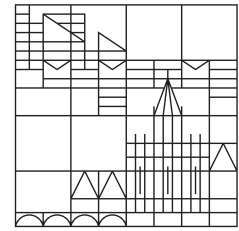


MASTERARBEIT

vorgelegt an der

Universität
Konstanz



Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion

Fachbereich Physik

Molekulardynamik-Simulation zur Untersuchung der atomistischen Kopplung von Silizium-Nanobrücken

Autor:

Fabian Müller

1. Gutachter:

Prof. Dr. Peter Nielaba

2. Gutachter:

Prof. Dr. Eva Weig

Konstanz, 2016

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Motivation	3
1.2	Struktur der Arbeit	3
2	Theoretische Grundlagen	5
2.1	Molekulardynamik	5
2.1.1	Numerische Integration	5
2.1.2	Molekulardynamik in verschiedenen Ensembles	6
2.1.3	Stillinger-Weber-Potential	10
2.2	Klassische Beschreibung der Kopplung zweier Oszillatoren	11
2.3	Nanomechanik	13
2.3.1	Euler-Bernoulli-Balkentheorie	13
2.4	Synchronisierung mechanischer Schwingungen	14
2.4.1	Synchronisierung zweier autonomer Oszillatoren	15
2.4.2	Synchronisierung eines einzelnen Oszillators durch eine treibende Kraft	19
2.4.3	Synchronisierung höherer Ordnung	20
3	Simulation	23
3.1	Verwendete Programme	23
3.2	Simulationsmethodik	23
4	Auswertung	29
4.1	Auslenkung	29
4.2	Freie Oszillation	34
4.3	Untersuchung des Synchronisierungsverhaltens	36
4.3.1	Vorbereitende Schritte	36
4.3.2	Mathematische Beschreibung	37
4.3.3	Ergebnisse	39
5	Ausblick	46
6	Zusammenfassung	51
A	Mathematische Typografie	53
B	Hilbert-Transformation	53
C	Kurzzeitfourier-Transformation	54
D	Neuronale Netze	55
E	Genetischer Algorithmus	56
F	Ergänzende Ergebnisse	57

1 Einleitung

1.1 Motivation

Das Themengebiet der Nanotechnologie hat in den letzten Jahrzehnten ein enormes Wachstum erlebt. Die Anwendungsmöglichkeiten reichen von der Realisierung höchstsensibler, nanomechanischer Sensoren, mit denen beispielsweise Massenänderungen auf atomarer Ebene aufgelöst werden können [Cha12], bis hin zur Nutzung koaxialer Nanodrähte als Solarzellen [Tia07] in der Photovoltaik. Allgemein fasst man unter dem Begriff der Nanotechnologie Systeme in der Größenordnung von bis zu einigen hundert Nanometern zusammen. Durch die Manipulation von Strukturen auf immer kleinerer Skalen erhofft man sich in Zukunft wesentlich leistungsfähigere Technologien zu entwickeln.

In der heutigen Entwicklung haben insbesondere hybride Systeme aus Nanomechanik und -elektronik (sogenannte NEMS) einen hohen Stellenwert, die auf langfristige Sicht aktuelle mikroelektromechanische (MEMS) Bauteile, wie zum Beispiel Beschleunigungssensoren in Smartphones, in der Anwendung ablösen sollen. Schwerpunkt aktueller Forschungen ist daher die Charakterisierung solcher nanomechanischer Resonatoren [Cle03], mit dem Fokus auf deren elastischen Eigenschaften.

Durch die kleinen, lateralen Abmessungen nanomechanischer Resonatoren ist es möglich diese auch mit entsprechenden Computersimulationsverfahren, wie der Molekulardynamik, in sehr guter Näherung zu beschreiben. Der Unterschied in den handhabbaren Systemgrößen zwischen Experimenten und theoretischen Studien liegt dennoch bei bis zu zwei Größenordnungen. Trotzdem konnte bereits in früheren Arbeiten [Sch11] [Sch12] gezeigt werden, dass theoretische Simulationen relevante Ergebnisse liefern können.

In dieser Arbeit wird ein nanomechanisches System gekoppelter Nanobrücken aus Silizium betrachtet. Ziel ist es den Einfluss der Kopplung auf die mechanischen Schwingungen des Systems zu charakterisieren. Solche Kopplungen treten auch zwangsweise in entsprechenden Experimenten auf, da meist (aus Gründen der einfacheren Herstellung und Handhabung) größere Arrays von Nanoresonatoren untersucht werden, die dann über das Substrat miteinander gekoppelt sind. Durch die Kopplung der Resonatoren können sich die einzelnen Schwingungen hinsichtlich Frequenz und Phase synchronisieren. Bereits 1673 beobachtete C. Huygens diesen Effekt bei der Pendelbewegung zweier an der selben Wand aufgehängten Uhren [Pik03]. In dieser Arbeit wird die Synchronisierung zweier Nanoresonatoren analysiert und die externe Steuerung dieses Prozesses diskutiert.

1.2 Struktur der Arbeit

Kapitel (2) widmet sich den für diese Arbeit relevanten physikalischen Grundlagen. Es wird das Prinzip der Molekulardynamik-Simulationen erläutert und beschrieben, mit welchen Verfahren verschiedene thermodynamische Ensembles behandelt werden können. Weiter wird das Stillinger-Weber-Potential zur Simulation der Gitterdynamik von Silizium vorgestellt. Der zweite Teil von Kapitel

(2) behandelt die Grundlagen der Nanomechanik. Zunächst wird dabei auf die klassische Beschreibung zur Kopplung zweier mechanischer Schwinger eingegangen und die resultierende, überlagernde Oszillation beschrieben. Die Beschreibung der Biegemoden in Nanoresonatoren erfolgt mit der Balkentheorie nach Euler-Bernoulli. Dabei wird insbesondere das Auslenkungsprofil entlang der langen Achse des Balkens analysiert. Im letzten Teil von Kapitel (2) wird das Synchronisierungsverhalten mechanischer Schwingungen hergeleitet. Dabei wird unterschieden zwischen der Kopplung und Synchronisierung zweier autonomer Resonatoren und der Synchronisierung zwischen einem einzelnen Resonator und einer externen, treibenden Kraft.

Die verwendete Simulationstechnik wird in Kapitel (3) beschrieben. Dabei wird detailliert auf die einzelnen Simulationsschritte eingegangen. Es wird ein neuer Ansatz zur Simulation der Oberflächenrekonstruktion von Silizium vorgestellt, mit dem eine schnellere und genauere Rekonstruktion möglich ist, als mit anderen Verfahren. Weiter wird thematisiert wie bei der getriebenen Oszillation die Temperatur des Systems konstant gehalten werden kann, ohne die Dynamik wesentlich zu beeinflussen.

In Kapitel (4) werden dann die Ergebnisse der Simulationen analysiert und diskutiert. Das Kapitel ist dabei in drei Hauptteile gegliedert. Der erste Teil widmet sich vorbereitenden Schritten, in denen die elastischen Eigenschaften des Systems ausgewertet werden. Es wird die Auslenkung des Systems auf Linearität untersucht und der Einfluss des Thermostaten auf die elastischen Eigenschaften überprüft. Durch den Vergleich mit dem in Kapitel (2) vorgestellten Euler-Bernoulli-Modell, wird das Auslenkungsprofil der Biegemode untersucht und gezeigt, dass zusätzliche Moden angeregt werden. Weiter wird die freie Schwingung des Systems untersucht und mit der klassischen Theorie aus Kapitel (2) verglichen. Es wird gezeigt, dass dabei zusätzliche Moden entgegen der Schwingungsrichtung angeregt werden. Im zweiten Teil wird das Synchronisierungsverhalten der gekoppelten Resonatoren im getriebenen Fall untersucht. Dabei wird die zeitliche Entwicklung der Phasenwinkel und Frequenzen der beiden Oszillatoren bestimmt und analysiert. Weiter wird eine mathematische Beschreibung des Synchronisierungsprozesses vorgestellt und anhand der Simulationsdaten verifiziert. Abschließend wird überprüft wie die Synchronisierung durch Variation der externen Kraft von außen beeinflusst werden kann. Der letzte Teil liefert einen Ausblick der sich mit der Möglichkeit beschäftigt, die komplexe Beschreibung des gekoppelten Systems auf den simplen Fall zweier Massepunkte in einem effektiven Potential zu reduzieren.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Molekulardynamik

Die in dieser Arbeit untersuchten Nanobrücken liegen im Größenbereich von wenigen bis einigen zehn Nanometern. Strukturen dieser Größe bestehen aus einigen zehntausend Atomen. Daher scheidet eine korrekte quantenmechanische Beschreibung dieser Viel-Teilchen-Systeme schon wegen der benötigten Rechenleistung aus.

In der Molekulardynamik wird das Verhalten solcher Viel-Teilchen-Systeme mit der klassischen NEWTON'schen Mechanik approximiert, wobei die Wechselwirkung der einzelnen Teilchen untereinander über semiempirische Potentiale beschrieben wird.

Nachfolgend werden die theoretischen Grundlagen vorgestellt, welche zur dynamischen Betrachtung eines Viel-Teilchen-Systems in der Molekulardynamik benötigt werden.

2.1.1 Numerische Integration

Für das i -te Teilchen in einem klassischen Viel-Teilchen-System gilt nach der NEWTON'schen Bewegungsgleichung

$$m_i \cdot \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i \quad , \quad (2.1)$$

wobei sich die Kraft \mathbf{f}_i auf das Teilchen i durch Gradientenbildung aus dem Wechselwirkungspotential U bestimmen lässt

$$\mathbf{f}_i = -\nabla_i U \quad . \quad (2.2)$$

Da im Allgemeinen keine analytische Lösung zu Gleichung (2.1) existiert, wird in der Molekulardynamik ein numerisches Integrationsverfahren genutzt. In dieser Arbeit wird eine Variation des Verlet-Algorithmus verwendet, der bei hinreichend kleinem Zeitschritt¹ und vergleichsweise geringem Rechenaufwand eine hohe Genauigkeit liefert. Zur Herleitung des Verlet-Algorithmus wird der Ort \mathbf{r} des Teilchens i zur Zeit t sowohl in positiver Richtung $+\Delta t$, als auch in negativer Richtung $-\Delta t$ TAYLOR-entwickelt [Fre02]. Man erhält somit

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{2m_i}\Delta t^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3}{dt^3}\mathbf{r}_i(t)\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (2.3)$$

beziehungsweise

¹Üblicherweise 10^{-15} s bis 10^{-12} s (Abhängig von der typischen Zeitskala der betrachteten Dynamik).

$$\mathbf{r}_i(t - \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{2m_i}\Delta t^2 - \frac{1}{3!}\frac{d^3}{dt^3}\mathbf{r}_i(t)\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) . \quad (2.4)$$

Addiert man die Gleichungen (2.3) und (2.4), erhält man den Ort des Teilchens zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ als

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i}\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) , \quad (2.5)$$

wenn die Kraft auf das i -te Teilchen zum Zeitpunkt t sowie die Orte zu den Zeitpunkten t und $t - \Delta t$ bekannt sind. Der Fehler dieser Berechnung ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(\Delta t^4)$.

Die Teilchengeschwindigkeit zum Zeitpunkt t erhält man, indem man Gleichung (2.4) von Gleichung (2.3) abzieht:

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) . \quad (2.6)$$

Für die Berechnung der Geschwindigkeit zu einem Zeitpunkt t muss demnach bereits der Ort des Teilchens im nächsten Zeitschritt $t + \Delta t$ bekannt sein. In Simulationen, in denen die Geschwindigkeit der Teilchen in jedem Zeitschritt benötigt wird (beispielsweise zur Berechnung der kinetischen Energie oder der Temperatur), ist die Implementierung des Verlet-Algorithmus in obiger Form somit unpraktisch. Deshalb wird in dieser Arbeit eine zu (2.5) und (2.6) analoge Form - der Velocity-Verlet-Algorithmus - verwendet:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{2m_i}\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{f}_i(t + \Delta t) + \mathbf{f}_i(t)}{2m_i}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Neben der gleichzeitigen Berechnungsmöglichkeit von Teilchenort und -geschwindigkeit wird für die Berechnung des Orts zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ nur Ort, Geschwindigkeit und Kraft zum Zeitpunkt t benötigt. Für die Geschwindigkeit muss zusätzlich noch die Kraft zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ bekannt sein. Dadurch hat der Velocity-Verlet-Algorithmus im Vergleich zum Verlet-Integrator auch einen geringeren Bedarf an Arbeitsspeicher.

2.1.2 Molekulardynamik in verschiedenen Ensembles

Das in (2.1.1) vorgestellte Verfahren zur Integration der NEWTON'schen Bewegungsgleichung eignet sich zur Untersuchung der zeitlichen Entwicklung eines N -Teilchen-Systems innerhalb eines konstanten Volumens V , wobei die Gesamtenergie E erhalten bleibt. Man spricht bei einem solchen System auch von der mikrokanonischen Gesamtheit oder einem **NVE-Ensemble**.

