

Hochtemperatursupraleiter – Festkörpersimulation

K.-P. Bohnen, R. Heid, IFP

Einleitung

Auf dem Gebiet der Festkörperphysik hat das Verständnis der Erscheinung der Supraleitung seit seiner Entdeckung vor über 30 Jahren stets eine herausragende Rolle gespielt. Das Verschwinden des elektrischen Gleichstromwiderstands in bestimmten Festkörpern unterhalb einer „Sprungtemperatur“ T_c verbunden mit speziellem magnetischem Verhalten hat wegen möglicher Anwendungen weltweit großes Interesse gefunden. Unglücklicherweise waren bis in die achtziger Jahre nur Supraleiter mit Sprungtemperaturen unterhalb 23 K bekannt (Tieftemperatursupraleiter), so dass ihr Einsatz wegen der hohen Anforderungen an die Kryotechnik (Kühlung mit flüssigem Helium) nur sehr begrenzt möglich war. Mit der Entdeckung der Hochtemperatursupraleiter im Jahre 1986 durch Bednorz und Müller [1] änderte sich dies sehr schnell, da bald eine Menge von Materialien entdeckt wurde, deren Sprungtemperatur zwischen 80 und 140 K liegt und daher der Kühlung mit flüssigem Stickstoff zugänglich ist.

Zum Verständnis des Phänomens der Supraleitung in den Tieftemperatursupraleitern wurde der entscheidende Beitrag mit der Entdeckung der Bedeutung der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Gitterschwingungen (Elektron-Phonon-Wechselwirkung) 1957 geliefert [2]. Die auf dieser Wechselwirkung aufgebaute Theorie der Supraleitung ist unter dem Namen Eliashberg-Theorie bekannt. Sie erlaubt, ausgehend von den Eigenschaften

des Normalleiterzustandes, die Berechnung der Sprungtemperatur T_c und anderer Eigenschaften des Supraleiters.

In der Vergangenheit wurden die für diese Theorie benötigten Informationen über den Normalleiterzustand meist aus Messungen entnommen, so dass keine echte Möglichkeit der Vorhersage gegeben war. Dies hat sich in den letzten Jahren deutlich geändert. Die verlässliche Berechnung der Elektronenstruktur, der Gitterdynamik und der Elektron-Phonon-Kopplung ist dank verbesserter numerischer Verfahren und verbesserter Leistungsfähigkeit der Rechner inzwischen für einfache Systeme auf Workstations oder PC-Clustern möglich. Dies wurde kürzlich sehr erfolgreich für den neu entdeckten Supraleiter MgB_2 und andere Diboride gezeigt [3].

Beim Verständnis der Hochtemperatursupraleiter (HTSL) ist man von einer vergleichbaren Situation noch weit entfernt (für einen Überblick über Supraleitung in den HTSL sei auf einen Beitrag in den FZKA-Nachrichten [4] verwiesen). Dies beruht zunächst darauf, dass die für die Supraleitung entscheidende Kopplung bisher nicht bestimmt werden konnte. Erschwerend kommt hinzu, dass die Hochtemperatursupraleiter eine komplexe Kristallstruktur mit vielen Atomen in der Einheitszelle besitzen und daher nur mit sehr aufwändigen numerischen Verfahren behandelt werden können. Es ist daher bisher nicht bekannt, welche Rolle die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in diesen Systemen spielt. In der vorliegenden Arbeit soll an einem typischen

Hochtemperatursupraleiter (HTSL) gezeigt werden, dass mit Hochleistungsrechnern Normalleitereigenschaften auch für diese Systemklasse erfolgreich simuliert werden können, so dass der Beitrag der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zur Supraleitung parameterfrei bestimmt werden kann. Für diese Simulation wurde $YBa_2Cu_3O_7$ gewählt, da dieses der am Besten studierte HTSL ist, für den auch detaillierte experimentelle Untersuchungen der Gitterdynamik vorliegen.

Die verwendeten numerischen Verfahren werden im Hinblick auf Speicherplatz und Rechenzeitbedarf im Folgenden genauer diskutiert.

