschätzen, wird die folgende Argumentation verwendet. Für die *Energiedichte* $w_{mag} \sim BH$, wird das *Magnetfeld* B aus dem Integral über die Fläche der Flusslinie berechnet. Dabei entspricht der Fluss einer Flusslinie gerade einem *Flussquant*.

$$\iint_{Flusslinie} B dA = \Phi_0 = \frac{h}{2e} [\text{T m}] \quad (4)$$

In weiterer Folge erhält man, unter optimalen Symetriebedingungen, für die Energie pro Länge $\frac{E}{L\ddot{a}nge} \sim \Phi_0 H$. Für die Stromdichte J wird schlussendlich, mithilfe der 4.

Maxwell-Gleichung, genähert:

$$J \approx \frac{\Delta H}{\Delta x} \sim \frac{\Delta E_{ad}}{\Phi_0 \Delta x} [A m^{-2}] \quad (5)$$

Entstammen die Ausgangswerte des, vorher definierten, Einheitensystems, rechnet man um nach SI:

$$J \sim 10^{12} \cdot \frac{\Delta E_{ad}}{\Delta x} [Am^{-2}] \quad (6)$$

Mit dieser Formel können nun die Ergebnisse aus `ad_analyze` direkt abgeschätzt werden.

Vergleich mit dem Paarbrechungsstrom. Für eine Berechnung des Paarbrechungsstromes existieren mehrere Möglichkeiten, die sich jedoch in der gleichen Größenordnung bewegen (Kunchur, 2019). Diese wird, zum Beispiel, durch die *Abschätzung nach London* wiedergegeben (Matsushita & Kiuchi, 2019):

$$J_d(T) = \frac{H_c(T)}{\lambda(T)} \quad (7)$$

Mit $\tilde{\lambda}$ und $H_c(T) = 10^6 [Am^{-1}]$ ergibt sich daraus die grobe Einschätzung:

$$J_d \sim 10^{13} [Am^{-2}] \quad (8)$$

Dafür wird $B = \mu_0 H \approx 1 [T]$ verwendet, einem Wert, der der Simulation entstammt.

Delaunay Triangulation und bestehende Implementierungen

Das Auffinden der nächsten Nachbarn zu einem Punkt, ist ein breit behandeltes Problem der Informatik und der Graphentheorie. Als gängige Lösung gilt das Erstellen einer *Delaunay-Triangulation*, beziehungsweise des dualen Graphen dazu, dem *Voronoi-Diagramm* (Klein, 2006). Eine beispielhafte Darstellung dieses Zusammenhangs findet sich in Abbildung 2, entnommen (L., do Rego & Araujo, 2010).

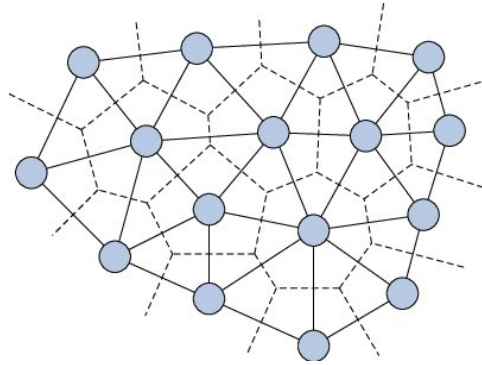


Abbildung 2. Delaunay Triangulation und Voronoi-Diagramm (L. et al., 2010)

Die in dieser Arbeit betrachteten Anordnungen, unterliegen indes zusätzlich periodischen Randbedingungen, das Gebiet aus betrachteten Flusslinien setzt sich in der Ebene periodisch fort. Diese periodischen Randbedingungen entsprechen dabei genau den Eigenschaften eines zweidimensionalen flachen Torus (Zeidler, 2012).

Fertige Programme für die Triangulation unter periodischen Randbedingungen sind frei zugänglich, als Beispiel sei auf (Kruithof, 2020) unter dem Projekt *CGAL* verwiesen. Bei diesem Programm werden neun Kopien des ursprünglichen Bereichs generiert, die dann in einem 3x3 Muster aufgelegt werden. Eine Modifikation, von Unabhängigen, kann das System auf acht Kopien verringern (Bogdanov, Teillaud & Vegter, 2012). Nichtsdestotrotz führen beide Versionen zu einer Erhöhung der Anzahl an Punkte um knapp eine Größenordnung. Das garantiert für alle Spezialfälle eine vollständige Triangulation, ist aber für die, in dieser Arbeit betrachteten, regelmäßigen Flussliniengitter ineffizient. Es sei erwähnt, dass diese Delaunay Triangulationen mit $\mathcal{O}(n \log n)$ skalieren (Zhou & Jones, 2005).

Alternativ wird in dieser Arbeit eine 2D Triangulation ohne implementierter Randbedingung verwendet, um die Vervielfachung der Punkte, zumindest teilweise, zu umgehen. Stattdessen wird die Regelmäßigkeit des Flussliniengitters ausgenutzt, um mit einer lokalen Translation diesen Umstand signifikant zu limitieren. Als zugrundeliegende Triangulation dient das, unter MIT Lizenz erschienene, Github Programm **delabella**. Für eine genaue Dokumentation, sowie Beschreibung der Funktionsweise, sei auf (msokalski, 2018) verwiesen. Allerdings basiert, vor allem die Logik von, **delabella**

wiederum selbst auf einem Algorithmus, beschrieben in (Sinclair, 2010). Laut eigener Dokumentation ist **delabella** schneller als andere erwähnte Alternativen, was einem eigenen, nicht-repräsentativen Test standhielt. Die primäre Begründung zugunsten von **delabella** liegt indes in der zugänglichen und praktischen Anwendung für die Zwecke, wie sie in Kapitel *Programm zur Analyse: **ad_analyze*** beschrieben sind.

Methodik

Zur effektiven Analyse wurde das Programm `ad_analyze` direkt in die C++ Simulation `fsim` von, und um, Prof. Franz Sauerzopf, integriert. Als Konsequenz nutzt `ad_analyze` bestehende Funktionen sowie generierte Daten aus `fsim` für seine Tätigkeiten.

Analysierte Daten

Sämtliche Funktionen aus `ad_analyze` wurden direkt anhand des simulierten Flussliniengitters aus `fsim` getestet. Gleiches gilt auch für die, in dieser Arbeit, präsentierten Resultate.

Spezifischer wurden die Ergebnisse der Funktionen `relax` und `relax_step` als Input für die Analyse verwendet. Diese Funktionen erzeugen, ausgehend von einem regelmäßigen, hexagonalen Gitter, schrittweise Verschiebungen. Eine genauere Dokumentation der Funktionsweisen findet sich in Hausmaninger (2010).

Als Beispiele werden im Folgenden ein

- regelmäßiges Gitter `zwischenf_0_0`
- leichter verschobenes Gitter `zwischenf_2_100`
- stärker verschobenes Gitter `zwischenf_2_600`
- vollständig relaxiertes Gitter `step_1`

hergenommen. Wesentlich ist, dass die `zwischenf_` nur teilweise relaxierte Gitter darstellen, dafür mit höheren externen Kräften. In `step_1` wird eine geringe Kraft angelegt, was erst einen vollen Durchgang der `relax` Funktion ermöglicht, und damit eine vollständige Relaxation.

Für eine genaue Aufstellung der Simulationsparameter wird auf `fsim.cpp` aus (Burger, 2020) verwiesen, sie entsprechen genau den `zwischenf_` Daten.

Um `step_1` zu generieren, müssen die folgenden Änderungen vorgenommen werden:

- `external_force = 0.01`

- `Kforce = 1 * external_force`
- `Kforce* = 0.9`

Die Ausgangsdaten dazu, alle dargestellten Grafiken, sowie weitere Beispiele, sind ebenfalls in (Burger, 2020) hinterlegt.

Genutztes Rechensystem

Die Simulation `fsim` selbst sowie `ad_analyze`, wurden auf einem System der folgenden Konfiguration ausgeführt:

CPU	Intel Core i5-8265U
RAM	8 GB LPDDR3-2133
Storage	512 GB M.2 PCIe 3.0 SSD
OS	Kubuntu x86-64

Insbesondere gilt das für die Benchmarks aus Tabelle 1, aber auch für die generierten Daten, die den erbrachten Resultaten zugrunde liegen.

Programm zur Analyse: `ad_analyze`

Nachdem `fsim` stetig weiterentwickelt wird, besteht die Möglichkeit, dass das in Zukunft auch für `ad_analyze` gelten wird. Darin begründet, sollen die weiterführenden Kapitel es ermöglichen, das Programm zu verstehen, zu modifizieren, und zu verbessern. Für eine vollständige Version von `ad_analyze`, inklusive allen Abhängigkeiten, siehe (Burger, 2020).

Einbettung in die Simulation

Als integrierter Part von `fsim`, nutzt `ad_analyze` an relevanten Stellen die Funktionen daraus, und ist, an manch anderen, auch dadurch limitiert. Im Folgenden wird dieser Zusammenhang abgegrenzt, für ein vollständigeres Verständnis seien aber diese Arbeiten erwähnt, die wesentliche Teile von `fsim` behandeln: Singer (2013), Singer (2011), Hausmaninger (2010).

Eigen-Bibliothek

Um bestmögliche Kompatibilität zu `fsim` zu leisten, wird für weite Teile auf die Bibliothek `Eigen` gesetzt (Guennebaud & Jacob, 2010). Dabei kommen `Eigen::Matrix` als Container zum Einsatz, welche aber ohne weiteres gegen `std::Array` ausgetauscht werden können, ohne die Funktionalität des Programms einzuschränken.