In Molekulardynamik-Simulationen ist aber häufig die Untersuchung anderer thermodynamischer Ensembles von Interesse. Auf die Simulation von Systemen mit konstanter Temperatur T (**NVT-Ensemble**) soll hier gesondert eingegangen werden.

Nach dem Gleichverteilungssatz gilt [Fre02]

$$k_B T = m \langle v_j^2 \rangle \quad (2.8)$$

als Zusammenhang zwischen der Temperatur T und dem Mittelwert der translatorischen kinetischen Energie pro Teilchen. Hierbei ist k_B die BOLTZMANN-Konstante, m die Masse des Teilchens und v_j die j -te Komponente der Teilchengeschwindigkeit. Für die Temperatur T eines N -Teilchen-Systems mit N_f Freiheitsgraden ergibt sich dann

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{k_B N_f} \quad (2.9)$$

mit $v_i^2 = \sum_{j=1}^{N_f} v_{i,j}^2$. Im Sinne der Thermodynamik ist die Temperatur T_{TD} eine Gleichgewichtsgröße und nur für equilibrierte Systeme definiert. Die hier angegebene molekulardynamische Temperatur T fluktuiert lokal um einen Gleichgewichtswert. Im Langzeitmittelwert eines simulierten Systems im Equilibrium geht dann T in T_{TD} über.

Um die Temperatur eines simulierten Systems an eine Zieltemperatur anzupassen (man spricht hierbei von thermalisieren), gibt es mehrere Möglichkeiten. Die wohl einfachste Realisierung ist eine Reskalierung der Teilchengeschwindigkeiten in Gleichung (2.9). Man spricht in diesem Zusammenhang von einem **Reskalierungs-Thermostaten**. Der Nachteil einer solchen Reskalierung ist, dass die dabei berechneten Teilchentrajektorien nicht realistisch sind. Eine Berechnung dynamischer Größen ist mit einem solchen Thermostaten somit nicht möglich.

In den nachfolgenden Abschnitten werden zwei Thermostate vorgestellt, mit denen es möglich ist, deterministische Teilchentrajektorien zu erhalten.

Nosé-Hoover-Thermostat Die Grundidee von Nosé für deterministische Molekulardynamik bei konstanter Temperatur ist eine Erweiterung des LAGRANGE-Formalismus mit zusätzlichen, künstlichen Koordinaten und Geschwindigkeiten [Fre02] [Tuc06]. Die LAGRANGE-Funktion eines N -Teilchen-Systems mit zusätzlicher Koordinate s lässt sich schreiben als:

$$\mathcal{L}_{\text{Nosé}} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} s^2 \dot{\mathbf{r}}_i^2 - U(\mathbf{r}^N) + \frac{Q}{2} \dot{s}^2 - 3Nk_B T \ln s \quad (2.10)$$

Hierbei ist Q eine zur Teilchenkoordinate s gehörige effektive Masse. Die aus Gleichung (2.10) abgeleiteten Bewegungsgleichungen lauten dann:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\
\dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial U(\mathbf{r}^N)}{\partial \mathbf{r}_i} - \xi \mathbf{p}_i \\
\dot{\xi} &= \left(\sum_i \frac{p_i^2}{m_i} - 3Nk_B T \right) \frac{1}{Q} \\
\frac{\dot{s}}{s} &= \frac{d \ln s}{dt} = \xi
\end{aligned} \tag{2.11}$$

mit dem von Hoover eingeführten Koeffizienten $\xi = \dot{s}p_s/Q$ und dem zur Koordinate s konjugierten Impuls p_s . An den Gleichungen (2.11) erkennt man, dass die Thermalisierung im Wesentlichen über die zeitliche Ableitung $\dot{\xi}$ gesteuert wird. Übersteigt die kinetische Energie ihren zeitlichen Mittelwert $3Nk_B T$ so wird $\dot{\xi}$ positiv und führt zu einer Verringerung der Teilchengeschwindigkeit und damit zu einer Abkühlung des Systems. Ebenso wird das System entsprechend aufgeheizt für $\dot{\xi} < 0$. ξ wirkt damit wie eine Reibungskonstante. Auf diese Weise kann ein simuliertes System ins thermische Gleichgewicht gebracht werden.

In Molekulardynamik-Simulationen mit konstanter Temperatur treten dann obige Gleichungen (2.11) an die Stelle der NEWTON'schen Bewegungsgleichungen. Hierfür wird ein dem Velocity-Verlet-Algorithmus ähnliches Integrationsverfahren genutzt. Die in dieser Arbeit verwendete Implementierung kann in [Tuc06] nachgelesen werden.

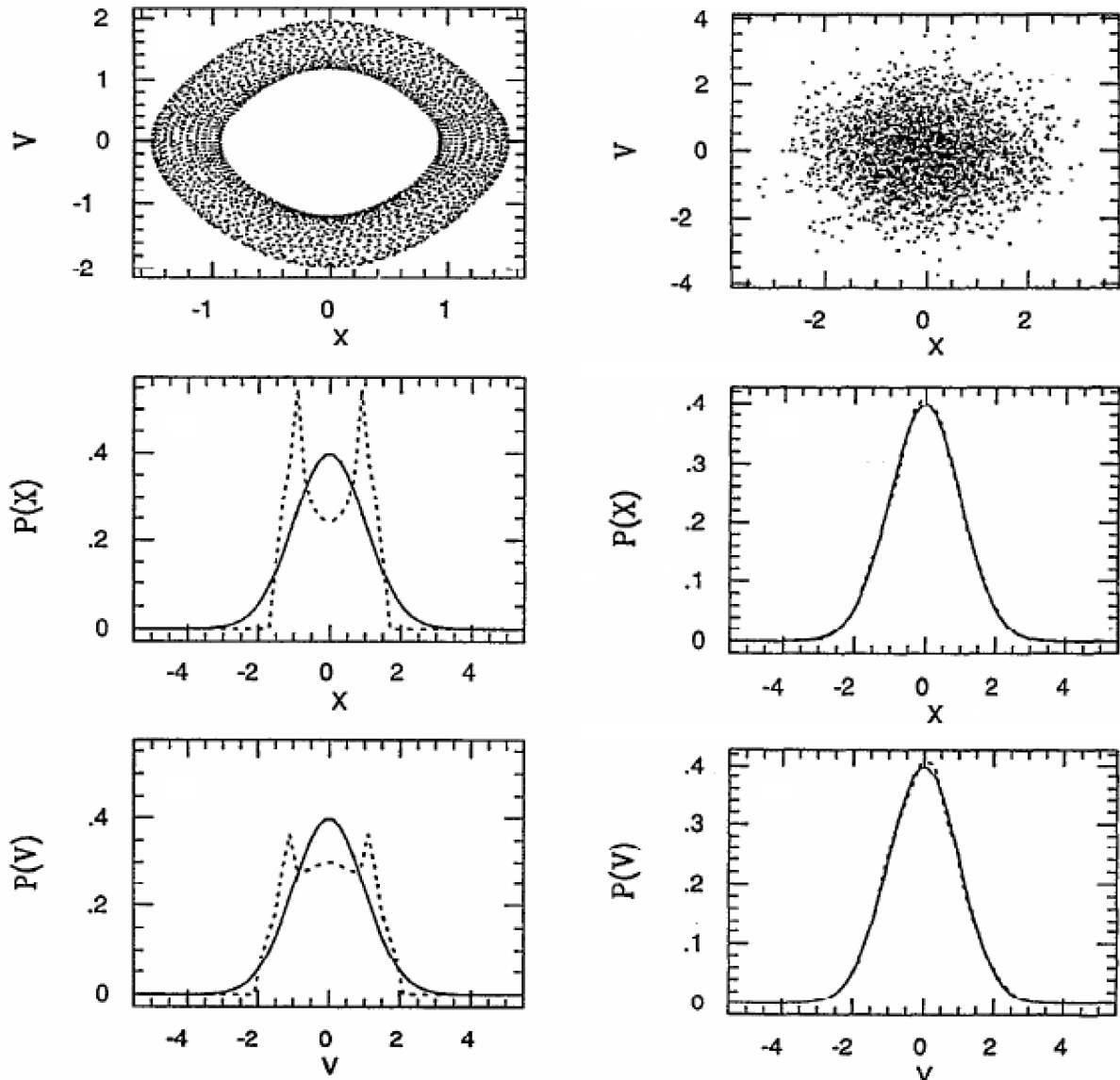
Bei der Verwendung eines Nosé-Hoover-Thermostaten in Simulationen muss beachtet werden, dass die Gesamtenergie des Systems keine Erhaltungsgröße mehr darstellt. Stattdessen ist die Größe

$$\mathcal{H}_{\text{NH}} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}^N) + \frac{\xi^2 Q}{2} + 3Nk_B T \ln s \tag{2.12}$$

erhalten². In bestimmten Fällen reicht ein einzelner Nosé-Hoover-Thermostat nicht aus, um physikalisch korrekte Trajektorien zu erzeugen. Die Geschwindigkeitsverteilung entspricht dann nicht der gewünschten GAUSS-Verteilung - das simulierte System verhält sich nicht ergodisch (dargestellt in Abbildung (2.1a) am Beispiel des harmonischen Oszillators). Meistens wird in Simulationen deshalb eine mehrgliedrige³ Kette von Nosé-Hoover-Thermostaten verwendet. Dabei ist nur ein Thermostat direkt an das System gekoppelt. Die Anderen koppeln jeweils an einander. Qualitativ kann dadurch eine "weichere" Einwirkung des Thermostaten auf das System und eine bessere Ausdämpfung realisiert werden. Die Berechnung liefert dann wieder das korrekte physikalische Verhalten (siehe Abbildung (2.1b)). Für eine mathematische Beschreibung von Nosé-Hoover-Ketten ist auf die Arbeit von Martyna *et al.* [Mar92] verwiesen.

²Bei \mathcal{H}_{NH} handelt es sich um keinen Hamiltonian, da sich aus ihm die Bewegungsgleichungen nicht ableiten lassen.

³Üblicherweise eine Kette von drei Gliedern.



(a) Einzelner Nosé-Hoover-Thermostat

(b) Kette von Nosé-Hoover-Thermostaten mit zwei Gliedern

Abbildung 2.1: Einzelner (a) beziehungsweise zwei-gliedriger (b) Nosé-Hoover-Thermostat am Beispiel des harmonischen Oszillators [Mar92]. Die Abbildungen zeigen (von oben nach unten) Trajektorie im Phasenraum, Positionsverteilung und Geschwindigkeitsverteilung. Gestrichelte Linien entsprechen der berechneten Dynamik nach Nosé-Hoover. Durchgezogene Linien geben die exakte analytische Lösung an.

Langevin-Thermostat Eine weitere Möglichkeit der Thermalisierung ist die Ankopplung des zu simulierenden Systems (beziehungsweise einer Teilgruppe) an ein umgebendes Fluid. Dieser Hintergrund wird dabei mit der gewünschten Zieltemperatur initialisiert und wirkt durch Stöße mit den Teilchen wie ein Wärmebad. Ein solcher Thermostat kann über die Langevin-Gleichung beschrieben werden. Die Kollisionen mit den Teilchen des Wärmebads werden dabei über eine Dämpfungskraft $-\gamma m \dot{\mathbf{r}}$ und eine zufällige (bezüglich Richtung und Stärke) Kraft $\boldsymbol{\eta}(t)$ beschrieben. Die Gesamtkraft $\mathbf{f}_i(t)$ auf das Teilchen i schreibt sich dann als [Sch78]

$$\mathbf{f}_i(t) = -\nabla_i U - \gamma m \dot{\mathbf{r}}(t) + \boldsymbol{\eta}(t) \quad , \quad (2.13)$$

mit

$$\langle \boldsymbol{\eta}_i(t) \boldsymbol{\eta}_{i'}(t') \rangle = 2m\gamma k_B T \delta_{ii'} \delta(t - t') \quad (2.14)$$

Dabei ist k_B die BOLTZMANN-Konstante, T die Temperatur des Wärmebads und $\delta_{ii'}$ die Dirac-Distribution. In Kombination mit dem in Abschnitt (2.1.1) vorgestellten Velocity-Verlet-Verfahren zur Beschreibung eines NVE-Ensembles lässt sich mit dem Langevin-Thermostaten ein System mit BROWN'scher Dynamik simulieren.

Zur weiteren Information sei auf [Sch78] und [Dün91] verwiesen.

2.1.3 Stillinger-Weber-Potential

Über den in Kapitel (2.1.1) vorgestellten Velocity-Verlet-Algorithmus lässt sich bei gegebenen Anfangsbedingungen der Teilchen (Ort und Geschwindigkeit) und mit bekannter Kraft die zeitliche Entwicklung des Systems berechnen. Die Kraft berechnet sich dabei nach Gleichung (2.2) durch Gradientenbildung eines geeigneten, semiempirischen Potentials. Für die Beschreibung der in dieser Arbeit untersuchten Nanobrücken aus Silizium wird das drei-Teilchen Stillinger-Weber-Potential verwendet [Sti85]. Das Stillinger-Weber-Potential ist additiv aus einem Paarwechselwirkungs- und Dreikörperanteil aufgebaut. Dadurch können tetraedrische Kristallgitter, wie die Diamantstruktur von Silizium, realisiert werden. Mit einem reinen Paarwechselwirkungspotential wie dem Lennard-Jones-Potential ist dies nicht möglich [Sti85].