Berechnung der Gitterstruktur, elektronischen Bandstruktur, Gitterdynamik und Elektron-Phonon-Kopplung

Das Verfahren zur Bestimmung der Gitterstruktur beruht auf einer Minimalisierung der Gesamtenergie des betrachteten Festkörpers, wobei wegen der periodischen Anordnung der Atome des Kristalls nur eine Einheitszelle (die Grundeinheit, aus der der Festkörper aufgebaut werden kann) zu betrachten ist. In Abb. 1 ist diese Einheitszelle für das System $YBa_2Cu_3O_7$ dargestellt. Freie Parameter für die Simulation sind die Achsenlängen a, b, c und die Position der Atome innerhalb der Zelle (für $YBa_2Cu_3O_7$ fünf weitere Freiheitsgrade). Der numerisch aufwändigste Schritt besteht in der Lösung eines verallgemein-

nernten Eigenwertproblems (Eigenwert ϵ)

$$H\psi = \epsilon S\psi \quad (1)$$

wobei die Matrix H nichtlinear von ψ abhängt und S eine symmetri-

sche Matrix ist. Die Größe der Matrizen wird von der gewünschten Genauigkeit bestimmt.

Der benötigte Speicherplatz variiert zwischen 300 und 700 Megabytes und die zu diagonalisieren-

den Matrizen haben eine Dimension zwischen 726 und 1772. Neben der Lösung des Eigenwertproblems (1) wird bei der Energieberechnung als weiterer wichtiger numerischer Schritt eine Fast-Fourier-Transformation (FFT) mehrfach eingesetzt, um verschiedene Beiträge zu H möglichst ökonomisch zu berechnen. In Tab. 1 sind typische Rechenzeiten für eine Energieberechnung bei vorgegebener Struktur auf der VPP5000 bei verschiedener Matrixgröße angegeben. Neben den Rechenzeiten wurde auch die Zahl der ausgeführten Floating-Point-Operationen pro Sekunde angegeben, die ein Maß für die Ausnutzung der Rechenleistung des verwendeten Prozessors darstellt. Die verbesserte Nutzung der verfügbaren Rechenleistung der VPP5000 mit wachsender Systemgröße führt dazu, dass die Rechenzeit nur moderat anwächst.

Wegen der großen Zahl der zu optimierenden Strukturparameter beträgt der Gesamtaufwand für die Strukturoptimierung ein Vielfaches der in Tab. 1 angegebenen Rechenzeiten. Die berechneten Atompositionen sind in guter Übereinstimmung mit Messdaten [5].

Zur Berechnung der Gitterschwingungen ist die Kenntnis der 2. Ableitung der Energie des Systems nach den Atomkoordinaten nötig. Dabei ist der zentrale, rechenintensive Schritt die Lösung eines inhomogenen linearen Gleichungssystems. Der Rechenaufwand steigt mit der 4. Potenz der Anzahl der Atome, so dass mit wachsender Atomzahl die Leistungsfähigkeit moderner Workstations rasch überfordert ist. In