Input

`ad_analyze` ist als Methode der Klasse `vortex_field_direct` definiert, von der aus die folgenden Ausgangsinformationen übernommen werden:

- Koordinaten der Flusslinien, in Form der `Eigen::Matrix xy()`
- Bereich der Flusslinien, als (Höhe, Breite) um den Mittelpunkt (0,0): `(x1, y1)`
- Mittlerer Abstand der Flusslinien, `a0`
- Anzahl der Flusslinien, `flc`
- Optionale Parameter beim Aufruf:

- **region of interest**, als obere/untere Grenze in x/y-Richtung
- Name für Ausgabe-Datein, als string
- extern angelegte Kraft in x-Richtung

Die optionalen Parameter der **region of interest** beschränken dabei nur die Berechnungen der Energien, und die Ausgabe, auf eben jenen Bereich. Sie dienen der Geschwindigkeit, und der Auflösung der graphischen Darstellung aus `ad_plot`.

Struktur von `ad_analyze`

Translation. Die wesentliche Funktion der Translation ist in Abbildung 3 skizziert. Randnahe Punkte werden so kopiert und verschoben, dass am Rand um das ursprüngliche Gebiet eine periodische Weiterführung initiiert wird. Zu beachten ist, dass Eckpunkte dreimal einer Translation unterzogen werden müssen. Die Definition von *Randnahe* ist von Hand geschätzt, auf $1.5 \cdot a_0$.

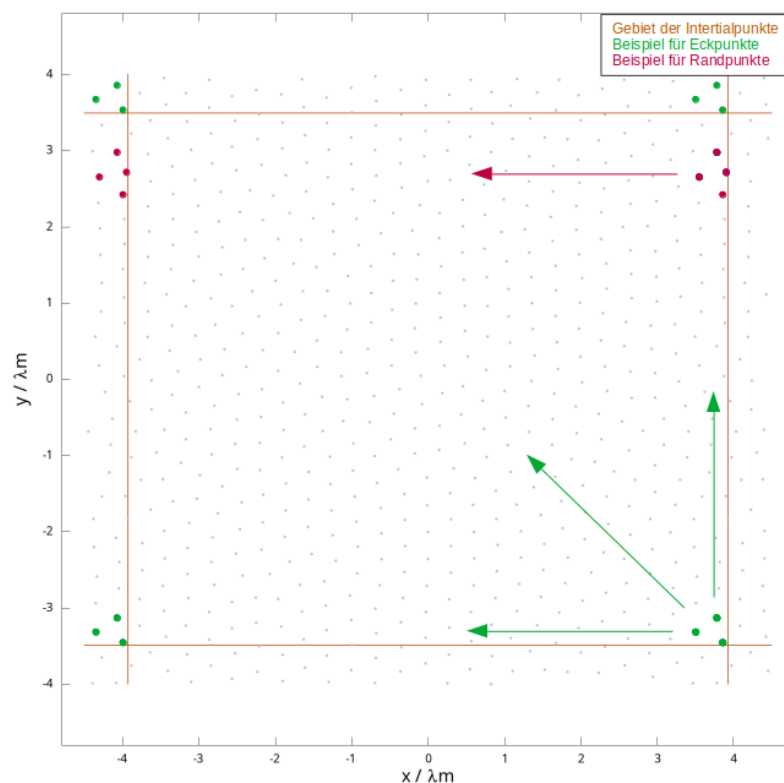


Abbildung 3. Skizze der Translation von Rand- und Eckpunkten

Als Container wird ein `std::Array` mit `struct MyPoint` angelegt, das Format,

das `delabella` verwendet. Dieses `MyPoint` enthält, neben den Koordinaten, auch den Index des Punktes. Für die Initialpunkte entspricht der Index der Reihenfolge, für translatierte Punkte gleicht der Index dem des Initialpunktes, aus dem Ersterer erstellt wurde. Sicherheitshalber wird das Array zuerst für die neun-fache Anzahl der Initialpunkte angelegt, und später auf die eigentlich gebrauchte Größe reduziert.

Triangulation. Das eben erstellte Array aus `myPoint` wird `delabella` übergeben, die eigentliche Triangulation findet vollkommen im Hintergrund statt.

Auf die Ergebnisse der Triangulation wird über einen Zeiger `dela` auf `struct DelaBella_Triangle` zugegriffen. Diese enthält die drei Vertizes des Dreiecks, als Zeiger auf `struct DelaBella_Vertex`. Wichtig hierbei ist, dass die Vertizes die Informationen aus `MyPoint` übernimmt, sodass die Indizes und Koordinaten unverändert bleiben. Für eine ausführlichere Beschreibung siehe `delabella.h`, aus (msokalski, 2018).

Im Folgenden wird einewesentliche Eigenschaft von `delabella` ausgenutzt. Die Vertizes in `DelaBella_Triangle` sind im Uhrzeigersinn angeordnet, dieser Sachverhalt ist in Abbildung 4 skizziert.

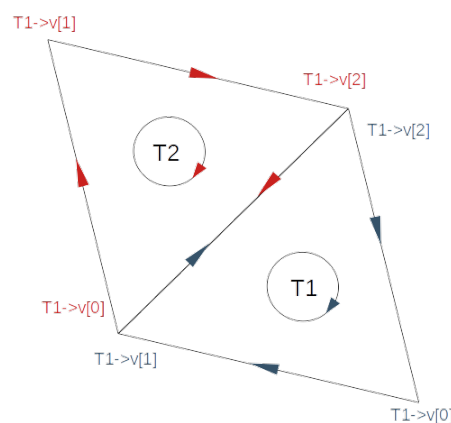


Abbildung 4. Skizze der Ordnung von Vertizes in `delabella`

Adjazenzen. In diesem Abschnitt werden alle `DelaBella_Triangle`, und jeweils alle Vertizes, durchlaufen, um die Information auf geeignete Container zu überschreiben. Dabei wird das, eben erwähnte, zyklische Verhalten der Vertizes dazu verwendet, um jeden Adjazent zu jedem Punkt zu notieren. Jede Dreieckskante wird zwei Mal verwertet: A ist Adjazent von B, B ist Adjazent von A.

Dadurch entstehen die folgenden Container:

- **adIndex** speichert die Indices der adjazenten Punkte. Genützt wird das später primär durch die **calcWW** Funktion.
- **adNum** enthält die Anzahl der Adjazenten zu jedem Punkt, was in diversen Schleifen als obere Schranke dient.
- **adVec** notiert Vektoren zu den Adjazenten. Daraus wird die Auslenkung in Richtung der Adjazenten realisiert, und der Abstand zwischen den Punkten errechnet.

Energien. Für die Berechnung der Energien, die durch die Wechselwirkung der Flusslinien entsteht, wird die Funktion **calcWW** aus **fsim** genutzt. Aufgerufen wird sie mit den Indizes zweier Punkte, aus denen sie die Wechselwirkung errechnet. Zu beachten ist, dass die Reihenfolge des Aufrufs der Reihenfolge in **xy()** gleichen muss. Für die Berechnung werden auch die Koordinaten in **xy** herangezogen, weswegen etwaige Verschiebungen vorher auf **xy()** überschrieben werden müssen.

Eine wesentliche Stärke von **calcWW** ist, dass automatisch auch die periodischen Fortsetzungen einer Flusslinie mit eingerechnet werden. Daher müssen an dieser Stelle die translatierten Punkte nicht mehr genutzt werden.

In diesem Abschnitt werden auch die Energien, nach einer kleinen Verschiebung eines Punktes, in die Richtung seiner Adjazenten, bestimmt. Dadurch entstehen für jeden Punkt durchschnittlich sechs Verschiebungen, die wiederum (n-1)-Aufrufe von **calcWW** bedingen, n Anzahl der Flusslinien. Nicht zuletzt entspricht das dem wesentlichen Rechenaufwand, der in **ad_analyze** entsteht.

Ausgabe und Darstellung. In **ad_analyze** sind mehrere Möglichkeiten zur visuellen Darstellung der Wechselwirkung zwischen Flusslinien enthalten. Jede Ausgabe findet über eine **.dat** Datei statt. Nachdem die schiere Anzahl, der analysierten Flusslinien, eine direkte Interpretation der Daten erheblich erschwert, sind die Ausgabeformate auf **gnuplot** ausgelegt (Williams & Kelley, 2013). Die entsprechenden **gnuplot** Befehle sind in **ad_plot**, ebenfalls in (Burger, 2020) zu finden.

Resultate

Die Ausgabe aus `ad_analyze` enthält Informationen über drei Sachverhalte. Zum Ersten wird die Triangulation und die Anzahl der Adjazenten dargestellt. Daraus lassen sich Schlüsse über die grundlegende Funktionstüchtigkeit, sowie der Versetzungen und Gitterstruktur ziehen.

Zum Zweiten führt die relative Energiedifferenz zwischen Adjazenten $\frac{\Delta E_{ad}^{WW}}{\Delta x_{ad}}$, über eine Berechnung, zu einer Abschätzung der Stromdichte zwischen zwei Flusslinien.

Zum Dritten stellt die Energieänderung bei einer Auslenkung das Potential der nahen Umgebung dar, was zu einer Interpretation der Beweglichkeit der Flusslinien führt.

Der Übersicht halber sind die graphischen Resultate in Anhang A bis D hinterlegt. Sie entsprechen einem, respektive: nicht -, schwach -, stark verschobenen, und vollständig relaxierten Gitter.