Allgemein lässt sich das Stillinger-Weber-Potential schreiben als:

$$U_{SW} = \sum_{i < j} \nu_2(r_{ij}) + \sum_{i < j < k} \nu_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) \quad (2.15)$$

mit den Funktionen ν_2, ν_3 und dem Abstand r_{ij} zweier Teilchen i und j . Zur vereinfachten Darstellung werden reduzierte Einheiten für Energie ε und Länge σ eingeführt, sodass

$$\begin{aligned}\nu_2(r_{ij}) &= \varepsilon f_2(r_{ij}/\sigma) \\ \nu_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) &= \varepsilon f_3(\mathbf{r}_i/\sigma, \mathbf{r}_j/\sigma, \mathbf{r}_k/\sigma)\end{aligned}\tag{2.16}$$

gilt. Dabei wird ε so gewählt, dass f_2 eine Tiefe von -1 besitzt und σ so, dass $f_2(2^{1/6}) = 0$ gilt.

Für den Paarwechselwirkungsanteil gilt:

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q}) \exp[(r-a)^{-1}] & , r < a \\ 0 & , r \geq a \end{cases}\tag{2.17}$$

mit $A, B, p, q, a > 0$. Obige Definition der Paarwechselwirkung garantiert stetige Ableitungen für alle r . Beim Abschneideradius $r = a$ verschwindet f_2 . Der drei-Körper-Anteil f_3 hängt nicht nur von den Abständen der drei Teilchen zueinander, sondern auch von den Winkeln der einzelnen Bindungen ab. Der drei-Körper-Anteil lautet dann:

$$f_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \Theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \Theta_{ikj}) .\tag{2.18}$$

Dabei bezeichnet Θ_{ijk} den Winkel zwischen \mathbf{r}_i und \mathbf{r}_k von Teilchen j aus gesehen. Die Funktion h lässt sich für $r < a$ und mit den positiven Parametern λ und γ als

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) = \lambda \exp\left[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}\right] \cdot \left(\cos \Theta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2\tag{2.19}$$

schreiben. Für $r \geq a$ verschwindet h . Für einen Bindungswinkel Θ_t mit $\cos \Theta_t = -1/3$ wird f_3 in Gleichung (2.19) minimal. Daraus ergibt sich ein optimaler Tetraederwinkel von $\Theta_t = 109.47^\circ$.

Die in dieser Arbeit verwendeten Parameter sind in Tabelle (2.1) aufgeführt.

Tabelle 2.1: Parametersatz des Stillinger-Weber-Potentials zur Beschreibung von Silizium [Sti85].

A	B	p	q	a	λ	γ
7.05	0.60	4	0	1.80	21.0	1.20

2.2 Klassische Beschreibung der Kopplung zweier Oszillatoren

In der klassischen Mechanik kann die Kopplung zweier Oszillatoren mittels elastischer Federn beschrieben werden. Abbildung (2.2) zeigt schematisch die Kopplung zweier Massepunkte $m_1 = m$ und $m_2 = m$ über eine Feder der Stärke s . Beide Massepunkte seien zudem durch Federn der Stärke k an feste Wände gekoppelt. Die Bewegung erfolgt in y -Richtung.

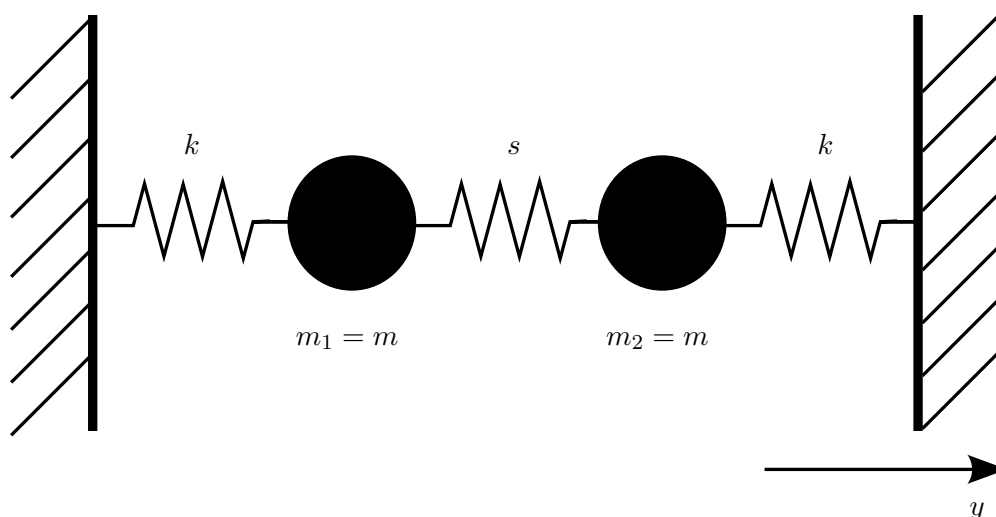


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung zur Kopplung zweier Massepunkte m_1 und m_2 über eine Feder s .

Wird nun der Massenpunkt m_1 zum Zeitpunkt $t = 0$ ausgelenkt und losgelassen, entsteht eine Schwingung, die sich durch die Kopplung s auch auf den Massenpunkt m_2 auswirkt. Die Bewegungsgleichungen für die beiden Oszillatoren lauten dann

$$\begin{aligned} m\ddot{y}_1 &= -ky_1 + s(y_2 - y_1) \\ m\ddot{y}_2 &= -ky_2 - s(y_2 - y_1) \quad . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Die y_i bezeichnen dabei die Auslenkungen der Massepunkte aus ihrer jeweiligen Ruhelage heraus.

Die Lösung für Gleichung (2.20) lässt sich, mit den Anfangsbedingungen $y_2(0) = \dot{y}_1(0) = \dot{y}_2(0) = 0$ und $y_1(0) = A$, schreiben als

$$\begin{aligned} y_1(t) &= A \cos(\omega_G t) \cdot \cos(\omega_S t) \\ y_2(t) &= A \sin(\omega_G t) \cdot \sin(\omega_S t) \quad . \end{aligned} \quad (2.21)$$

Die entstehende Schwingung ist eine Überlagerung einer schnellen Oszillation mit der Grundfrequenz ω_G und einer langsamen Oszillation mit der Schwebungsfrequenz ω_S . Dabei gilt für ω_G und ω_S

$$\begin{aligned} \omega_G &= \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \\ \omega_S &= \frac{|\omega_1 - \omega_2|}{2} \quad , \end{aligned} \quad (2.22)$$

mit $\omega_1 = \sqrt{k/m}$ und $\omega_2 = \sqrt{(k+2s)/m}$. In Abbildung (2.3) ist die Lösung nach (2.21) exemplarisch dargestellt. Deutlich zu sehen ist, dass die Einhüllenden der Schwingungen der beiden Oszillatoren entgegengesetzt zueinander verlaufen. Bei maximaler Amplitude von Schwinger y_1 ist die Amplitude von y_2 minimal und umgekehrt.

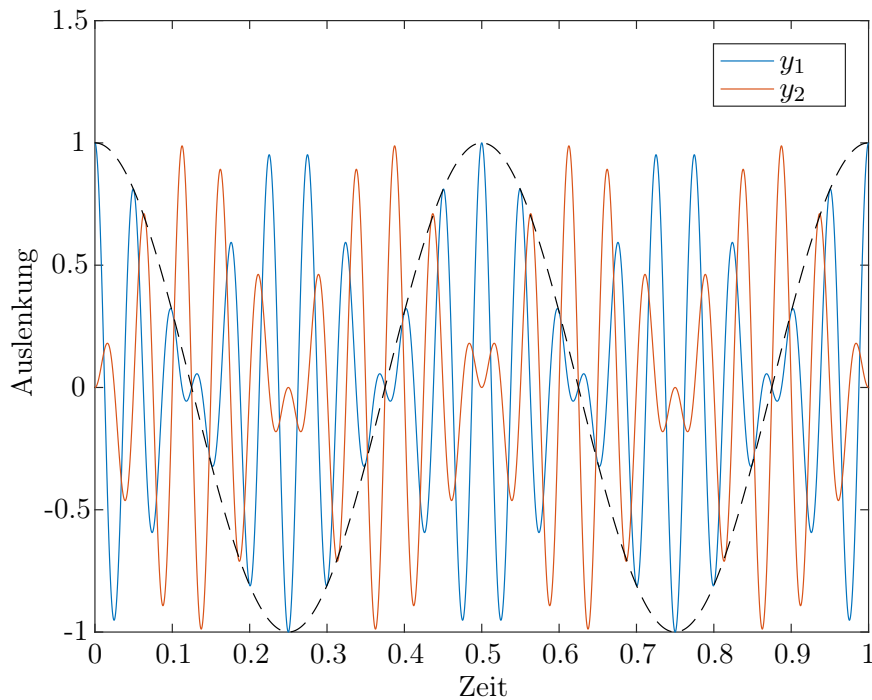


Abbildung 2.3: Beispiel einer Schwebung von zwei Oszillatoren y_1 und y_2 . Gestrichelt ist die langsame Einhüllende mit der Frequenz ω_S für einen Oszillator eingezeichnet.

2.3 Nanomechanik

2.3.1 Euler-Bernoulli-Balkentheorie

Zur Beschreibung der Schwingung eines nanomechanischen Resonators wird die Euler-Bernoulli-Gleichung verwendet [Cle03]. Hierfür wird ein linearer, homogener und isotroper Festkörper mit konstanter Querschnittsfläche betrachtet, dessen lange Seite l entlang der z -Achse orientiert ist. Die Länge l sei hierbei groß verglichen zu seiner Breite b und Höhe h . Für den Balken gelte weiterhin, dass es sich bei der Schwingung um eine reine Biegemode handle, sodass Rotationsträgheit und Schubverformung vernachlässigt werden können. Für die Translationsschwingung $u_y(z, t)$ entlang der y -Achse gilt dann

$$EI_x \frac{\partial^4}{\partial z^4} u_y(z, t) + \rho A \frac{\partial^2}{\partial t^2} u_y(z, t) = 0 \quad . \quad (2.23)$$

Dabei bezeichnet E das Elastizitätsmodul, $I_x = \int_A y^2 dA$ das Flächenträgheitsmoment, ρ die Dichte des Materials und $A = b \cdot h$ die Querschnittsfläche des Balkens.

Mit einem Separationsansatz $u_y(z, t) = u_y(z) \cdot \exp[-i\omega t]$ vereinfacht sich der ortsabhängige Teil von Gleichung (2.23) zu

$$\frac{\partial^4}{\partial z^4} u_y(z) + \beta^4 u_y(z) = 0 \quad , \quad (2.24)$$

mit dem Parameter $\beta^4 = \frac{\rho A \omega^2}{EI_x}$. Für einen beidseitig fest eingespannten Balken mit $u_y(0) = u_y(l) = 0$ und $u'_y(0) = u'_y(l) = 0$ lautet die allgemeine Lösung von Gleichung (2.24)

$$u_y(z) = a [\cos(\beta z) - \cosh(\beta z)] - b [\sin(\beta z) - \sinh(\beta z)] \quad . \quad (2.25)$$

Gleichung (2.25) besitzt nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn die Determinante des zugehörigen Gleichungssystems obiger Randbedingungen verschwindet. Somit muss

$$\cos(\beta_n l) \cosh(\beta_n l) - 1 = 0 \quad (2.26)$$

gelten, mit $\beta_n^4 = \frac{\rho A \omega_n^2}{EI_x}$. Der Subskript $n \in \mathbb{N}$ bezeichnet dabei die n -te Hauptmode des Systems mit entsprechender Frequenz ω_n . Gleichung (2.26) kann numerisch gelöst werden. Für die ersten drei Hauptmoden erhält man $\beta_1 l = \pm 4.73004$, $\beta_2 l = \pm 7.85320$ und $\beta_3 l = \pm 10.99561$. Für die Koeffizienten a und b zur Hauptmode n erhält man unter Berücksichtigung der gegebenen Anfangsbedingungen $a_1/b_1 = 1.0178$, $a_2/b_2 = 0.9992$ beziehungsweise $a_3/b_3 = 1.0000$. Weiter lässt sich die Abhängigkeit der Frequenz ω_1 der ersten Hauptschwingungsmode von der Länge des Balkens angeben. Mit der obigen Definition von β_1^4 lässt sich schreiben:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{EI_x}{\rho A}} \beta_1^2 = \sqrt{\frac{EI_x}{\rho A}} \frac{\beta_1^2 l^2}{l^2} \propto \frac{1}{l^2} \quad (2.27)$$

Wegen $\beta_1 l = \text{const}$ verhält sich somit die Frequenz reziprok zum Quadrat der Länge des Balkens.