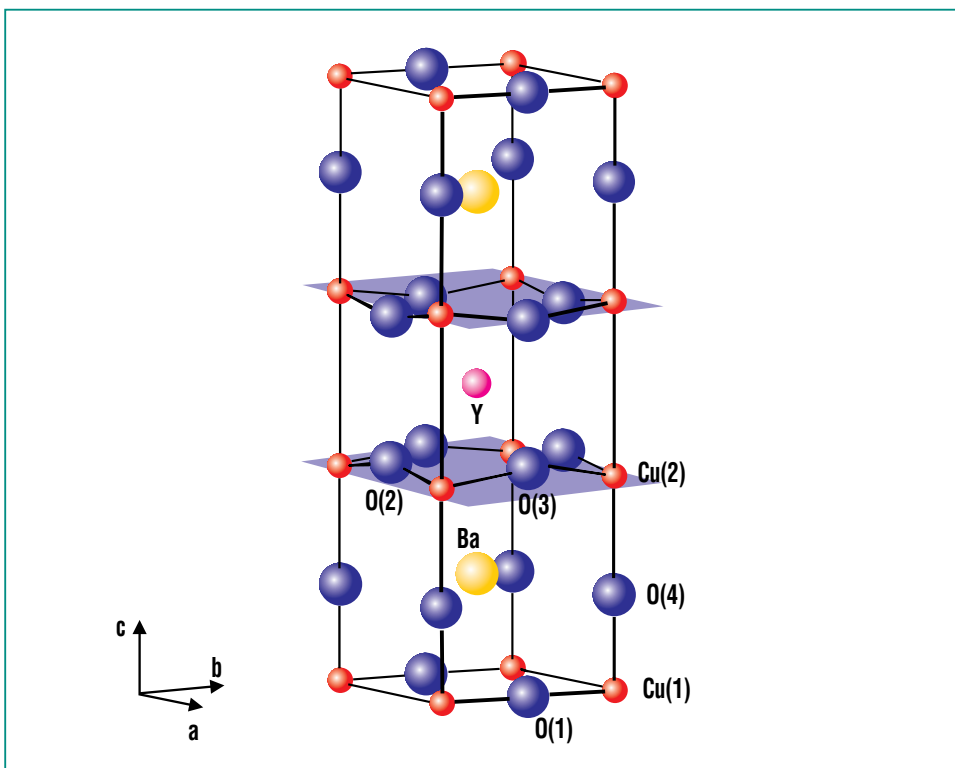


Abb. 1: Kristallstruktur von $YBa_2Cu_3O_7$.

Matrix-dimension	Struktur		Gitterdynamik	
	Zeit [Std.]	MFLOPS	Zeit [Std.]	MFLOPS
N_D				
726	7	645	29	4200
1125	13	960	33	4100
1360	17	1144	37	4000
1772	29	1387	56	3800

MFLOPS = 10^6 Floating Point Operations / sec

Tab. 1: Typische Rechenzeiten und Leistungsdaten der VPP5000 für die Berechnung der Gitterenergie (Struktur) und Gitterdynamik für $YBa_2Cu_3O_7$ für unterschiedliche Matrixdimensionen N_D .