Triangulation und Adjazenten

Die vollständige Triangulation, inklusive der Anzahl der Adjazenten, sind in den Abbildungen 5, 9, 13 dargestellt. Translatierte Punkte sind violett hervorgehoben, wodurch sich die periodische Fortsetzung des regelmäßigen Gitters in Abbildung 5 gut erkennen lässt. Ebenso bestätigt sich die Triangulation am Rand, bei allen Beispielen, als fehlerfrei.

Fünf und sieben gezählte Adjazenten, treten immer paarweise für zwei benachbarte Punkte auf. Singulär tritt in Abbildung 13 ein Punkt mit vier Adjazenten auf, begleitet von zwei Punkte mit je sieben. Weite Teile des Gitters behalten einen versetzungsfreien Zustand bei, ebenso bilden sich ketten-ähnliche Strukturen aus Versetzung aus. Wiederum wechseln sich in Letzterem fünf mit sieben Adjazenten ab.

Energiedifferenz zwischen Adjazenten

Für ein regelmäßiges Gitter, siehe Abbildung 6, ist die Energiedifferenz nahezu null. Eine genauere Inspektion der zugrundeliegenden Daten zeigt eine geringe

Abweichung von $\sim 10^{-8}$.

In Anwesenheit von Verschiebungen, wie in Abbildung 10, treten Differenzen nahe Versetzungen, oder an Stellen des versetzungsfreien, aber dafür unregelmäßigen Gitters auf. Die Größenordnung beträgt $\frac{\Delta E_{ad}^{WW}}{\Delta x_{ad}} \sim 10^{-1}$, wie auch in Abbildung 14. Ebenso entstehen größten Differenzen nahe Versetzungen. Der Abgleich mit der Position der pinning-Zentren zeigt qualitativ eine starke Korrelation zwischen festgehaltenen Flusslinien, Versetzungen, und hohen Energiedifferenzen, dargestellt in Abbildung 12.

Aus der Formel 6 ergibt sich, mit der Größenordnung der relativen Energiedifferenzen, eine Abschätzung für die maximal erreichte Stromdichte im simulierten Gitter:

$$J \sim 10^{12} \cdot \frac{\Delta E_{ad}^{WW}}{\Delta x} \sim 10^{11} [Am^{-2}] \quad (9)$$

Energieänderung bei Auslenkungen

Betrachtet man das regelmäßige Gitter in Abbildung 8, zeigen sich signifikante Schwankungen von $\sim 10^{-2}$, zu absoluten Werten um $\sim 10^{-1}$, zwischen den Richtungen der Auslenkung. Eine Erhöhung der Punkte auf ein Gitter aus **40x34** Flusslinien hat das Ergebnis nicht verändert. Wird die Skala an die Größenordnungen der unregelmäßigen Gitter angepasst, Abbildung 7, verschwinden die Unterschiede zumindest visuell. Die Energiedifferenz ist durchwegs positiv, die Energie ist nach der Auslenkung dementsprechend höher als vorher.

Im Gegensatz dazu sind in Abbildung 15 wesentlich hervorgehobene Punkte zu erkennen. Durch Abbildung 16 sind eben jene Flusslinien als gepinnt identifizierbar. Das gleiche Verhalten ist in Abbildung 11, bei einem schwächer verschobenen Gitter, zu beobachten. Obwohl deutlich geringer in Größenordnung, ist für eine substanzielle Anzahl der Flusslinien die Energie im ausgelenkten Zustand niedriger als im regulären, in beiden Exemplaren. Die meisten rechtsgerichteten Pfeile heben sich positiv, die linksgerichteten negativ, ab.

Vergleichend dazu ist ein, schwach verschobenes, vollständig relaxiertes Gitter in Abbildung 17 demonstriert. Hier zeichnen sich größere Bereiche ab, begrenzt durch

gepinnten Flusslinien. Innerhalb derer ist die Energiedifferenz durchwegs positiv, um die festgehaltenen Flusslinien gilt das nicht.

Benchmarks für `ad_analyze`

Tabelle 1 zeigt beispielhaft je fünf Aufrufe von `ad_analyze` an zufälligen Stellen in `fsim`, für zwei häufig verwendete Konfigurationen.

Beanspruchte Dauer für 520 Punkte in [ms]					Beanspruchte Dauer für 1360 Punkte in [ms]				
Translation	Triangulation	Adjacency	Energies	Output	Translation	Triangulation	Adjacency	Energies	Output
0	1	2	2024	44	0	3	7	9675	153
0	1	2	2064	51	0	4	8	9804	120
0	1	1	1787	63	0	2	3	7792	103
0	0	2	1753	38	0	4	6	7835	145
0	2	2	1840	49	0	4	5	9349	106
Durschnittliche Gesamtdauer: 1951 [ms]					Durschnittliche Gesamtdauer: 9120 [ms]				

Tabelle 1

Benchmarks für `ad_analyze` bei 520 und 1360 Punkten

Verglichen mit den restlichen Abschnitten, nimmt der der Energieberechnung mit $\sim 10^3$ [ms] den, um ein bis vier Größenordnungen, längsten Zeitraum in Anspruch. Die Dateiausgabe dauert in etwa $\sim 10^2$ [ms], die Zeit für Translation, Triangulation, und Adjazenten ist dagegen vernachlässigbar.

Diskussion

Energien zwischen Flusslinien

Flusslinien im regelmäßigen Gitter erscheinen, erwarteter Weise, mit gleicher Energie. Bis auf einen kleinen Rundungsfehler, was als gute Probe aufgefasst wird. Betrachtet man verschobene Gitter, treten in der direkten Umgebung von gepinnten Flusslinien nicht nur Versetzungen, sondern auch die höchsten Energiedifferenzen auf. Naturgemäß treibt die angelegte Kraft die beweglichen Punkte weiter, während die fixierten, energetisch ungünstig, stationär bleiben.

Stromdichte. Dementsprechend entstehen an diesen Stellen, hohe theoretische Stromdichten von $\sim 10^{11} [Am^{-2}]$. Vergleicht man das mit dem Literaturwert $\sim 10^{12} [Am^{-2}]$, ist aber in `fsim` auch lokal der Paarbrechungsstrom nicht überschritten. Somit konnte sich diese Hypothese nicht bestätigen, was indes für `fsim` spricht.

Energie in der nahen Umgebung

Das Verhältnis aus Energiedifferenz zu Abstand, beschreibt effektiv das linearisierte Potential um eine Flusslinie, und ist eng mit der Beweglichkeit verbunden. Als solches kommt es bei dem regelmäßigen Gitter doch zu signifikanten Abweichungen vom erwarteten Ergebnis, dass das Potential omnidirektional homogen sein sollte. An dieser Stelle im Programm tritt keine externe Kraft in Wirkung, welche diese begründen könnte. Die stehende Vermutung ist, dass bei der Berechnung der Wechselwirkungsenergie, unter perfekter Periodizität, kleine Fehler aufsummiert werden. Ein Versuch, diese zu beseitigen, wurde mit einem Gitter aus $\frac{x_{cnt}}{y_{cnt}} = \frac{40}{34} \approx \frac{a_0}{h_0}$ unternommen, was jedoch zu keiner Veränderung führte. Eine Überprüfung würde wohl eingehenden Untersuchungen der Funktion `calcWW` bedürfen.

Auswirkung gepinnter Flusslinien. Unter einer angelegten Kraft zeigen sich die gepinnten Flusslinien besonders deutlich. Sie befinden sich in energetisch ungünstigen Positionen, Minima liegen entgegen der Richtung der Kraft. Durch die schrittweise Natur der `relax_step` Funktion, befinden sich auch die freien Flusslinien nicht in einem lokalen Minimum der Energie, und sie sinkt tendenziell ebenso von der

Kraft weg.

Das Bild ändert sich qualitativ bei der Betrachtung eines relaxierten Gitters, nach einem Durchgang der `relax` Funktion. Flusslinien außerhalb der direkten Umgebung solcher, die gepinnt sind, befinden sich in einem Minimum und sind fest gebunden. Nahe gepinnter Flusslinien reicht die Wechselwirkungsenergie zwischen den Punkten nicht aus, um sie zu binden. Eine mögliche Erklärung ist, dass gepinnte Flusslinien das äußere Magnetfeld teilweise abschirmen, wodurch zusätzlich eine Sogwirkung in Richtung schwacher Feldstärke entsteht. Tiefer gehende Rechnung zur Abschätzung dieses Phänomens könnten das womöglich bestätigen.

Fazit und Ausblick zu `ad_analyze`

Mithilfe von `ad_analyze` konnte die Hypothese um das Überschreiten des Paarbrechungsstroms verneint werden. Gleichzeitig konnte, visuell, der starke Zusammenhang zwischen dem lokalen Potential und der Beweglichkeit demonstriert werden. Weiterführende optische Analysen zeigen sich als schwer, für Untersuchungen der Beweglichkeit auf Größenordnungen des Gitters, müssten wohl Berechnungen aus den Rohdaten heraus gemacht werden. Aus der Triangulation heraus zeigt sich Ansatz der Translation als geeignet und erfolgreich. Es entstand eine simple Implementation, ohne signifikanten Rechenaufwand.

Generell beschränkt der aktuelle Fokus, auf graphischer Ausgabe, die Aussagekraft auf, fast ausschließlich, qualitative Beobachtungen. So ist auch die Datenstruktur der `.dat` effektiv auf `gnuplot` zugeschnitten, und als solches ineffizient und für Berechnungen ungeeignet. Zusätzlich ist `ad_analyze`, im aktuellen Stadium, ein abgekapselter Teil von `fsim`, was jedoch eine hohe Kompatibilität und Portabilität garantiert.