Für einen Balken der Länge $l = 217.2 \text{ \AA}$ ist in Abbildung (2.4) die analytische Lösung nach Gleichung (2.25) des Auslenkungsprofils der ersten Hauptschwingungsmode dargestellt.

2.4 Synchronisierung mechanischer Schwingungen

Unter dem Begriff der Synchronisierung versteht man allgemein die gegenseitige Angleichung des Schwingungsverhaltens (Frequenz, Phase) zweier oder mehrerer autonomer Oszillatoren mit unterschiedlichen Eigenfrequenzen, bedingt durch deren Wechselwirkung [Pik03]. Es handelt sich dabei

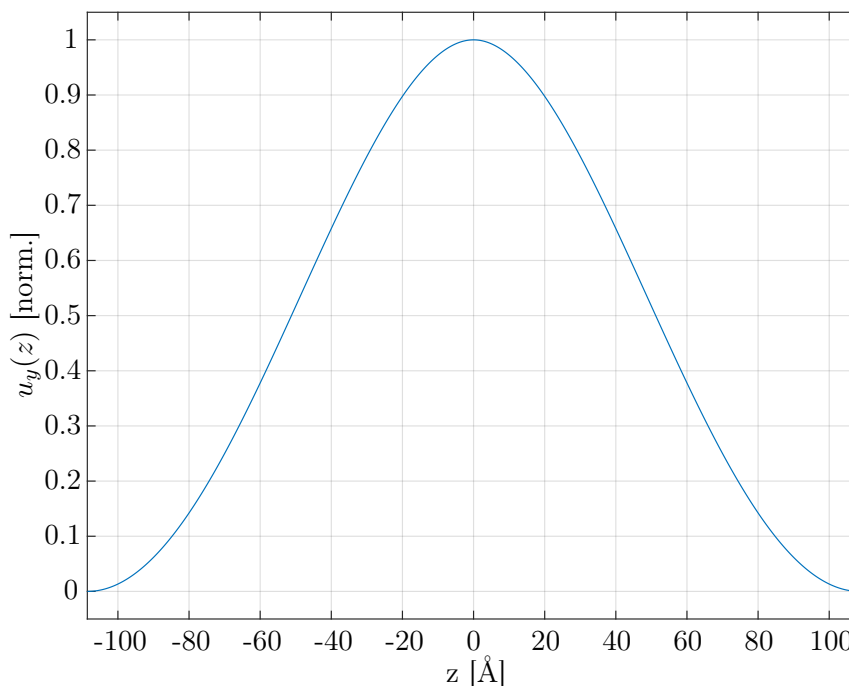


Abbildung 2.4: Auslenkungsprofil der ersten Hauptschwingungsmode nach Euler-Bernoulli für einen Balken der Länge $l = 217.2 \text{ \AA}$. Der Ursprung der z -Achse wurde auf die Mitte des Balkens gelegt. Die Auslenkung wurde auf ihr Maximum (1.133 \AA) normiert.

um eine dynamische Eigenschaft des Systems. Als synchrone Schwingung zweier Oszillatoren bezeichnet man die sich dann einstellende Oszillation mit einer gemeinsamen Frequenz beziehungsweise einer zeitlich konstanten Phasenbeziehung $\Delta\varphi = |\varphi_2 - \varphi_1| = \text{const}$. Beispiele hierfür sind die **gleichphasige** ($\Delta\varphi = 0$) und die **gegenphasige** Schwingung ($\Delta\varphi = \pi$).

2.4.1 Synchronisierung zweier autonomer Oszillatoren

Nachfolgend soll am Beispiel zweier gekoppelter Oszillatoren die Synchronisierung ihrer Schwingungen mathematisch beschrieben werden. Dabei wird die Dynamik des gekoppelten Systems einzig über die zeitliche Änderung der Phasen beschrieben. Dieser Ansatz ist gültig, solange die Kopplung zwischen den Oszillatoren schwach genug ist, sodass die Amplituden zeitlich konstant sind [Pik03]. Generell lässt sich nur bei schwacher Kopplung von Synchronisierung sprechen, da bei starker Kopplung ein Oszillator der Schwingung des Anderen folgt und seine eigene, autonome Schwingung keinen Einfluss auf das Verhalten hat.

Die Bewegungsgleichungen zweier Oszillatoren im ungekoppelten Fall lauten allgemein:

$$\begin{aligned} m^{(1)}\ddot{y}^{(1)} &= f^{(1)}\left(y^{(1)}\right) \\ m^{(2)}\ddot{y}^{(2)} &= f^{(2)}\left(y^{(2)}\right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Dabei bezeichnen $m^{(i)}$ die Massen und $y^{(i)}$ die Schwerpunktauslenkungen der beiden Oszillatoren. $f^{(i)}$ stellt die Gesamtkraft dar, die auf den jeweiligen Oszillator wirkt. Weiter existiere für Gleichung (2.28) eine stabile, $T_0^{(i)}$ -periodische Lösung $y_0^{(i)}$ mit $y_0^{(i)}(t) = y_0^{(i)}(t + T_0^{(i)})$.

Zur Beschreibung der Dynamik des Systems (2.28) wird eine Phasenkoordinate φ entlang des periodischen Grenzyklus definiert, sodass diese monoton mit der Bewegungsrichtung wächst. Für die jeweiligen Phasen $\varphi^{(i)}$ gilt:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^{(1)} &= \omega_0^{(1)} \\ \dot{\varphi}^{(2)} &= \omega_0^{(2)} \quad , \end{aligned} \quad (2.29)$$

sodass $\varphi^{(i)}$ einheitlich mit der Zeit wächst.

Unter der Voraussetzung, dass die Kopplung zwischen den beiden Oszillatoren schwach ist, lässt sich die Wechselwirkung der beiden Resonatoren als kleine Störung auffassen. Gleichung (2.28) lässt sich dann schreiben als

$$\begin{aligned} m^{(1)}\ddot{y}^{(1)} &= f^{(1)}\left(y^{(1)}\right) + k \cdot q^{(1)}\left(y^{(1)}, y^{(2)}\right) \\ m^{(2)}\ddot{y}^{(2)} &= f^{(2)}\left(y^{(2)}\right) + k \cdot q^{(2)}\left(y^{(2)}, y^{(1)}\right) \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Die Funktion $q^{(i)}$ beschreibt dabei die Kopplung zwischen den Oszillatoren und der Vorfaktor $k \geq 0$ die Stärke der Kopplung. Für $k = 0$ ist das System entkoppelt und beide Oszillatoren schwingen autonom.

Um die zeitliche Änderung der Phase des gekoppelten Systems (2.30) zu bestimmen wird in der Zeitableitung von $\varphi^{(i)}$ die Kettenregel angewendet. Man erhält:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^{(1)} &= \frac{d\varphi^{(1)}}{dt} = \frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial\dot{y}^{(1)}} \frac{d\dot{y}^{(1)}}{dt} \\ &= \frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial\dot{y}^{(1)}} \frac{1}{m^{(1)}} \left[f^{(1)}\left(y^{(1)}\right) + k \cdot q^{(1)}\left(y^{(1)}, y^{(2)}\right) \right] \\ &= \omega_0^{(1)} + \frac{k}{m^{(1)}} \frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial\dot{y}^{(1)}} q^{(1)}\left(y^{(1)}, y^{(2)}\right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Im letzten Schritt wurde verwendet, dass $1/m^{(1)}f^{(1)}(y^{(1)}) = \ddot{y}^{(1)}$ gerade der Bewegungsgleichung (2.28) des ungestörten Systems entspricht, von dem die zeitliche Änderung der Phase nach Gleichung (2.29) bekannt ist.

Für kleines k ist die Störung durch die Kopplung q schwach, sodass die Lösung des gestörten Systems (2.30) in der Nähe der stabilen, ungestörten Lösung y_0 liegt. In erster Näherung kann daher der letzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.31) an der Stelle y_0 ausgewertet werden. Man erhält dann:

$$\dot{\varphi}^{(1)} = \omega_0^{(1)} + \frac{k}{m^{(1)}} \frac{\partial \varphi^{(1)}(y_0^{(1)})}{\partial \dot{y}^{(1)}} q^{(1)}(y_0^{(1)}, y_0^{(2)}) \quad (2.32)$$

Für periodische Lösungen kann ein direkter Zusammenhang zwischen Ort, Geschwindigkeit und Phase hergestellt werden, wodurch eine neue Funktion $\tilde{q}^{(i)}$ eingeführt werden kann, sodass

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^{(1)} &= \omega_0^{(1)} + \tilde{k} \cdot \tilde{q}^{(1)}(\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}) \\ \dot{\varphi}^{(2)} &= \omega_0^{(2)} + \tilde{k} \cdot \tilde{q}^{(2)}(\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

gilt. Die $\tilde{q}^{(i)}$ sind stetig differenzierbare Funktionen mit 2π -Periodizität in beiden Argumenten und können daher in Fourierreihen dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \tilde{q}^{(1)} &= \sum_{j,l} a_{j,l}^{(1)} \exp \left[ij\varphi^{(1)} + il\varphi^{(2)} \right] \\ \tilde{q}^{(2)} &= \sum_{l,j} a_{l,j}^{(2)} \exp \left[ij\varphi^{(1)} + il\varphi^{(2)} \right] . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Substituiert man die Lösung der Gleichung (2.29) $\varphi^{(i)} = \omega_0^{(i)}t + \varphi_0^{(i)}$ des ungestörten Systems in Gleichung (2.34) erhält man in erster Näherung

$$\begin{aligned} \tilde{q}^{(1)} &= \sum_{j,l} a_{j,l}^{(1)} \exp \left[ij\varphi_0^{(1)} + il\varphi_0^{(2)} \right] \cdot \exp \left[ij\omega_0^{(1)}t + il\omega_0^{(2)}t \right] \\ \tilde{q}^{(2)} &= \sum_{j,l} a_{l,j}^{(2)} \exp \left[ij\varphi_0^{(1)} + il\varphi_0^{(2)} \right] \cdot \exp \left[ij\omega_0^{(1)}t + il\omega_0^{(2)}t \right] . \end{aligned} \quad (2.35)$$

Abhängig von den Summationsindizes j, l und den Eigenfrequenzen $\omega_0^{(1)}$ und $\omega_0^{(2)}$ liefert die hintere der beiden Exponentialfunktionen langsam und schnell oszillierende Terme (verglichen mit $1/\tilde{k}$). Erstere entsprechen dem Resonanzfall $j\omega_0^{(1)} + l\omega_0^{(2)} \approx 0$. Die schnell oszillierenden Terme tragen

nur unwesentlich zur Phasenänderung in Gleichung (2.33) bei ($\propto \tilde{k}$), wohingegen die langsam oszillierenden Terme zu einer großen, wenn auch langsamen, Änderung der Phase führen können. Dies sieht man, wenn man Gleichung (2.35) in Gleichung (2.33) einsetzt und integriert. Die Phasenänderung durch die Störung \tilde{q} ist dann proportional zu $\left(j\omega_0^{(1)} + l\omega_0^{(2)}\right)^{-1}$ und wird groß für $\left|j\omega_0^{(1)} + l\omega_0^{(2)}\right| \rightarrow 0$.

Angenommen die beiden Oszillatoren sind annähernd in Resonanz, das heißt

$$\frac{\omega_0^{(1)}}{\omega_0^{(2)}} \approx \frac{m}{n} \quad , \quad (2.36)$$

so sind die dominanten Terme in \tilde{q} diejenigen Summanden mit $j = n \cdot i$ und $l = -m \cdot i$. Damit lassen sich die Gleichungen (2.33) als

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^{(1)} &= \omega_0^{(1)} + \tilde{k}q^{(1)} \left(n\varphi^{(1)} - m\varphi^{(2)} \right) \\ \dot{\varphi}^{(2)} &= \omega_0^{(2)} + \tilde{k}q^{(2)} \left(m\varphi^{(2)} - n\varphi^{(1)} \right) \quad , \end{aligned} \quad (2.37)$$

mit $\tilde{k} \geq 0$ darstellen. Die Phasendifferenz $\Delta\varphi = m\varphi^{(2)} - n\varphi^{(1)}$ kann dann durch

$$\Delta\dot{\varphi} = \Delta\omega + \tilde{k}q(\Delta\varphi) \quad (2.38)$$

beschrieben werden, mit $\Delta\omega = m\omega_0^{(2)} - n\omega_0^{(1)}$ und $q(\Delta\varphi) = mq^{(2)}(-\Delta\varphi) - nq^{(1)}(\Delta\varphi)$. Da q 2π -periodisch ist, existiert im Intervall $\Delta\varphi \in [0, 2\pi)$ ein Minimal- q_{\min} und Maximalwert q_{\max} . Damit hat Gleichung (2.38) für eine Frequenzverstimmung

$$\tilde{k}q_{\min} < \Delta\omega < \tilde{k}q_{\max} \quad (2.39)$$

mindestens ein Paar stationärer $\Delta\varphi_{\text{stat}}$ und mindestens eine stabile Lösung⁴ $\Delta\varphi_s = \text{const}$. [Pik03]. Man spricht deshalb bei Gleichung (2.39) vom Synchronisierungsregime. Daher lässt sich ein Zusammenhang zwischen der Kopplungsstärke und der Frequenzabweichung in einem $\Delta\omega$ - \tilde{k} -Diagramm herleiten. Das Synchronisationsregime ist dabei begrenzt von zwei Geraden mit Schnittpunkt bei $\Delta\omega = 0$ und $\tilde{k} = \tilde{k}_0$. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung (2.5) schematisch dargestellt.

