Kurzbeschreibung: jceval (v20101013)

Kompilieren:

Das Programm (jceval.cpp) sollte auf die übliche Art ohne Probleme kompilierbar sein.

Z.B. in "Linux": "g++ jceval.cpp -O3" und man erhält die ausführbare Datei "a.out", die beliebig verschoben und unbenannt werden kann.

Für "Windows" sind üblicherweise keine Änderungen im Quellcode notwendig, was allerdings nicht für alle Compiler gelten muss. Es sollte auch hier die Option -O3 für eine höhere Geschwindigkeit verwendet werden.

jcdir.dat

Die ausführbare Datei (z.B. "jceval") kann in ein beliebiges Verzeichnis verschoben werden. Im gleichen Verzeichnis muss sich die ASCII Datei mit Namen "jcdir.dat" befinden (der Name – jcdir.dat – darf nicht geändert werden). Diese Datei kann z.B. folgendermaßen aussehen:

```
/Auswertung/jceval_20101013/mirr_test/jckonf.dat ;Inputdatei ;Inputdatei ;Inputdatei ;Inputdatei
```

Die erste Zeile gibt Name und Pfad der ersten Konfigurationsdatei an (beides kann natürlich beliebig angepasst werden). Die zweite Zeile bestimmt die zweite Konfigurationsdatei, die aber in den meisten Fällen weggelassen werden kann (mehr dazu weiter unten – bei der Verwendung von dünnen Filme sollte in der momentanen Version diese Zeile unbedingt gelöscht werden!). Die Kommentare (;Inputdatei) dürfen beliebig geändert werden, aber (ich glaube) nicht gelöscht werden.

WICHTIG: Die Pfade und Dateinamen dürfen keine Leerzeichen enthalten (also keinesfalls: "Eigene Dateien …."). Dies gilt auch für die nachfolgenden Konfigurationsdateien, steht aber auf der Änderungsliste für die nächste Version.

1. Konfigurationsdatei (z.B. jckonf.dat)

Hier werden alle wichtigen Parameter für die Berechnung von Jc angegeben. Z.B:

```
1e-3
         ;Seitenlaenge der Probe
1e-3
         ;Seitenlaenge der Probe
         ;Hoehe der Probe (// H)
1e-3
            :min. Anzahl Stuetzstellen
100
            ;max. Fehler in B*; 0 ... verwende min. Anzahl Stuetzstellen (nur Bulk)
0
0.01
            ;Schrittweite Ausgabe < 1 T
            ;Schrittweite Ausgabe > 1 T
0.01
1
            ;Interpolation: 0/1 ... spline/linear
            ;Modus: 0/1 ... bulk/film
1
2
            ;Fileformat: 0/1/2 ... VSM/SQUID/plain
```

 $\begin{array}{lll} 0 & ; Zweige: 0/1/2/3/4Alles/1-2/2-3/3-4/4-5 \\ 0 & ; 0/1/2 .. \ Normalmode \ (mi >> mrev) \ / \ Symmet. \ von \ m(Ha) \ / \ mi \sim mrev \\ \ / \ home/martin/Arbeit/Auswertung/jceval_20101013/mirr_test/mirr.dat \ ; Inputdatei \ / \ home/martin/Arbeit/Auswertung/jceval_20101013/mirr_test/jcmirr.dat \ ; Outputdatei \ Jc \ 1.0 \ ; Skalierung \ von \ m \end{array}$

Die meisten Parameter sind wohl selbsterklärend. Die Kommentare dürfen verändert, aber nicht gelöscht werden. Für Details der Berechnung: siehe: M. Zehetmayer, PRB 80, 104512 (2009).

Zeilen 1-3 geben die Probengeometrie an, wobei in Zeile 3 die Dimension parallel zum angelegten Feld einzutragen ist.

Zeile 4: Anzahl der Stützstellen (pro Dimension) für die numerische Integration des Streufeldes.

Zeile 5: Anstatt der Anzahl der Stützstellen kann auch der maximale relative Fehler bei der Berechnung des Streufeldes angegeben werden. Wird der Wert "0" angegeben dann wird die in Zeile 4 geschriebene Anzahl der Stützstellen verwendet, ansonsten wird die Zahl der Stützstellen solange erhöht, bis der gewünschte Fehler erreicht ist (das kann sehr lange dauern).