Um weiter auf `ad_analyze` aufzubauen, ist es vermutlich empfehlenswert, direkt bei der Information über die Adjazenzen des Gitters anzusetzen und diese weiter, an mächtigere Stellen der Simulation, zu migrieren. Untermauert wird das durch den wesentlichen Zeit- und Rechenaufwand der Energieberechnung, der der ungeeigneten

Implementation mit `calcWW` entstammt. Zielgerichtete Berechnung könnten womöglich die `Eigen`-Struktur nutzen, um `ad_analyze` wirksam anzuwenden.

Abbildungsverzeichnis

1	Abrikosov-Gitter und die Magnetfeldverteilung darin	2
2	Delaunay Triangulation und Voronoi-Diagramm (L. et al., 2010)	5
3	Skizze der Translation von Rand- und Eckpunkten	10
4	Skizze der Ordnung von Vertizes in <code>delabella</code>	11
5	Triangulation und Anzahl der Adjazenten - regelmäßig	22
6	Energiedifferenz zwischen Adjazenten - regelmäßig	22
7	Energieänderung bei Auslenkungen, angepasst - regelmäßig	23
8	Energieänderung bei Auslenkungen - regelmäßig	23
9	Triangulation und Anzahl der Adjazenten - leichter verschoben	24
10	Energiedifferenz zwischen Adjazenten - leichter verschoben	24
11	Energieänderung bei Auslenkungen, mit pinning - leichter verschoben . .	25
12	Energiedifferenz zwischen Adjazenten, mit pinning - leichter verschoben	25
13	Triangulation und Anzahl der Adjazenten - stärker verschoben	26
14	Energiedifferenz zwischen Adjazenten - stärker verschoben	26
15	Triangulation und Anzahl der Adjazenten - stärker verschoben	27
16	Energiedifferenz zwischen Adjazenten, mit pinning - stärker verschoben .	27
17	Energieänderung bei Auslenkungen, mit pinning - relaxiert	28

Tabellenverzeichnis

1	Benchmarks für <code>ad_analyze</code> bei 520 und 1360 Punkten	15
---	---	----

Literatur

- Bogdanov, M., Teillaud, M. & Vegter, G. (2012). Covering spaces and Delaunay triangulations of the 2d flat torus..
- Brandt, E. H. & Das, M. P. (2010). Attractive vortex interaction and the intermediate-mixed state of superconductors.
- Burger, A. (2020). ad_analyze.. Zugriff auf <https://github.com/BurgerAndreas/adanalyze>
- Essmann, U. & Träuble, H. (1967). The direct observation of individual flux lines in type ii superconductors. *Physics letters A*, 24 (10).
- Guennebaud, G. & Jacob, B. (2010). *Eigen v3*. <http://eigen.tuxfamily.org>.
- Hausmaninger, T. (2010). Untersuchung von Flussliniengittern im Supraleiter mittels numerischer Simulation. *Projektarbeit TU Wien*.
- Klein, R. (2006). *Algorithmische Geometrie*. Springer-Verlag GmbH. Zugriff auf https://www.ebook.de/de/product/22005535/rolf_klein_algorithmische_geometrie.html
- Kruithof, N. (2020). 2D Periodic Triangulations. In *CGAL User and Reference Manual* (5.0.2 Aufl.). CGAL Editorial Board. Zugriff auf <https://doc.cgal.org/5.0.2/Manual/packages.html#PkgPeriodic2Triangulation2>
- Kunchur, M. N. (2019). Evaluating Superconductors through Current Induced Depairing. *Condensed Matter*. doi: 10.3390/condmat4020054
- L., V., do Rego, R. L. M. E. & Araujo, A. F. R. (2010). The self-organizing approach for surface reconstruction from unstructured point clouds. In *Self-organizing maps*. InTech. doi: 10.5772/9180
- Matsushita, T. & Kiuchi, M. (2019). Depairing current density in superconductors. *Applied Physics Express*, 12 (6). doi: 10.7567/1882-0786/ab1f94
- msokalski. (2018). delabella.. Zugriff auf <https://github.com/msokalski/delabella>
- Sinclair, D. A. (2010). S-hull: a fast radial sweep-hull routine for Delaunay triangulation.. Zugriff auf <http://s-hull.org/>
- Singer, S. (2011). Erzeugung von Versetzungen im Flussliniengitter von

Typ-II-Supraleitern. *Projektarbeit TU Wien*.

Singer, S. (2013). Numerische Simulation der Eigenschaften von Versetzungen im supraleitenden Flussliniengitter. *Diplomarbeit TU Wien*.

Sun, J. Z., Webb, D. J., Naito, M., Char, K., Hahn, M. R., Hsu, J. W. P., ...

Kapitulnik, A. (1987). Superconductivity and magnetism in the high- T_c superconductor YBaCuO. *Phys. Rev. Lett.*, 58. doi: 10.1103/PhysRevLett.58.1574

Weber, H. & Riegler, R. (1973). Measurement of the flux density distribution in type-II superconductors with several micro-field-probes. *Solid State Communications*, 12 (2).

Weber, H. W. & Hittmair, O. (1979). Supraleitung. Thiemig.

Williams, T. & Kelley, C. (2013). *Gnuplot 4.6: an interactive plotting program*. <http://gnuplot.sourceforge.net/>.

Zeidler, E. (2012). *Springer-Handbuch der Mathematik I*. Springer Fachmedien Wiesbaden. Zugriff auf https://www.ebook.de/de/product/21314957/springer_handbuch_der_mathematik_i.html

Zhou, S. & Jones, C. B. (2005). HCPO: an efficient insertion order for incremental delaunay triangulation. *Information Processing Letters*. doi: 10.1016/j.ipl.2004.09.020