⁴Zur Überprüfung wird die zweite Ableitung von Gleichung (2.38) an der Stelle $\Delta\varphi_{\text{stat}}$ gebildet. Für $\dot{q}(\Delta\varphi_{\text{stat}}) < 0$ ist die Lösung stabil. Für eine stetig differenzierbare 2π -periodische Funktion ist dies offensichtlich im betrachteten Intervall erfüllt.

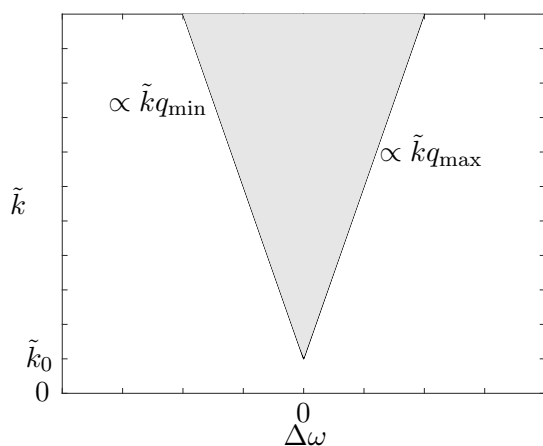


Abbildung 2.5: Zusammenhang zwischen Kopplungsstärke \tilde{k} und Frequenzabweichung $\Delta\omega$ bei der Synchronisierung zweier Oszillatoren. Der grau schraffierte Bereich stellt das Synchronisierungsregime dar.

Für die bisherige Herleitung war die genaue funktionale Gestalt der Kopplung q nicht relevant. Die einfachste Funktion, die die geforderten Eigenschaften von q erfüllt ist $\sin(\cdot)$. Die zeitliche Änderung der Phasendifferenz lautet dann

$$\Delta\dot{\varphi} = \Delta\omega + \tilde{k} \sin(\Delta\varphi) \quad . \quad (2.40)$$

In Abbildung (2.6) ist exemplarisch die Phasendynamik nach Gleichung (2.40) bei konstanter Kopplungsstärke für verschiedene Frequenzabweichungen $\Delta\omega$ dargestellt. Man erkennt einen stufenförmigen Verlauf der Phasendifferenz für $\Delta\omega \neq 0$ mit einer Sprunghöhe von jeweils 2π . Die Anzahl der Stufen verhält sich dabei proportional zu $\Delta\omega$ und geht für große Frequenzabweichungen in einen linearen Verlauf über. Die beobachteten Stufen treten auf, wenn die Frequenzabweichung nicht innerhalb des Synchronisierungsregimes liegt (siehe Gleichung (2.39)). Mit der in Abbildung (2.6) gewählten Kopplungsstärke $\tilde{k} = 1$ und $q = \sin(\Delta\varphi)$ ergibt sich als Synchronisierungsregime

$$-1 < \Delta\omega < +1 \quad ,$$

was nur für die beiden unteren Graphen in Abbildung (2.6) erfüllt ist.

Gleichung (2.40) wird für die weitere Diskussion von Synchronisierungseffekten verwendet. Eine Verifizierung der Wahl von $\sin(\cdot)$ als Kopplungsfunktion erfolgt in Kapitel (4) anhand von Simulationsdaten.

2.4.2 Synchronisierung eines einzelnen Oszillators durch eine treibende Kraft

Analog zur Kopplung zweier autonomer Oszillatoren lässt sich auch der Einfluss einer externen periodischen Kraft auf die Schwingung eines einzelnen Oszillators beschreiben. Die treibende Kraft sei proportional zu $\sin(\omega t)$ mit einer Frequenz ω . Bezeichnet $y(t)$ die Schwerpunktauslenkung des Oszillators zur Zeit t , so lässt sich die Bewegungsgleichung des gekoppelten Systems über

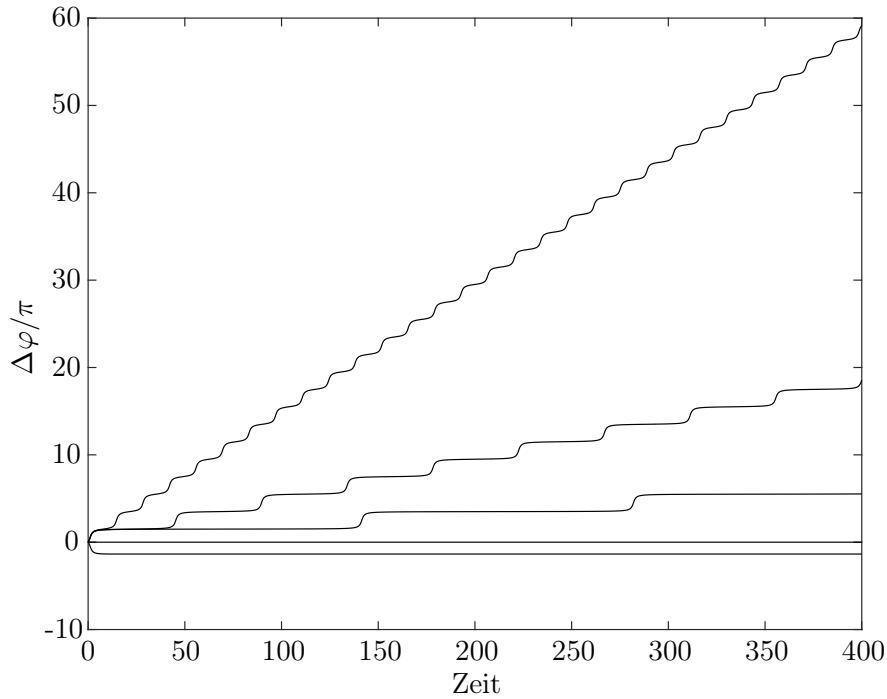


Abbildung 2.6: Phasendynamik für zwei gekoppelte autonome Oszillatoren nach Gleichung (2.40). Die Kopplungsstärke wurde auf $\tilde{k} = 1$ gesetzt. Die Frequenzverstimmung beträgt (von oben nach unten) $\Delta\omega = 1.1, 1.01, 1.001, 0, -0.9$.

$$m\ddot{y} = f(y) + \varepsilon \sin(\omega t) \quad , \quad (2.41)$$

mit einer Kopplungsstärke $\varepsilon \geq 0$ beschreiben. Die Kopplung sei wiederum hinreichend schwach, sodass die Argumentation analog wie oben verläuft.

Für die zeitliche Änderung der Phasendifferenz $\Delta\varphi = m\varphi - n\omega t$ (mit $m, n \in \mathbb{N}$) ergibt sich dann entsprechend zu Gleichung (2.40)

$$\Delta\dot{\varphi} = \Delta\omega + \tilde{\varepsilon} \sin(\Delta\varphi) \quad , \quad (2.42)$$

mit der Frequenzverstimmung $\Delta\omega = m\omega_0 - n\omega$ zwischen der Eigenfrequenz des Oszillators ω_0 und der treibenden Kraft und $\tilde{\varepsilon} \geq 0$. Nach [Pik03] wird Gleichung (2.42) in dieser Form auch als Adler-Gleichung bezeichnet, benannt nach R. Adler [Adl46].

2.4.3 Synchronisierung höherer Ordnung

In der bisherigen Betrachtung der Synchronisierung mechanischer Schwingungen wurde stets eine geringe Frequenzabweichung $\Delta\omega$ vorausgesetzt. Es kann aber durchaus auch zu weit komplexerem Synchronisierungsverhalten kommen, wenn beispielsweise, im Szenario von Abschnitt (2.4.2), der

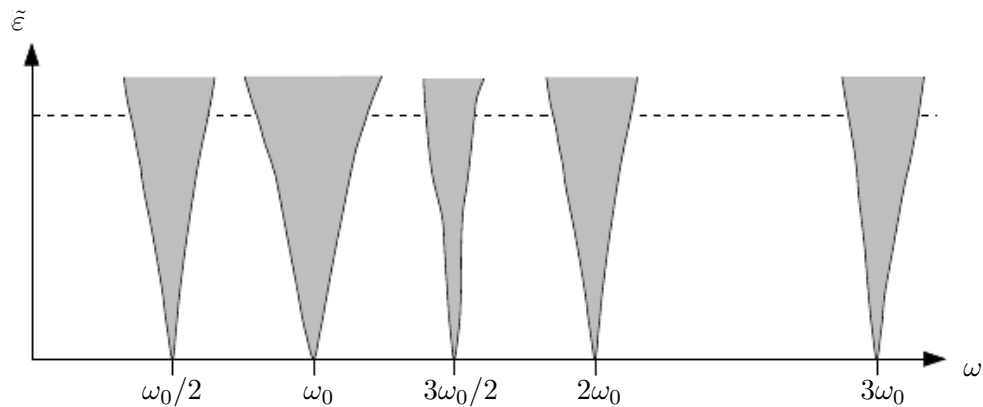


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung der Arnold-Tongues am Beispiel eines periodisch getriebene Oszillators. Gezeigt sind die Synchronisierungsregimes für verschiedene Verhältnisse von ω/ω_0 in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke $\tilde{\varepsilon}$ [Pik03].

Oszillator von einer Kraft mit Frequenz $\omega = 2\omega_0$ getrieben wird. Man spricht dann von Synchronisierung höherer Ordnung. Hier lässt sich dann ein Ensemble von Synchronisationsregimes definieren. Abbildung (2.7) zeigt mehrere solcher Synchronisierungsregimes. Eine Darstellung dieser Form wird auch Arnold-Tongues genannt (Tongues, englisch für Zungen, bezieht sich dabei auf den charakteristischen Verlauf der einzelnen Regimes).

3 Simulation

Nachfolgend wird die in dieser Arbeit verwendete Simulationsmethodik vorgestellt. Insbesondere werden die verwendeten Programme und die einzelnen Simulationsschritte beschrieben. Der verwendete Zeitschritt beträgt stets 10^{-15} s. Falls nicht anders angegeben, wird für die Temperaturregelung immer der in (2.1.2) beschriebende Nosé-Hoover-Thermostat verwendet.

3.1 Verwendete Programme

- Zur Simulation der Dynamik der untersuchten Nanobrücken wird die freie, quelloffene Software LAMMPS [Lab16] (kurz für **L**arge-scale **A**tomic/**M**olecular **M**assively **P**arallel **S**imulator) verwendet.
- Die Auswertung der Simulationsdaten erfolgt mit der numerischen Mathematik-Software MATLAB [Mat16b] (**M**atrix **L**aboratory). Insbesondere wurden die Toolboxen CURVE FITTING und GENETIC ALGORITHM sowie NEURAL NETWORK genutzt. Sämtliche Plots dieser Arbeit wurden mit Matlab erstellt.
- Zur Visualisierung der erzeugten Strukturen wurde das Graphikprogramm VMD [Hum16] (**V**isual **M**olecular **D**ynamics) verwendet.

3.2 Simulationsmethodik

(I) Strukturzeugung und Oberflächenrekonstruktion Zu Beginn der Simulationen werden die Strukturen erzeugt. Dabei werden Einheitszellen (EZ) der Diamantstruktur von Silizium aneinandergesetzt um die gewünschte Geometrie zu erstellen. Zur Stabilisierung der erzeugten Nanobrücken, werden diese jeweils an ihren langen Enden an festen Aufhängepunkten, der Größe $6 \times 6 \times 4$ EZ, fixiert. Als Kopplung dient ein dünner Nanodraht, der mittig auf den beiden Brücken platziert wird. Die Brücken haben eine räumliche Ausdehnung von $6 \times 6 \times 40$ EZ mit langer Achse in z -Richtung. Der Draht ist mit einer Größe von $4 \times 4 \times 20$ EZ kürzer und dünner als die beiden Brücken und ist in x -Richtung orientiert. Eine Abbildung der erzeugten Strukturen im Bulk ist in Abbildung (3.1) dargestellt.