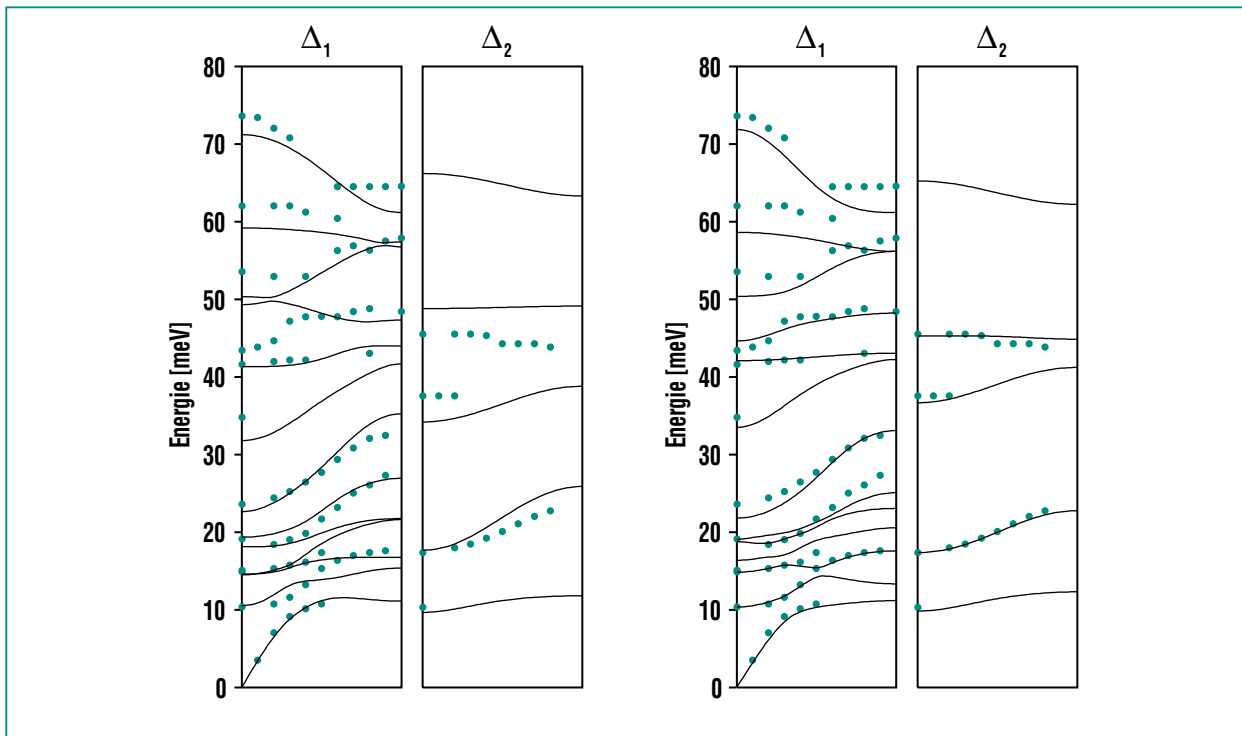


Abb. 2: Frequenzen atomarer Eigenschwingungen in einer ausgewählten Kristallrichtung für verschiedene Symmetrien (Δ_1, Δ_2). Im linken Teil der Abbildung sind Ergebnisse dargestellt, die mit moderaten Anforderungen an Speicherplatz und Rechenzeit erzielt wurden. Die Ergebnisse sehr genauer und damit sehr aufwändiger Rechnungen sind im rechten Teilbild dargestellt.

Tab. 1 sind Rechenzeiten für verschiedene Genauigkeiten für die VPP5000 für einen hochsymmetrischen Punkt in der Brillouin-Zone (BZ) angegeben. Für eine verlässliche Interpolation des gesamten Phononenspektrums benötigt man etwa 20 Punkte in der BZ.

Neben den sehr großen Anforderungen an die Rechenzeit wird in unserem Beispiel Speicherplatz von mehr als 5 Gigabyte pro Prozessor benötigt. In Abb. 2 sind die Frequenzen für Gitterschwingungen der Δ_1 - und Δ_2 -Symmetrie längs der (100)-Kristallrichtung für zwei verschiedene Rechnungen dargestellt, die sich bezüglich ihrer Genauigkeit unterscheiden. Die zweite Rechnung wurde so

bezüglich der Systemressourcen reduziert, dass die Speicherplatzanforderung unter 2 Gigabyte liegt und die Rechenzeit ungefähr einen Faktor 3-4 geringer ist als für die aufwändigsten Rechnungen.

Wie man sieht, ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen von Pintschovius et al. [6] für die sehr genaue Rechnung gut. Die Absolutwerte für die Frequenzen stimmen mit den gemessenen Daten gut überein. Sehr befriedigend ist auch die Tatsache, dass der bisher unverstandene starke Abfall der höchsten Mode als Funktion des Wellenvektors q längs der (100)-Richtung in den Simulationen korrekt wiedergegeben wird.

Auf der Basis dieser Ergebnisse lässt sich der Einfluss der Elektron-Phonon-Wechselwirkung für die Supraleitung parameterfrei bestimmen. Erste Ergebnisse unserer Rechnungen deuten darauf hin, dass die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in den HTSL eine vernachlässigbare Rolle spielt. Für eine detaillierte Diskussion wird der Leser auf Ref. 7 verwiesen.

Zusammenfassung

Die vorliegenden Rechnungen zur Elektronenstruktur, Gitterdynamik und Elektron-Phonon-Wechselwirkung haben gezeigt, dass auch komplexe Systeme wie $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ mit modernen Simu-

lationsverfahren der Festkörperphysik erfolgreich behandelt werden können. Im Hinblick auf Speicherplatz und Rechenzeitbedarf sind Hochleistungsrechner zur Bewältigung der numerischen Behandlung zwingend notwendig.

Danksagung

Die Autoren danken Prof. Dr. H. Wühl sowie dem Institut für Technische Physik für die Überlassung der Abb. 1 und den Herren Dr. L. Pintschovius und Dr. W. Reichardt für zahlreiche Diskussionen.

Literatur

- [1] J.G. Bednorz, K.A. Müller, *Z. Phys. B.* 64, 189 (1986)
- [2] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, W.A. Benjamin, N.Y. (1964)
- [3] R. Heid, K.-P. Bohnen, B. Renker, *Adv. in Solid State Phys.* 42, 293 (2002)
- [4] W. Fietz, W. Schauer, H. Wühl, C. Meingast, L. Pintschovius, S. Schuppler, H. Winter, *Nachrichten – Forschungszentrum Karlsruhe, Jahrgang 31, 4 / 1999*, 233
- [5] E. Kaldis, *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, Vol. 31*, K.A. Gschneidner, jr., L. Eyring, M.B. Maple (eds.), Elsevier Sci. (2001)
- [6] L. Pintschovius, W. Reichardt, in „*Neutron Scattering in Layered Copper-Oxide Superconductors*“, Albert Furrer (eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1998), 165
- [7] K.-P. Bohnen, R. Heid, R. Krauss, in *Vorbereitung*