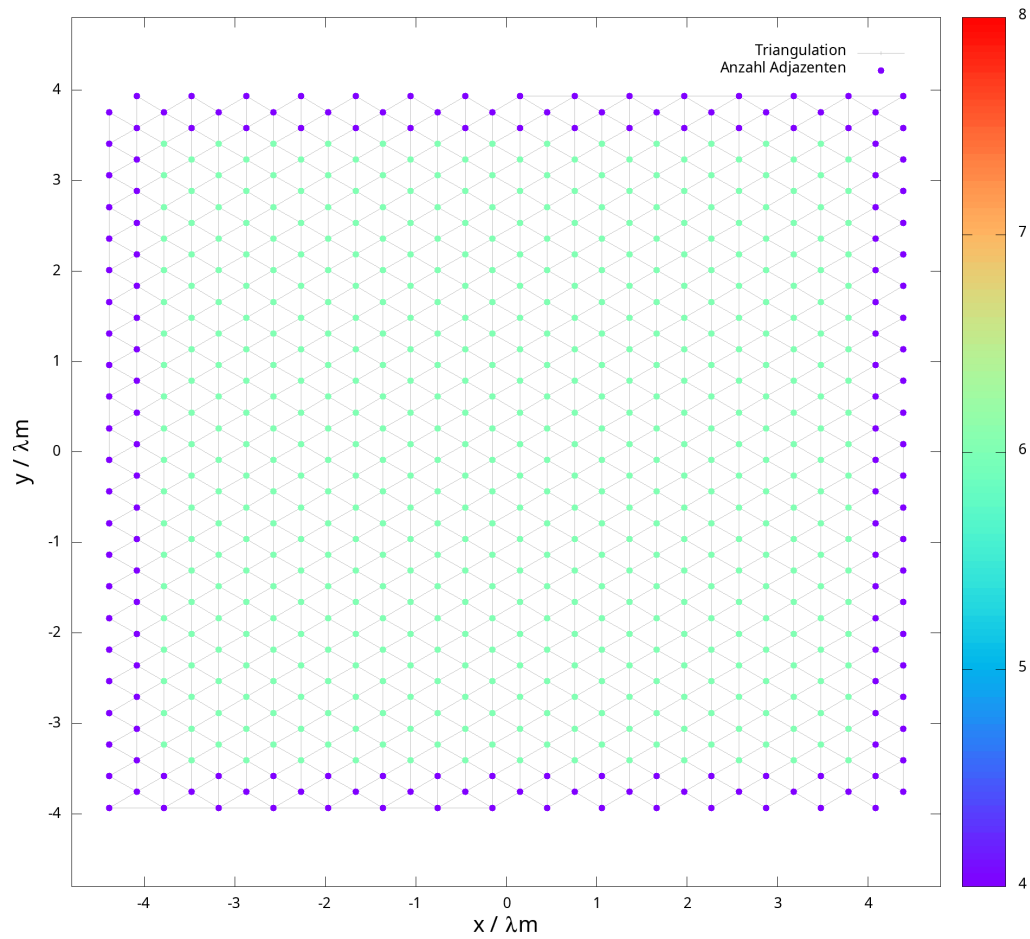


Abbildung 5. Triangulation und Anzahl der Adjazenten - regelmäßig

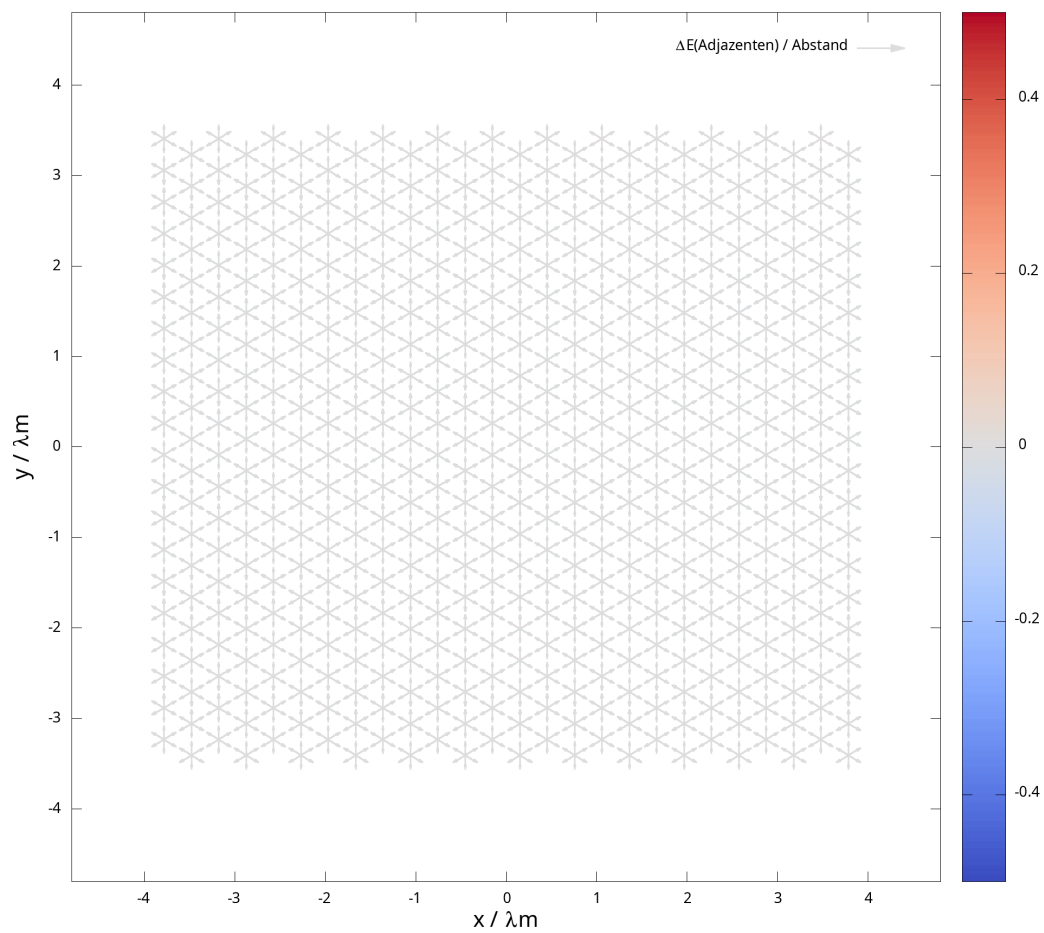


Abbildung 6. Energiedifferenz zwischen Adjazenten - regelmäßig

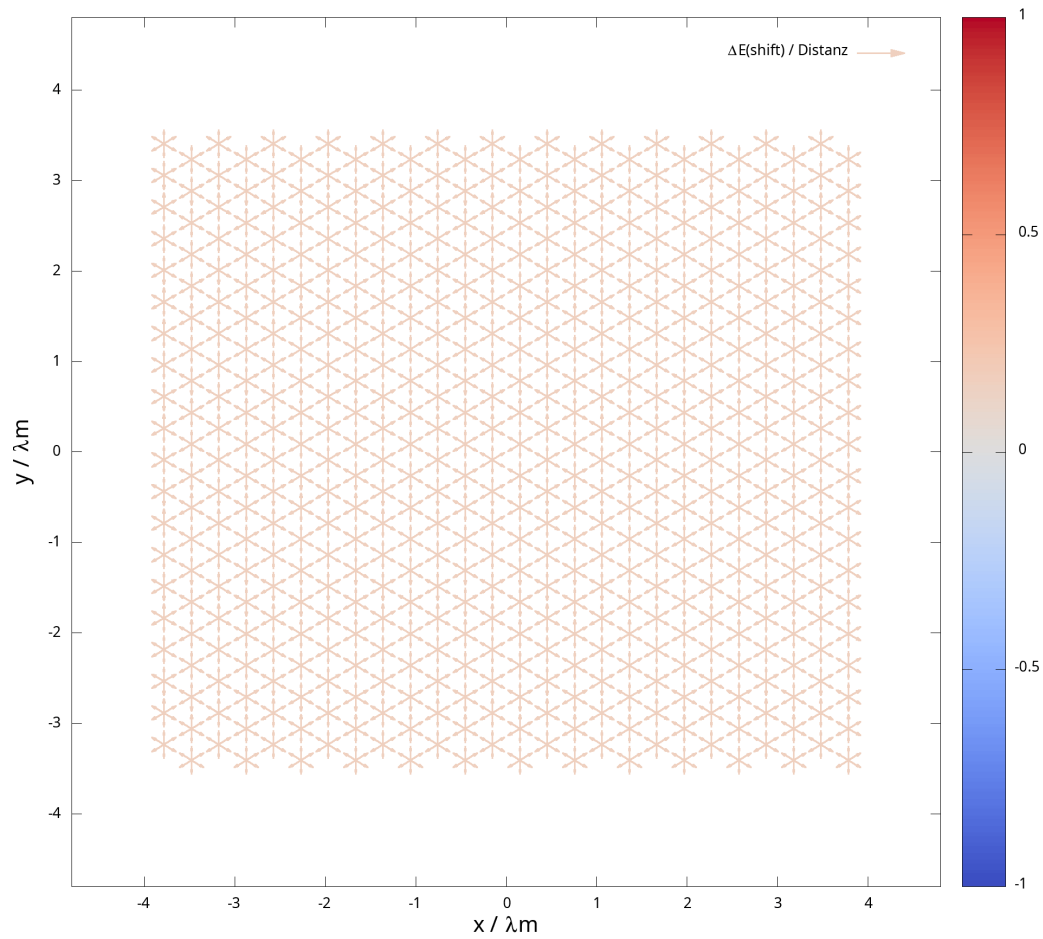


Abbildung 7. Energieänderung bei Auslenkungen, angepasst - regelmäßig

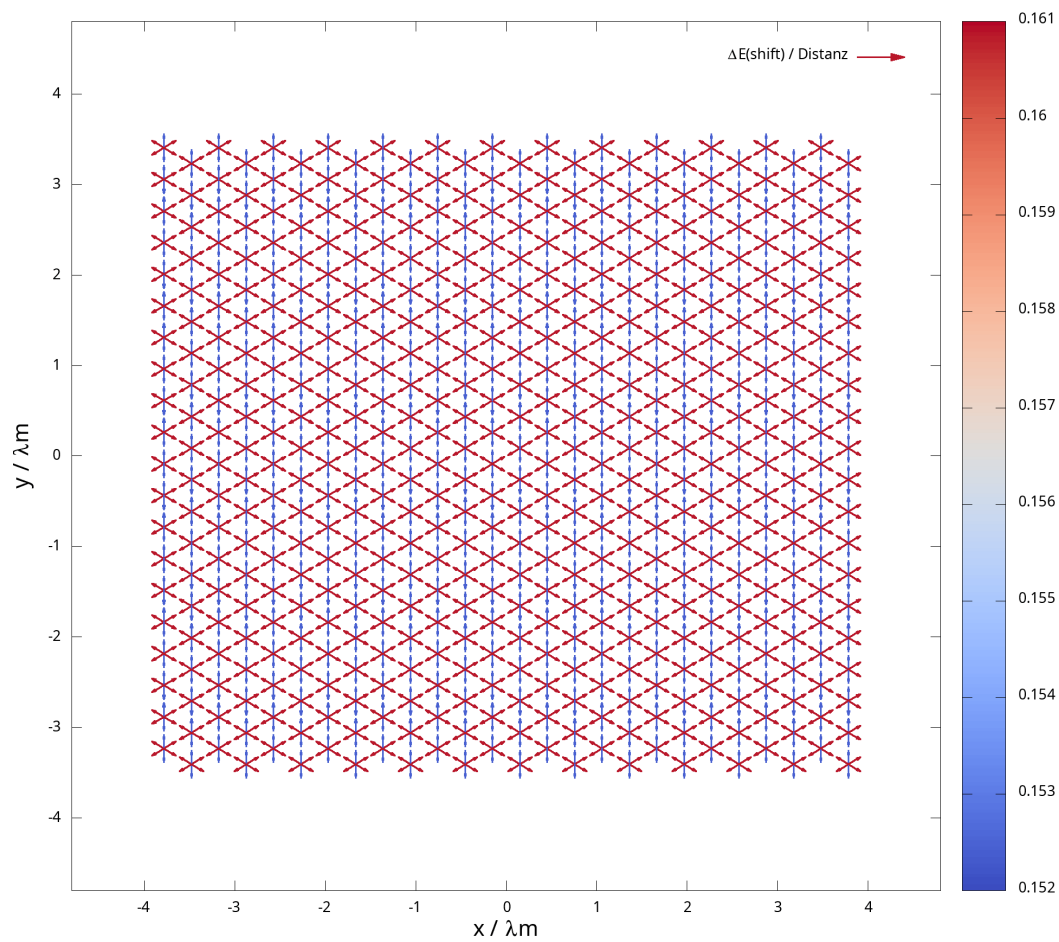