Schneidet man gedanklich einen Silizium-Kristall entlang der (100)-Ebene, werden jedem Atom der entstehenden Oberfläche zwei Bindungen aufgebrochen. Jeweils zwei benachbarte Silizium-Atome binden sich dann mit jeweils einer abgeschnittenen Bindung aneinander und bilden sogenannte Dimere [Cha79]. Ein gebildetes Dimer führt dann zu einer Verschiebung weiterer Oberflächenatome, wodurch sich zwei andere Atome nahe genug kommen können um ein weiteres Dimer zu bilden. Es kommt zu einem Art Reißverschluss-Effekt, bei dem sich schräge Reihen entlang der Oberfläche ausbilden (vergleiche Abbildung (3.3)). Bei dieser Umordnung der Oberflächenatome spricht man von Oberflächenrekonstruktion. Bevor die Rekonstruktion der Oberfläche simuliert wird, werden zwei Eckatome des Nanodrahtes entfernt (gekennzeichnet durch die Pfeile in Abbildung (3.1)). In

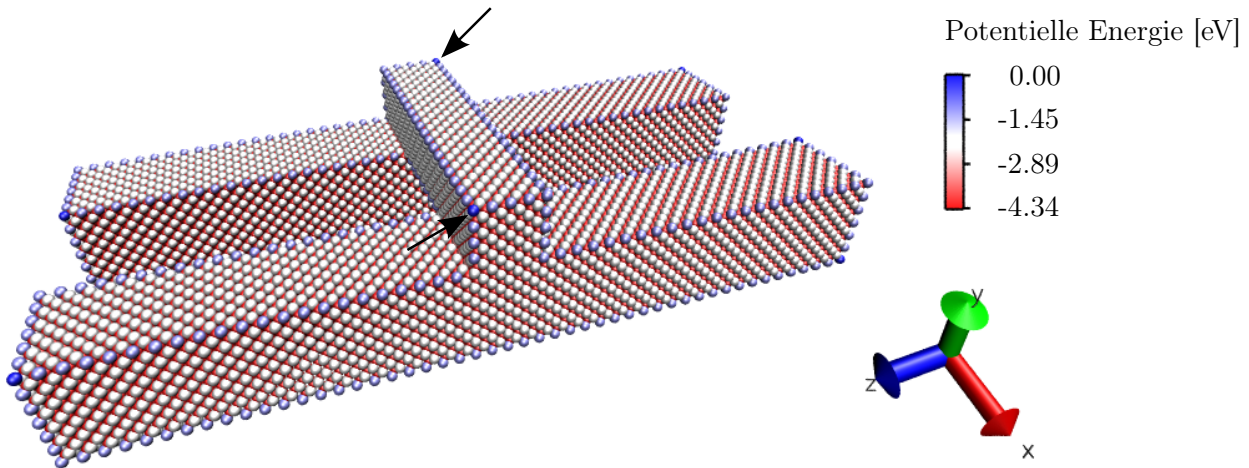


Abbildung 3.1: Erzeugte Bulk-Geometrie zweier $6 \times 6 \times 40$ EZ großer Nanobrücken gekoppelt über einen $4 \times 4 \times 20$ EZ Nanodraht in perspektivischer Darstellung. Die Farbkodierung entspricht der potentiellen Energie. Die beiden Pfeile markieren die Atome, die vor der Rekonstruktion der Oberfläche entfernt werden.

anfänglichen Ansätzen hat sich gezeigt, dass beim Einsetzen der Rekonstruktion diese beiden Atome ihre Bindung zum System verlieren und sich aus der Struktur herauslösen, da keine Bindungspartner zur bevorzugten Dimerstruktur zur Verfügung stehen.

Um die Oberflächenrekonstruktion zu simulieren, werden die Atomgeschwindigkeiten auf eine von Null verschiedene Temperatur initialisiert und thermalisiert. Üblicherweise werden alle Atome des Systems (mit Ausnahme der Aufhängepunkte) im NVT-Ensemble behandelt. Dabei ist es wichtig, bei möglichst niedrigen Temperaturen zu arbeiten (≈ 20 K bis 50 K), da ansonsten die Umordnung der Oberflächenatome zu schnell abläuft und isolierte, unrekonstruierte Atome/-reihen entstehen⁵. In dieser Arbeit wird ein anderer Ansatz verwendet, um eine sauberere und schnellere Rekonstruktion zu erreichen. Dabei wird das simulierte System in Bulk- und Oberflächengruppen unterteilt, wie in Abbildung (3.2) dargestellt. Die Oberflächengruppe umschließt dabei den Bulk mit einer Dicke von jeweils 1 Einheitszelle.

Die Atome der Oberflächengruppen werden in einem reinen NVE-Ensemble behandelt. Dadurch werden an den Oberflächen lokal höhere Temperaturen erlaubt, was zu einer schnelleren Rekonstruktion führt. Um die Umordnung dennoch sauber ablaufen zu lassen, wird die bei der Rekonstruktion frei werdende Energie in Form von Wärme an die Atome der Bulkgruppen abgeführt, die in einem NVT-Ensemble mit Nosé-Hoover-Thermostat beschrieben werden. Die Simulation erfolgt bei einer Temperatur von 20 K über einen Zeitraum von 8 ns. In Abbildung (3.3) ist diese NVE-NVT-kombinierte Variante der reinen NVT-Simulation am Beispiel einer einzelnen $6 \times 6 \times 40$ Nanobrücke gegenübergestellt.

⁵Bei zu großen Temperaturen erhöht sich die Wahrscheinlichkeit, dass sich gleichzeitig an mehreren Stellen Dimere und davon ausgehend viele einzelne Dimerreihen bilden. Verlaufen diese Reihen versetzt zueinander, bleiben einzelne Atome isoliert, da kein Bindungspartner mehr zur Verfügung steht.

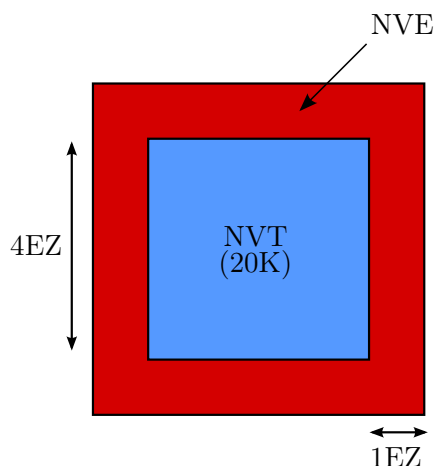
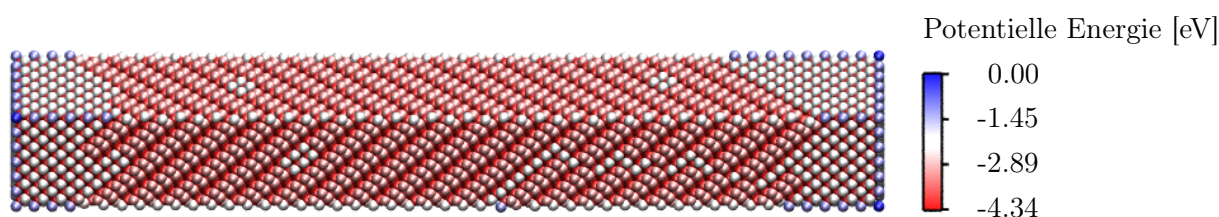
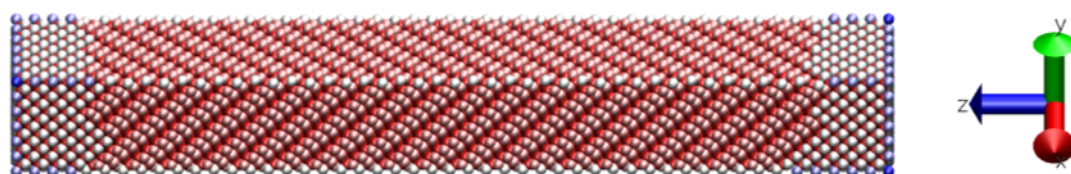


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Simulationsverfahrens zur Oberflächenrekonstruktion. Zu sehen ist ein Querschnitt durch einen Balken. Das Oberflächenelement wird im NVE-Ensemble, das Bulkenelement im NVT-Ensemble behandelt.



(a) Simulation in reinem NVT-Ensemble bei 20K



(b) Simulation in NVE-NVT-kombinierter Variation bei 20K

Abbildung 3.3: Simulierte Oberflächenrekonstruktion in den beiden vorgestellten Verfahren in orthographischer Darstellung, jeweils simuliert über eine Zeit von $t = 8$ ns. Im Fall der reinen NVT-Simulation (a) ist die Rekonstruktion im Gegensatz zum NVE-NVT-kombinierten Verfahren (b) noch nicht vollständig abgeschlossen. Außerdem sind in (a) isolierte, unrekonstruierte Atome zu erkennen.

Man erkennt in den Abbildungen aus (3.3) deutlich, dass die in dieser Arbeit verwendete NVE-NVT-kombinierte Simulationsvariante sowohl eine schnellere (zu erkennen an noch nicht abgeschlossenen Dimerreihen in Abbildung (3.3a)), als auch eine exaktere Rekonstruktion der Siliziumoberflächen ermöglicht. Hierbei sei angemerkt, dass für das gekoppelte System dennoch isolierte Atome auftreten. Dies liegt daran, dass der aufliegende Kopplungsdraht einen Symmetriebruch an der Oberfläche darstellt.

Durch langsames Aufheizen (mit einer Aufheizrate von 0.5 K/ps) auf 500 K bilden isolierte Atome mit benachbarten Dimeren sogenannte Trimere. Diese Trimere können mit einem weiteren benachbarten isolierten Atom wieder in zwei Dimere zerfallen. Auf diese Weise ist es prinzipiell möglich

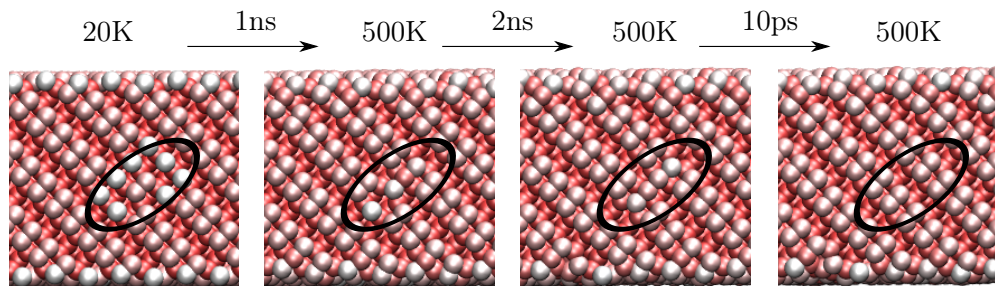


Abbildung 3.4: Durch langsames Aufheizen auf 500 K bildet sich aus einem Dimer und einem isolierten Atom ein Trimer, welches nach Thermalisierung über 2 ns mit einem weiteren isolierten Atom in zwei Dimere zerfällt.

die korrekte Oberflächenstruktur zu rekonstruieren, wenn auch über einen sehr langen Simulationszeitraum. In Abbildung (3.4) ist an einem Ausschnitt dieser Prozess veranschaulicht.

Der oben beschriebene Aufheizprozess wird im nächsten Simulationsschritt, der Kantenrekonstruktion, verwendet. Durch die dabei stattfindende Bildung von Trimeren, befindet sich das betrachtete System energetisch zwar nicht in seinem globalen Minimum, wohl aber in einem lokalen Minimum, was für die spätere Analyse der Schwingungsdynamik ausreichend ist.

(II) Kantenrekonstruktion Die im vorherigen Simulationsschritt oberflächenrekonstruierte Struktur bleibt nur bei Temperaturen bis circa 300 K stabil. Für höhere Temperaturen laufen aus energetischen Gründen weitere Umordnungsprozesse entlang der Strukturkanten ab. Um diese Kantenrekonstruktion zu simulieren, wird das bei 20 K oberflächenrekonstruierte System langsam (mit 0.5 K/ps) auf 500 K aufgeheizt. Das langsame Aufheizen ermöglicht es dem System zu relaxieren. Anschließend wird das System für 2 ns bei 500 K thermalisiert und für weitere 200 ps bei ausgeschaltetem Thermostat equilibriert, um eine mögliche, durch die Thermalisierung angeregte, Dynamik des Systems abklingen zu lassen. In Abbildung (3.5) ist die so erhaltene Kantenrekonstruktion dargestellt.

(III) Thermalisierung Im Anschluss an die Erzeugung und Rekonstruktion des betrachteten Systems werden Zwischenstände zu verschiedenen Temperaturen erzeugt. Dazu wird das System, ausgehend von der bei 500 K kantenrekonstruierten Struktur, in Schritten von 0.5 K/ps abgekühlt beziehungsweise erhitzt und anschließend für 2 ns bei der entsprechenden Temperatur thermalisiert. Das System wird dann für weitere 500 ps bei ausgeschaltetem Thermostat equilibriert. Dabei werden kinetische und potentielle Energie, Temperatur und Druck des Gesamtsystems von LAMMPS berechnet und gespeichert. Die angegebenen Zeiten wurden dabei so gewählt, dass sowohl Temperatur als auch die Gesamtenergie des Systems bis auf kleine Fluktuationen konstant sind.