ACHTUNG: Für dünne Filme steht diese Option (noch) nicht zur Verfügung, und es muss hier immer 0 gesetzt werden.

- Zeile 6: Schrittweite in der magnetischen Induktion bei der Ausgabe für Felder unter 1 T
- Zeile 7: Schrittweite in der magnetischen Induktion bei der Ausgabe für Felder über 1 T

Zeile 8: Art der Interpolation der experimentellen Daten: Splines (0) oder linear (1). Meine Empfehlung: lineare Interpolation (1).

Zeile 9: Art der Probe: Bulk(0) oder dünner Film (1). Bei Bulk wird das Streufeld dreidimensional und bei Film (1) nur zweidimensional berechnet, wobei im letzteren Falle das Feld entlang z konstant angenommen wird. Die Methode Bulk funktioniert (theoretisch) auch für dünne Filme, benötigt aber eine mit der Abnahme der Probendicke stark anwachsende Stützstellenanzahl.

Zeile 10: Fileformat der Messdatei: Entweder von VSM Messung (0), oder von SQUID Messung (1) oder Plain (2). Modus (1) (SQUID Messung) funktioniert möglicherweise auch für andere Quantum Design SQUIDs oder -Geräte, wenn unter anderem das magnetische Moment (m) in EMU und das externe Feld in Gauss (bzw. Oe) vorhanden ist. Modus (2) (Plain) benötigt ein zweispaltiges Eingabefile in SI – Format, also das externe Feld (in Tesla) in der ersten, und das magnetische Moment (in Am^2) in der zweiten Spalte.

Zeile 11: Hier kann angegeben werden, welcher Teil der Magnetisierungskurve für die Auswertung zu verwenden ist. Also die gesamte Messung (0) oder nur die Zweige 1-2 (1), 2-3 (2), 3-4 (3), oder 4-5 (4). Die Messung beginnt mit Zweig 1. Mit jeder Vorzeichenänderung des Feldes, oder Änderung der Feldrichtung (Erhöhung oder Erniedrigung) beginnt der nächste Zweig (also i.A. 1 Zweig pro Quadrant).

Zeile 12: Berechnungsmodus für das irreversible magnetische Moment. (0): Normaler Modus, d.h. das reversible Moment wird nicht berücksichtigt. (m_irr >> m_rev). (1): Symmetrisierung der Magnetisierungskurve – ACHTUNG: führt meistens zu falschen Ergebnissen. Vernünftig bei sehr

großem Background Signal. (3): Modus für m_irr ~ m_rev. Meine Empfehlung: Modus (0) (Für dünne Filme wurden die anderen Optionen bisher nicht getestet)

Zeile 13: Eingabedatei (Messdatei), Format: siehe Zeile 10. Nochmals: Hier sind keine Leerzeichen erlaubt.

Zeile 14: Ausgabedatei: 1 Zeile: B in Tesla; 2 Zeile: Jc in Am^-2.

Zeile 15: Skalierung von m: Faktor mit dem das magnetische Moment aus der Eingabedatei multipliziert wird. (i.A. steht hier "1")

Zeilen 13-15 können (blockweise) beliebig oft wiederholt werden, um mehrere Messungen auszuwerten.

2. Konfigurationsdatei (z.B. jckonf2.dat)

```
1.0 ;B stern Faktor
```

0.8 ;Entmagnetisierungsfaktor (nur fuer Mrev)

1 ;Probenstabzug Modus: 0..nein, $1..y = a \tanh(bx) + cx$

2.913e-8 ;a 3.80445 ;b 1.45e-8 ;c

/Auswertung/vsmjc/optimized/revtest/Mrev3.dat ;Outputdatei u 0 Mrev

Weitere Konfigurationsdatei für die Berechnung der reversiblen Magnetisierung und für Probenstababzug.

ACHTUNG: Hat für "Filme" zu falschen Ergebnissen geführt, deshalb unbedingt weglassen. D.h. die zweite Zeile in "jcdir.dat" löschen, oder einen nicht-vorhandenen Dateinamen setzen.

Ergebnisse:

Zu Diagnosezwecken (falls etwas schief läuft), werden während der Berechnungen mehrere Dateien im Verzeichnis der ausführbaren Datei (jceval) angelegt. Eine kurze Beschreibung liefert die Datei "Diagnose.dat".