Abbildung 8. Energieänderung bei Auslenkungen - regelmäßig

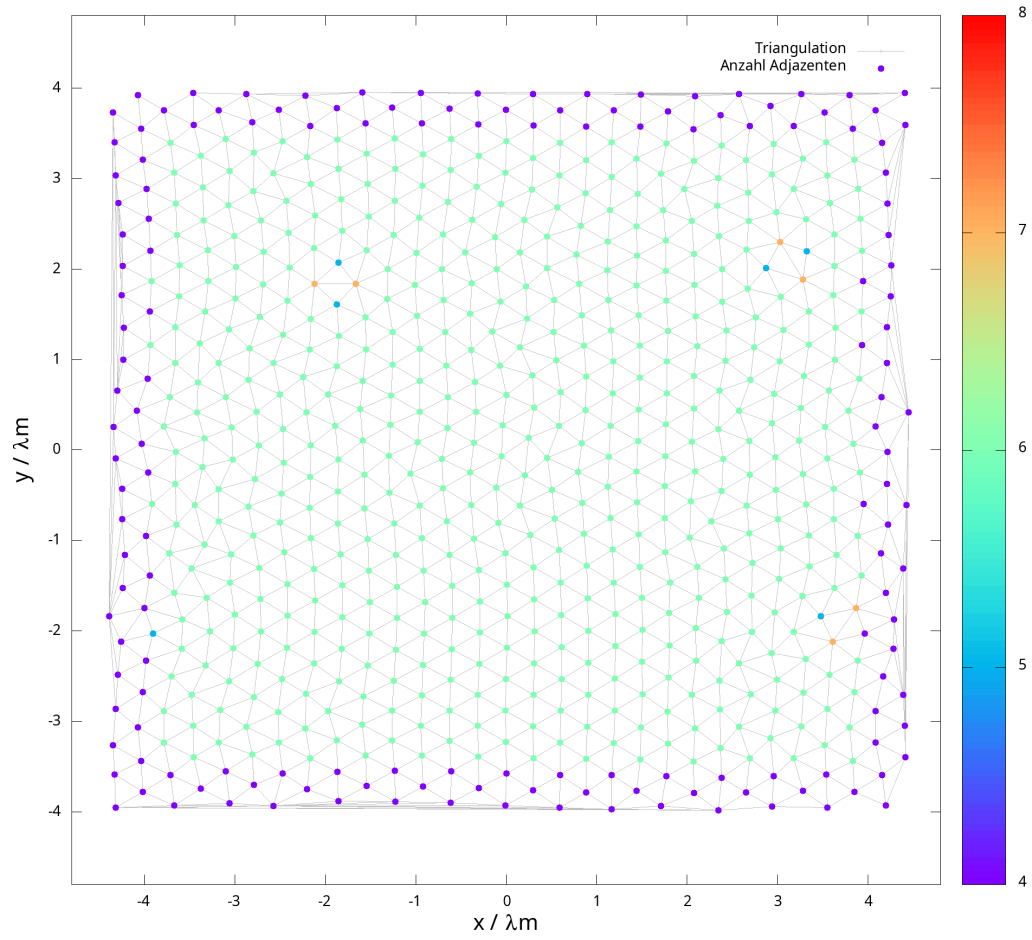


Abbildung 9. Triangulation und Anzahl der Adjazenten - leicht verschoben

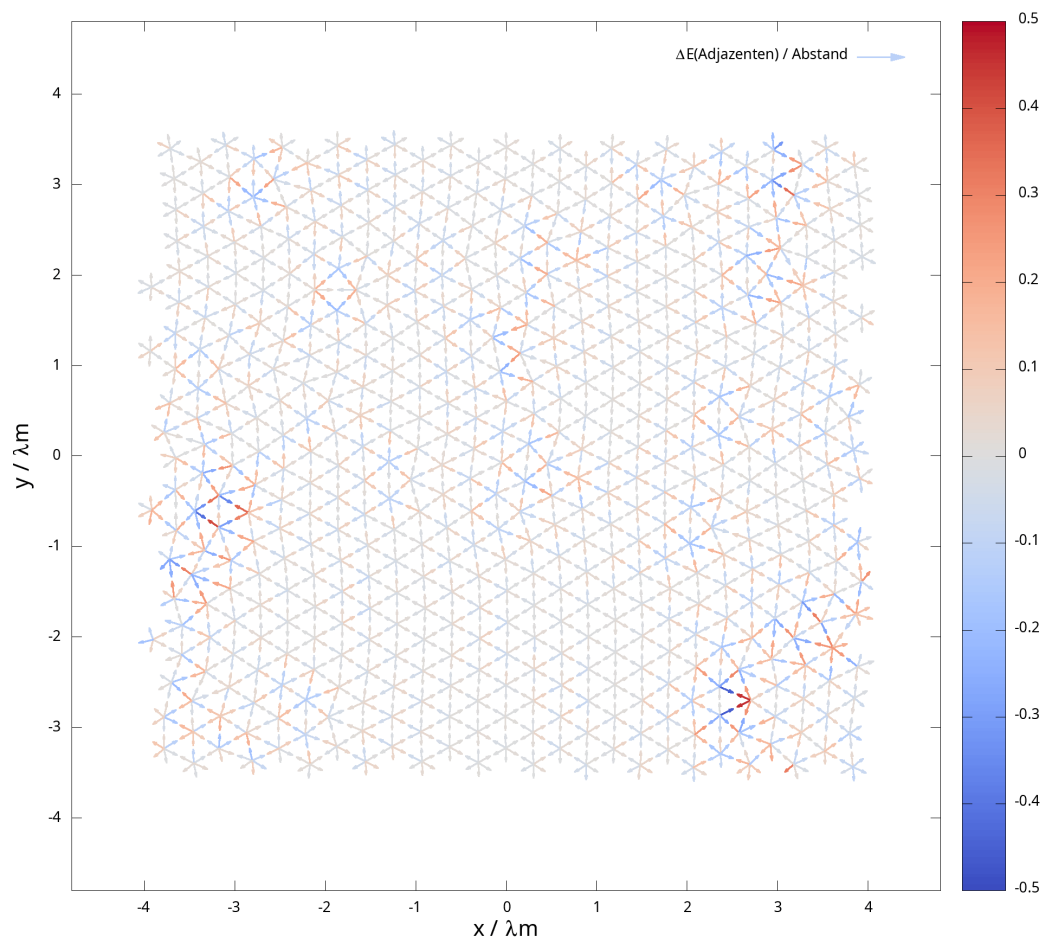


Abbildung 10. Energiedifferenz zwischen Adjazenten - leicht verschoben

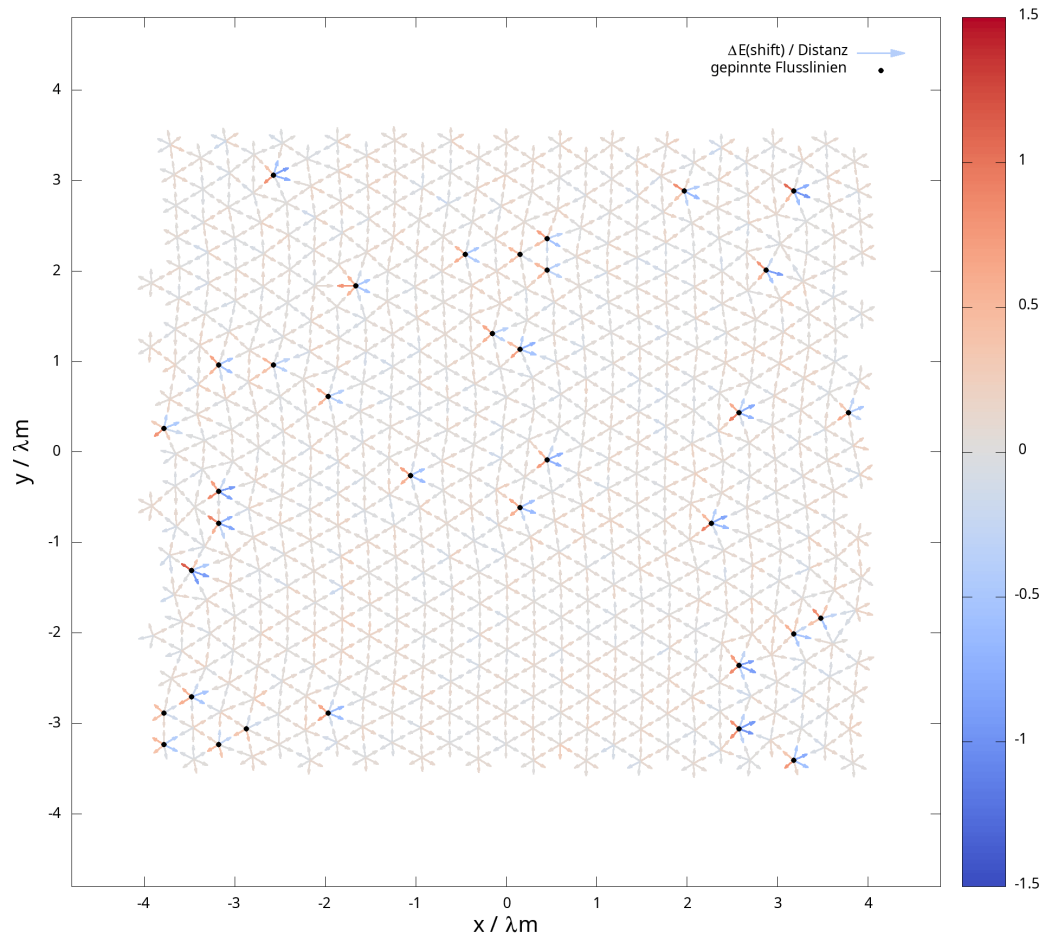


Abbildung 11. Energieänderung bei Auslenkungen, mit pinning - leichter verschoben