Es werden auf diese Weise Zwischenstände für Temperaturen im Bereich von 4 K bis 900 K erzeugt.

(IV) Auslenkung Durch das Anlegen einer zeitlich und räumlich homogenen Kraft in positiver y -Richtung an einer der beiden Nanobrücken, wird diese aus ihrer Ruhelage heraus ausgelenkt.

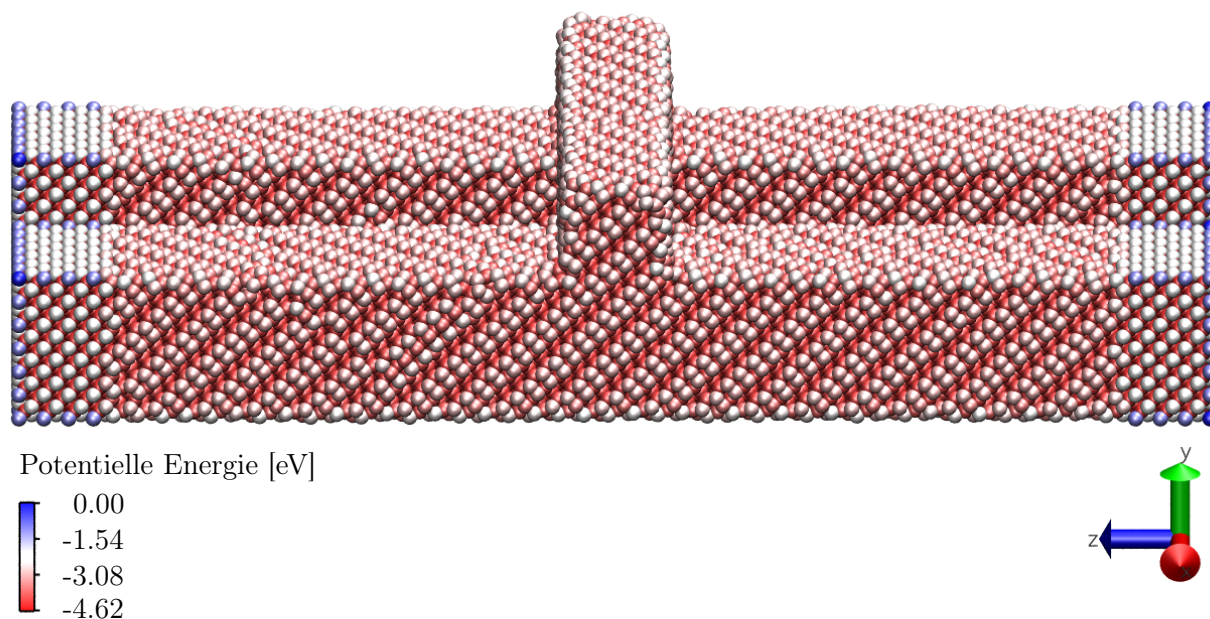


Abbildung 3.5: Oberflächen- und kantenrekonstruiertes System bei 500 K (orthographisch).

Die Kraft wirkt dabei über eine Dauer von 11 ps auf jedes Atom der Brücke, wobei das System frei, das heißt ohne Thermostat, behandelt wird. Dabei werden die Schwerpunktskoordinaten der ausgelenkten Brücke gespeichert. Die Auslenkungsdauer und -kraft wird dabei so gewählt, dass die Brücke um 2% bis 5% ihrer Dicke ausgelenkt wird. Auf diese Weise sollen nichtlineare Effekte, die vom Betrag der Auslenkung abhängig sind, minimiert werden. Die Linearität der Auslenkung wird dabei über die Einführung einer effektiven Federstärke überprüft (vergleiche Abschnitt (4.1)). Um thermische Oszillationen des Systems zu korrigieren, wird zudem eine weitere Simulation ohne externe Kraft durchgeführt. Die daraus ermittelten Schwerpunktskoordinaten werden dann von denen des ausgelenkten Systems abgezogen um die effektive Auswirkung der externen Kraft auf die Nanobrücke zu quantisieren. Von dem ausgelenkten System wird anschließend ein Zwischenstand erstellt um im nächsten Schritt das Schwingungsverhalten des gekoppelten Systems zu untersuchen.

Unabhängig hiervon wird in einem zusätzlichen Simulationsschritt das Auslenkungsprofil der Brücke entlang ihrer langen Achse untersucht (siehe Abschnitt (2.3.1)). Hierfür wird die auszulenkende Nanobrücke durch einen Langevin-Thermostat in ihrer Auslenkung gedämpft. Nach 500 ps wird der Thermostat ausgeschaltet. Die Kraft wirkt dann weitere 100 ps auf die Brücke, welche dann schwache Oszillationen (in der Größenordnung von 10^{-2} Å) um eine konstante Gleichgewichtsauslenkung ausführt.

(V) Freie Oszillation Die nächsten Simulationsschritte widmen sich der Untersuchung der Dynamik des gekoppelten Systems. Im Fall der freien Oszillation wird das Schwingungsverhalten des ausgelenkten Systems aus dem vorherigen Simulationsschritt betrachtet. Dabei werden äußere Einflüsse, wie Thermostate oder das externe Kraftfeld ausgeschaltet. Die Oszillation verläuft somit frei

und wird in der mikrokanonischen Gesamtheit behandelt. Das Schwingungsverhalten des Systems wird über 10 ns betrachtet um möglichst viele Oszillationen zu beobachten. Insbesondere wird das Kopplungsverhalten qualitativ anhand des in (2.2) hergeleiteten Zusammenhangs der Schwebung analysiert. Weiter wird der Einschwingvorgang untersucht, um zu überprüfen, inwiefern die unausgelenkte Brücke der Ausgelenkten folgt.

(VI) Oszillation mit periodischer treibender Kraft Im letzten Simulationsabschnitt wird die getriebene Oszillation untersucht. Die Auslenkung aus Punkt **(IV)** entfällt hierbei. Stattdessen wird eine periodische externe Kraft der Form $f(t) = A \cdot \sin(\omega t)$ angelegt, wobei die treibende Frequenz ω derart gewählt wird, dass $\omega \approx \omega_0^{(1)}$ gilt, wobei $\omega_0^{(1)}$ die autonome Resonanzfrequenz der zu treibenden Brücke bezeichnet. Durch das Treiben des Resonators auf (beziehungsweise in der Nähe) seiner Resonanzfrequenz wird immer mehr Energie in das System gepumpt. Um eine Resonanzkatastrophe zu verhindern, muss diese Energie wieder aus dem System gezogen werden. Hierfür werden Nosé-Hoover-Thermostate in den Aufhängepunkten beider Brücken verwendet. Dabei wird ein Verfahren, ähnlich zu dem im Simulationsschritt **(I)** der Oberflächenrekonstruktion, verwendet. Es wird erneut ein Bulkelement der Aufhängepunkte definiert (mit jeweils 1EZ Abstand zum Rand), welches auf die gewünschte Temperatur thermalisiert wird. Das Oberflächenelement wird nicht im Integrator behandelt. Dies hat den Vorteil, dass die Brücken immernoch fest an beiden Seiten eingespannt sind und sich nicht verdrehen können.

In einem weiteren Teil, werden die Punkte **(I)**-**(III)** wiederholt, wobei die freie Brücke (das heißt, die ungetriebene der beiden Brücken) um eine Einheitszelle verlängert wird, sodass diese mit einer kleineren Frequenz $\omega_0^{(2)} < \omega_0^{(1)}$ schwingen will. Die kürzere Nanobrücke wird dann erneut getrieben und das Synchronisierungsverhalten zwischen den beiden Resonatoren in Abhängigkeit von der Amplitude A der treibenden Kraft, dem Frequenzverhältnis $\omega/\omega_0^{(1)}$ und der Systemtemperatur T untersucht.

4 Auswertung

4.1 Auslenkung

Um die Dynamik des gekoppelten Systems möglichst einfach zu halten, wird die Amplitude der Oszillationen derart gewählt, dass nichtlineare Effekte während des Schwingvorgangs vernachlässigt werden können. Um die Linearität zu überprüfen, wird eine temperaturabhängige Studie des Auslenkungsprozesses durchgeführt und eine effektive Federhärte k bestimmt.

Betrachtet man einen Resonator der Masse m , der durch eine zeitlich und räumlich homogene Kraft f in positive y -Richtung ausgelenkt wird, so gilt für den Resonator die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{y} = f - ky \quad , \quad (4.1)$$

mit einer zur Auslenkung proportionalen Rückstellkraft $f_r = ky$ und effektiver, zeitlich konstanter Federhärte k . Gleichung (4.1) lässt sich analytisch lösen. Für einen Resonator ohne Anfangsgeschwindigkeit, der aus seiner Gleichgewichtslage heraus ausgelenkt wird, erhält man dann:

$$y(t) = \frac{f}{k} \cdot \left[1 - \cos \left(\sqrt{\frac{k}{m}} t \right) \right] \quad (4.2)$$

In der Simulation ist zu beachten, dass die auszulenkende Brücke bereits thermisch, das heißt ohne externe Kraft, schwingt. Diese thermischen Schwingungen führen zu einer Abweichung vom theoretischen Verlauf in Gleichung (4.2). Um dies zu korrigieren wird zu jeder Temperatur eine zusätzliche Simulation ohne externe Kraft durchgeführt. Diese Simulation erfolgt mit den selben Anfangsbedingungen (das heißt mit dem selben Zwischenstand der thermalisierten Struktur) und über die selbe Zeitspanne. Solange die Auslenkungen klein genug sind, sodass keine Nichtlinearitäten auftreten, kann dann durch Subtraktion der thermischen Schwerpunktsbewegung die Auslenkung entsprechend korrigiert werden. In Abbildung (4.1) ist dies exemplarisch für den Auslenkungsprozess bei 700 K gezeigt.

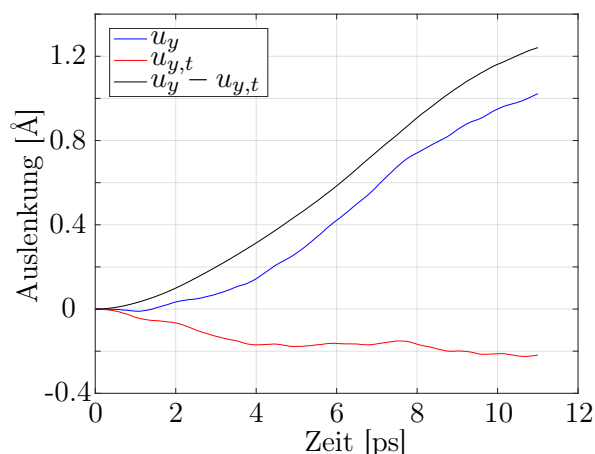


Abbildung 4.1: Veranschaulichung der thermischen Korrektur während des Auslenkungsprozesses exemplarisch für $T = 700$ K. Die blaue, mittlere der drei Kurven entspricht der Schwerpunktsauslenkung $u_y(t)$ der Brücke durch das Anlegen der externen Kraft. Die unterste, rote Kurve zeigt die thermisch bedingte Schwerpunktsbewegung $u_{y,t}(t)$ ohne äußeres Kraftfeld. Durch die angegebene Korrektur ergibt sich der theoretisch zu erwartende Verlauf (schwarze, oberste Kurve).

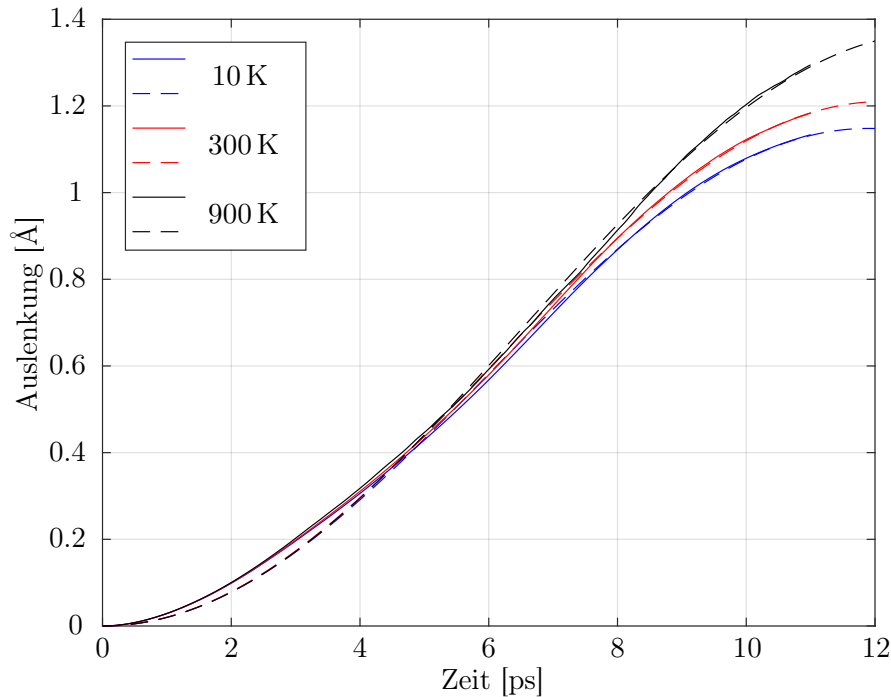


Abbildung 4.2: Theoretischer Fit an den Auslenkungsprozess nach Gleichung (4.2) exemplarisch für 10 K, 300 K und 900 K. In der selben Farbe und gestrichelt sind jeweils die Fits zur entsprechenden Temperatur dargestellt.