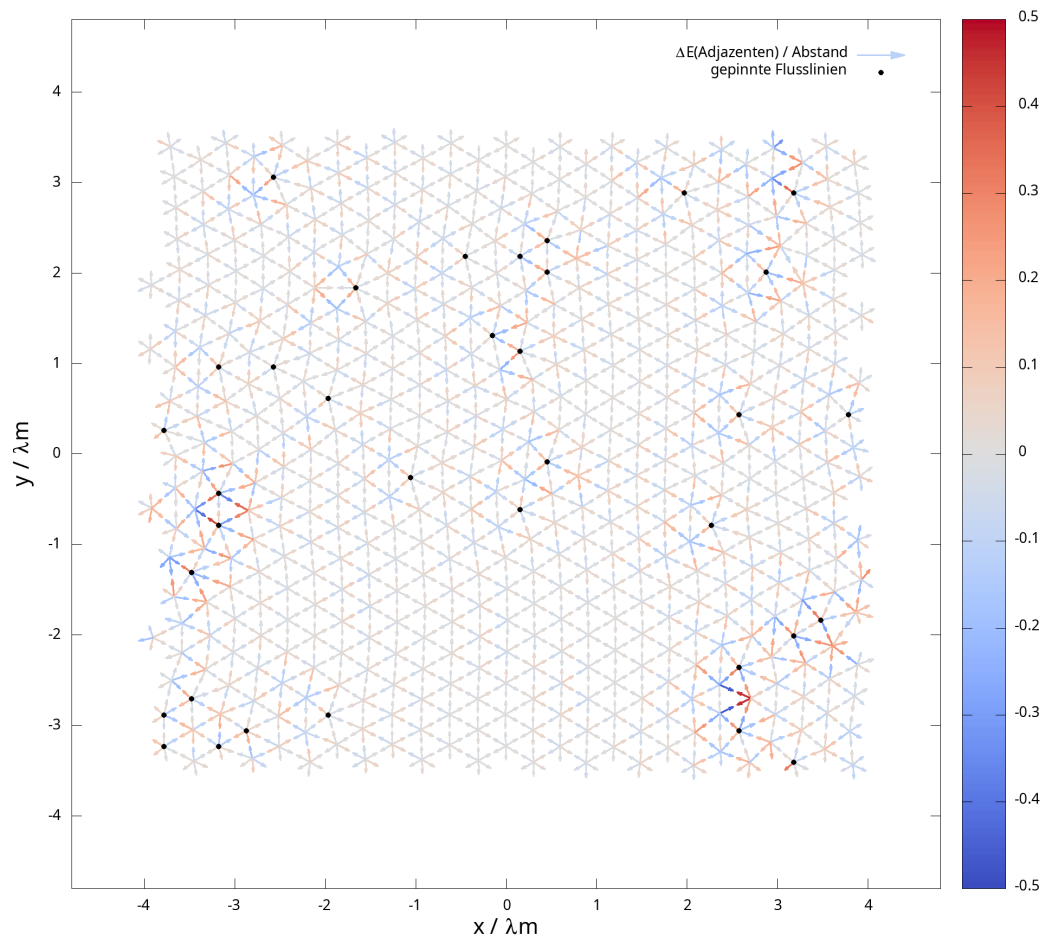


Abbildung 12. Energiedifferenz zwischen Adjazenten, mit pinning - leichter verschoben

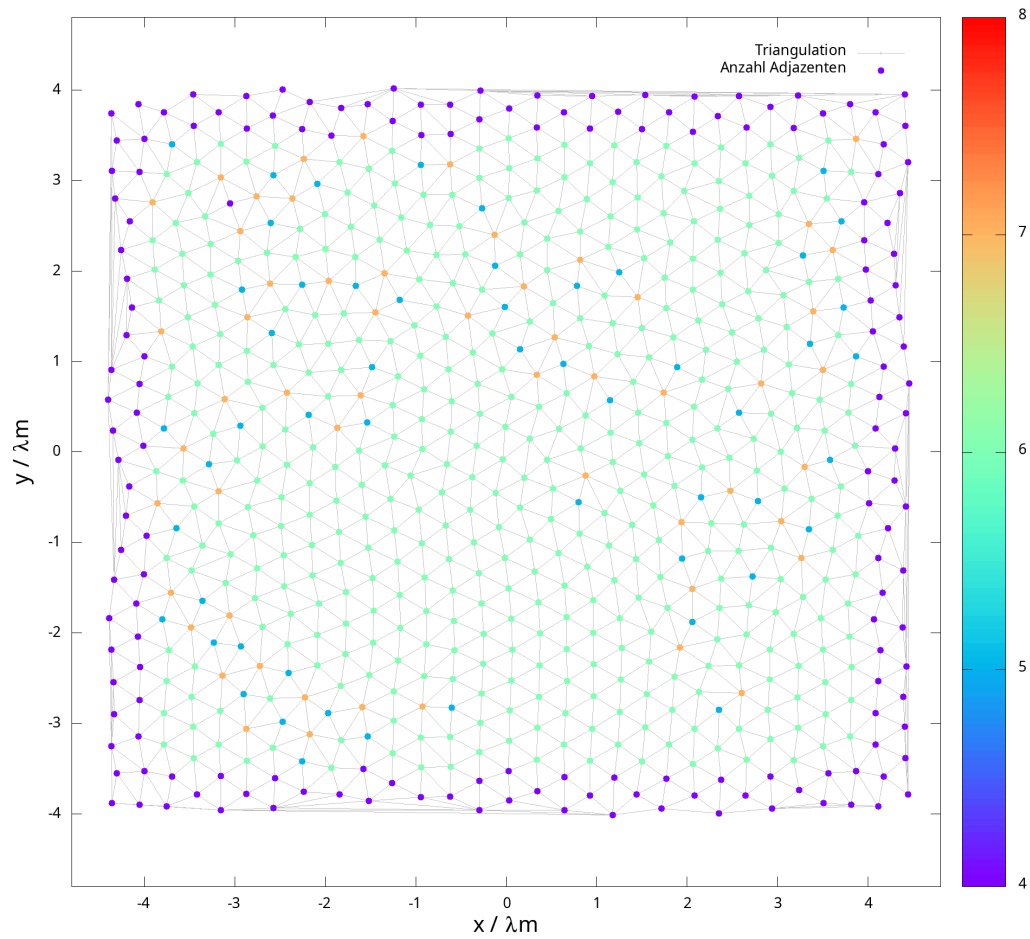


Abbildung 13. Triangulation und Anzahl der Adjazenten - stärker verschoben

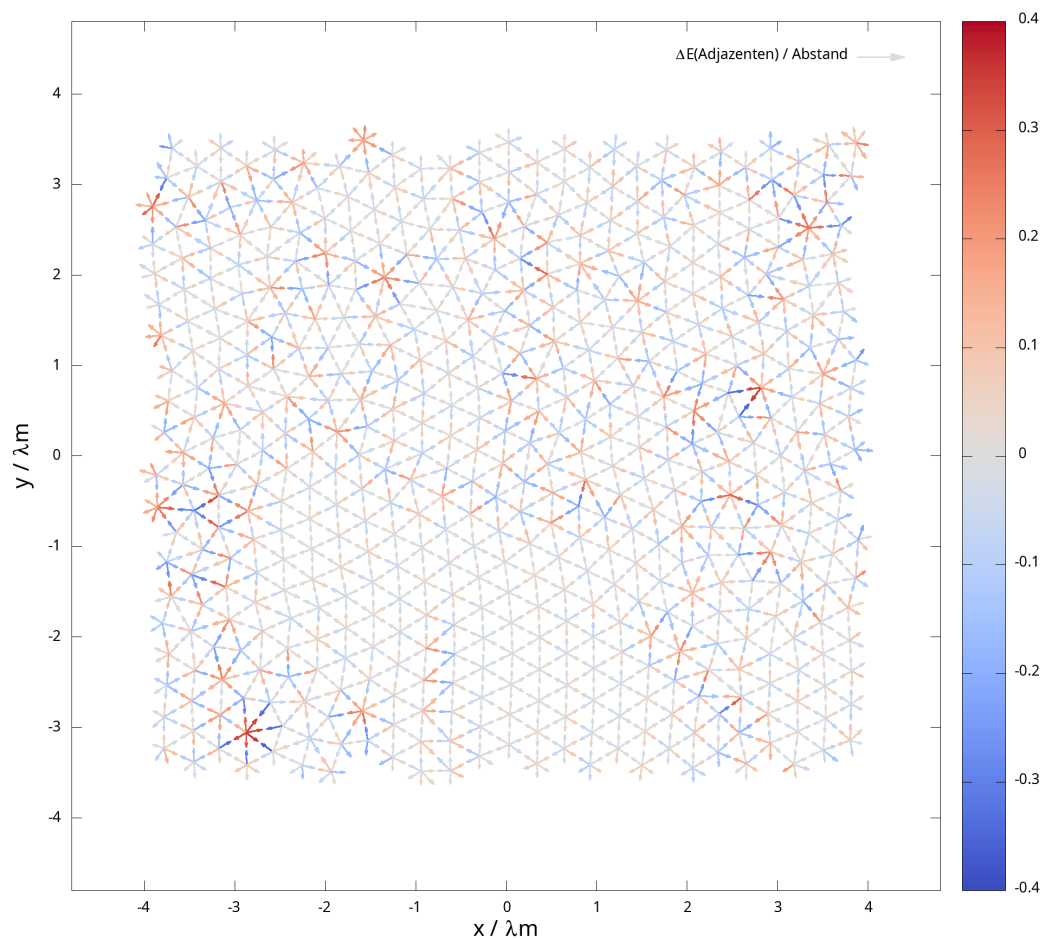


Abbildung 14. Energiedifferenz zwischen Adjazenten - stärker verschoben

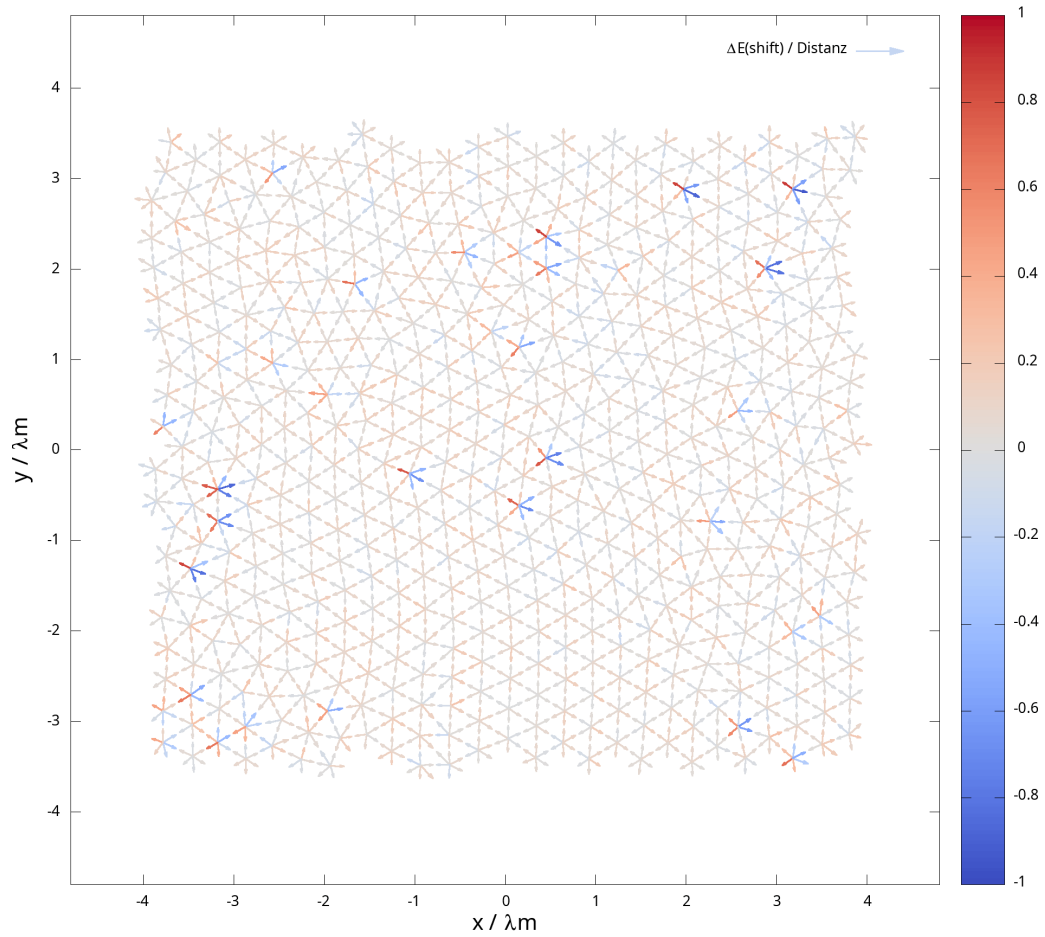


Abbildung 15. Triangulation und Anzahl der Adjazenten - stärker verschoben

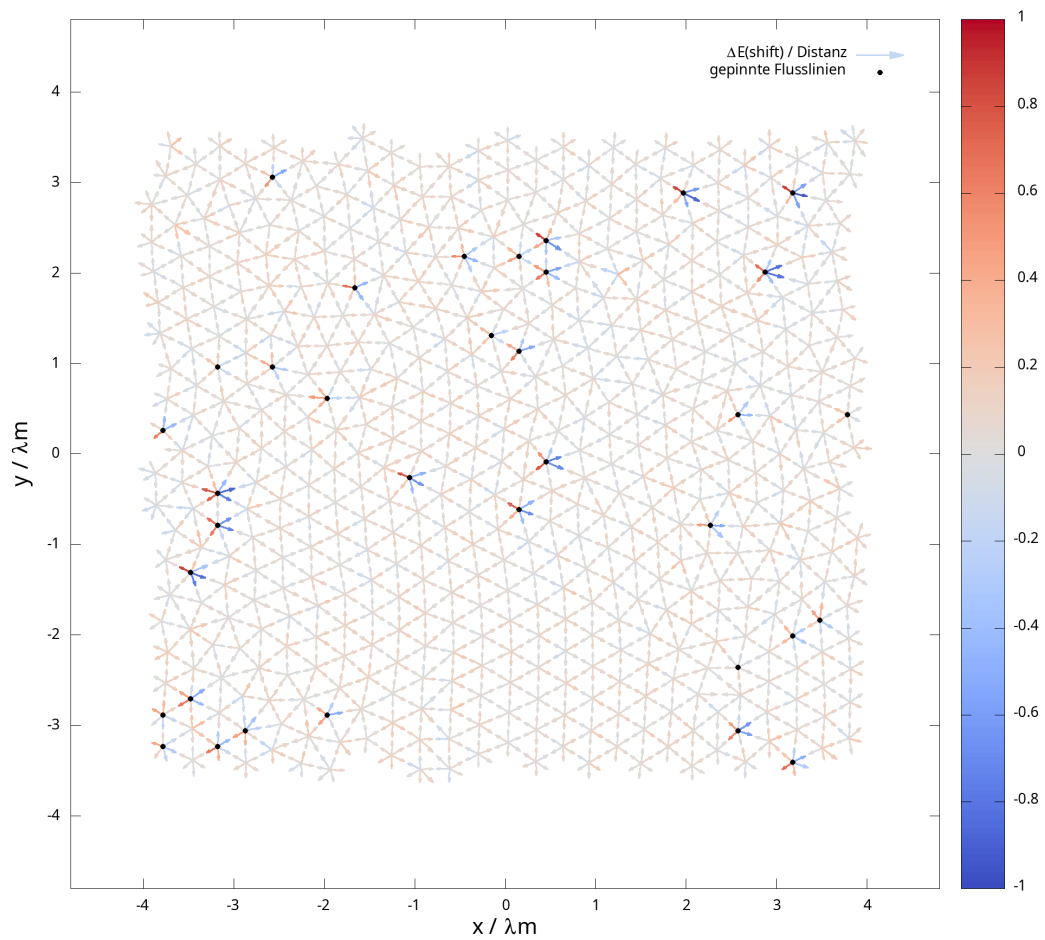


Abbildung 16. Energiedifferenz zwischen Adjazenten, mit pinning - stärker verschoben

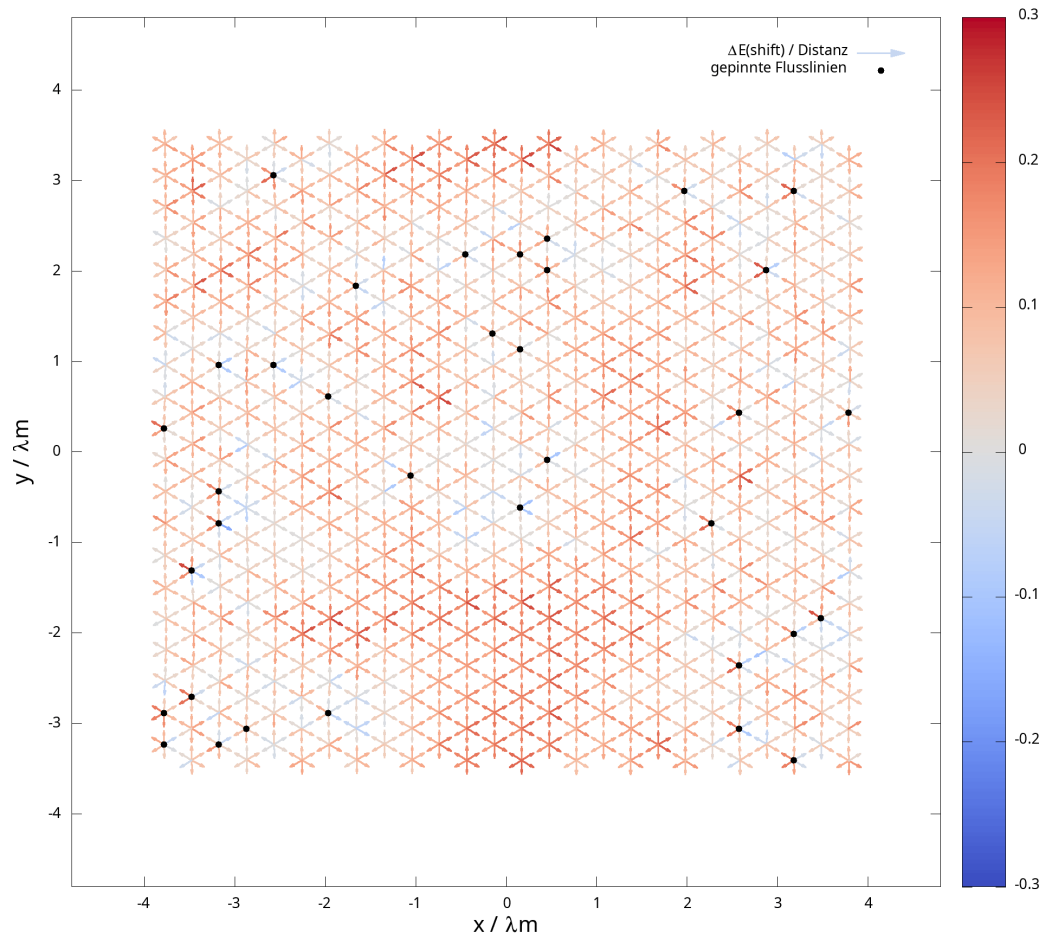


Abbildung 17. Energieänderung bei Auslenkungen, mit pinning - relaxiert

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt und die den benutzten Quellen wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht.

Ort, Datum

Unterschrift

Andreas Burger