Um nun eine temperaturabhängige Federhärte zu bestimmen wird die Lösung aus Gleichung (4.2) an die Simulationsdaten des Auslenkungsprozesses angefitet. Die Kraft f wird dabei aus der Simulation entnommen. Als Fitparameter dienen k und m . Bei den Simulationen wurde stets die selbe Kraft verwendet, um die Ergebnisse untereinander vergleichen zu können. Es wird erwartet, dass sich bei größeren Temperaturen nach der selben Simulationszeit eine höhere Auslenkung einstellt, da bei größeren Temperaturen die Nanobrücke der externen Kraft weniger Widerstand entgegensetzt. In Abbildung (4.2) ist die zeitliche Entwicklung der Auslenkung für drei Temperaturen gezeigt. Zusätzlich wurde auch der entsprechende Fit nach Gleichung (4.2) dargestellt.

Um den Einfluss des Thermostaten während des Auslenkvorgangs zu überprüfen, wird dieser Vorgang sowohl mit als auch ohne Thermostat untersucht.

Die Summe der quadratischen Abweichung zwischen dem durchgeführten Fit und den Simulationsdaten liegt jeweils in der Größenordnung von 10^{-1} , weswegen die Annahme einer zeitlich konstanten und von der Auslenkung unabhängigen Federkonstanten gerechtfertigt werden kann. Somit verhält sich das betrachtete System, zumindest im hier vorgestellten Auslenkungsbereich, hinreichend linear. Weiter wird auch der Einfluss der Temperatur auf die Federkonstante untersucht. Abbildung (4.3) zeigt die nach Gleichung (4.2) ermittelten Federhärten k in Abhängigkeit von der Systemtemperatur T für die Simulationen mit (NVT) und ohne (NVE) Thermostat.

In Abbildung (4.3) lässt sich ein linearer Zusammenhang zwischen der effektiven Federhärte und

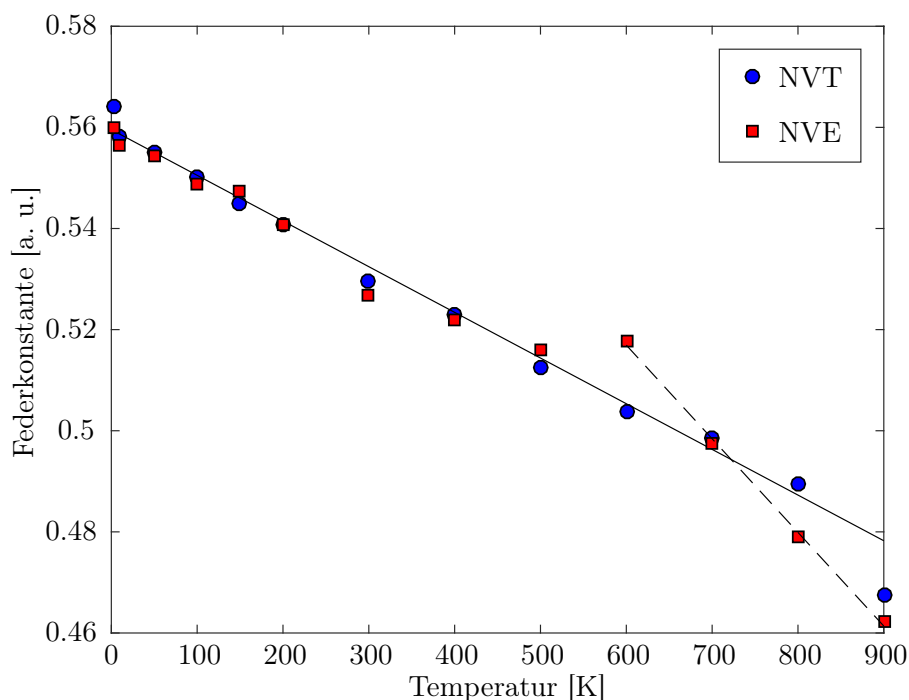


Abbildung 4.3: Aus den Fits entnommene Größen der Federkonstanten für den untersuchten Temperaturbereich bei Auslenkung mit Thermostat (blaue Kreise) sowie ohne Thermostat (rote Quadrate). Die durchgezogene schwarze Gerade entspricht einem linearen Fit für die Datenpunkte im NVT-Ensemble im Temperaturbereich von 4 K bis 800 K. Die gestrichelte schwarze Linie ist ein linearer Fit an die Punkte im NVE-Ensemble für 600 K bis 900 K. Der Fehler (95 % Konfidenzbereich) liegt bei allen Datenpunkten in der Größenordnung $4 \cdot 10^{-3}$.

der Temperatur beobachten. Zur Veranschaulichung wurde ein linearer Fit im Temperaturbereich von 4 K bis 800 K an die Datenpunkte für die Simulation mit Thermostat durchgeführt. Mit Ausnahme der Federstärken bei 600 K und 800 K lässt sich nur ein geringer Einfluss des Thermostaten auf die effektive Federhärte ausmachen. Für die Simulation ohne Thermostat lässt sich im Temperaturbereich von 600 K bis 900 K ein stärkerer Einfluss der Temperatur auf die Elastizität der Nanobrücke vermuten (erkennbar an der größeren Steigung der gestrichelten Geraden in Abbildung (4.3)). Eine mögliche Erklärung hierfür ist, dass bei Temperaturen >600 K die Kanten der Brücken bereits lokal aufzuschmelzen beginnen. Dies kann auch die höhere Federhärte bei 600 K ohne Thermostat erklären. Durch das einsetzende Aufschmelzen der Kanten fließt die durch die externe Kraft zugeführte Energie eher in weitere Umordnungsprozesse als in die Auslenkung der Brücke, wodurch sich eine geringere Auslenkung einstellt. Mit Thermostat lässt sich dieser Effekt im betrachteten Temperaturbereich nicht beobachten, da durch die zusätzliche Dämpfung des Thermostaten diese Aufschmelzprozesse erst bei höheren Temperaturen einsetzen.

In einem weiteren Simulationsschritt wird das Profil der Auslenkung für ein System bei einer Temperatur von 4 K untersucht. Hierfür wird die Nanobrücke ebenfalls mit konstanter Kraft aus ihrer Ruhelage heraus ausgelenkt. Zusätzlich wird ein Langevin-Thermostat verwendet. Dadurch wird erreicht, dass sich eine stabile Gleichgewichtsauslenkung einstellt, die auch nach Abschalten des

Thermostaten (bis auf kleine Fluktuationen um die Gleichgewichtslage) konstant bleibt. Nach dem Abschalten des Thermostaten werden die Koordinaten in x , y und z -Richtung für jedes einzelne Atom der ausgelenkten Brücke gespeichert. Weiter wird die Verschiebung dieser Koordinaten bezüglich der Ruhelage jedes Atoms berechnet und ebenfalls ausgegeben. In einem MATLAB-Script werden dann die Daten eingelesen und die Brücke in 40 $6 \times 6 \times 1$ große Boxen entlang der z -Achse unterteilt. Schematisch dargestellt ist diese Unterteilung in Abbildung (4.4).

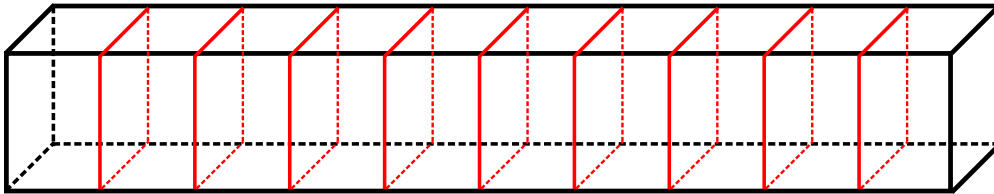


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung der Unterteilung der Nanobrücke in einzelne Boxen (rot). Hier exemplarisch für die Zerlegung in 10 Scheiben.

Die Atome werden dann anhand ihrer z -Koordinaten auf die einzelnen Boxen verteilt und ein gemeinsamer Box-Schwerpunkt der relativen Verschiebung in y -Richtung (gemittelt über die Anzahl der Teilchen in der jeweiligen Box) bestimmt. Die so bestimmten Schwerpunkte werden für jeden Zeitpunkt aufaddiert und anschließend zeitlich gemittelt. Abbildung (4.5) zeigt das so ermittelte Auslenkungsprofil der Nanobrücke. Zusätzlich dargestellt ist die analytische Lösung der ersten Hauptschwingungsmode nach Euler-Bernoulli (vergleiche Abschnitt (2.3.1)).

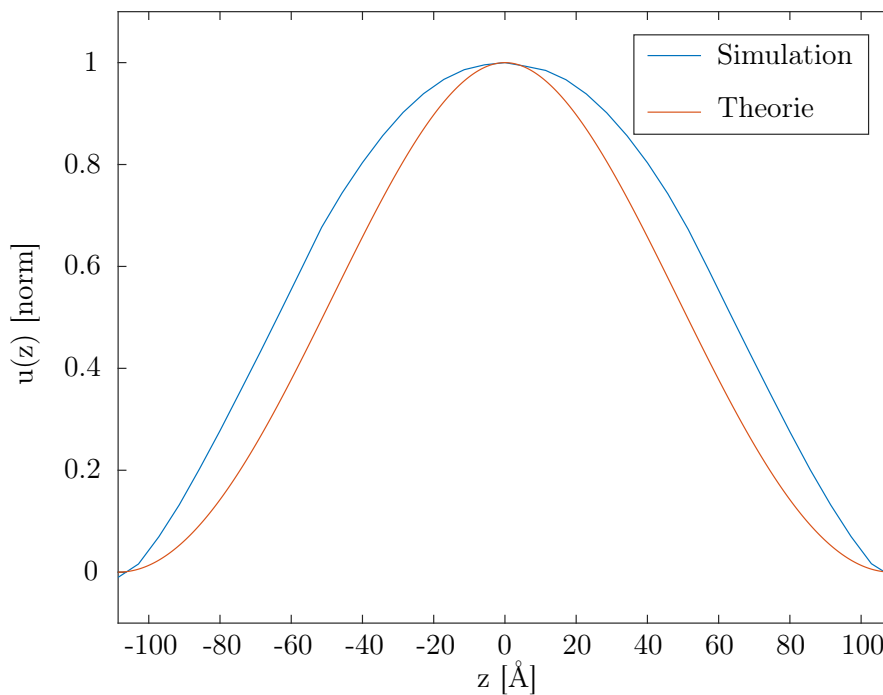


Abbildung 4.5: Darstellung der ersten Hauptschwingungsmode nach den Simulationsdaten bei einer Temperatur von 4 K (blau) und nach der Euler-Bernoulli-Balkentheorie (rot). Die beiden Kurven wurden jeweils auf ihr Maximum (Euler-Bernoulli: 1.133 Å, Simulation: 1.009 Å) normiert.

Beim Vergleich zwischen dem simulierten Profil der Auslenkung mit dem aus dem theoretischen Modell nach Euler-Bernoulli fällt auf, dass die Auslenkung entlang der langen Achse der Brücke wesentlich verbreitert ist. Die Erklärung hierfür lässt sich in der verwendeten Simulationmethode finden. Im betrachteten zeitlichen Intervall von 100 ps, in dem die Schwerpunkte der einzelnen Boxen bestimmt wurden, wirkt auf die Brücke weiterhin die zur Auslenkung verwendete externe Kraft in positive y -Richtung. Dadurch können in dieser Zeit zusätzliche Hauptmoden angeregt werden. Dabei handelt es sich genau um diejenigen, die in positiver y -Richtung mehr Bäuche aufweisen als in negativer y -Richtung. Dies entspricht den ungeraden Hauptmoden.

Um diesen Effekt zu überprüfen wird ein Fit der Form

$$u(z) = \frac{1}{a}u_1(z) + \frac{1}{b}u_3(z) + \frac{1}{c}u_5(z) \quad (4.3)$$

an das ermittelte Auslenkungsprofil durchgeführt. Die u_i bezeichnen dabei die i -te Hauptschwingungsmode nach dem Euler-Bernoulli-Modell. Dabei wird über die Fitparameter a , b und c berücksichtigt wie stark die einzelnen Moden angeregt sind. Es wird vermutet, dass höhere Moden nur eine vernachlässigbare Rolle spielen. Abbildung (4.6) zeigt den ermittelten Fit in sehr guter Übereinstimmung mit den Simulationsdaten.

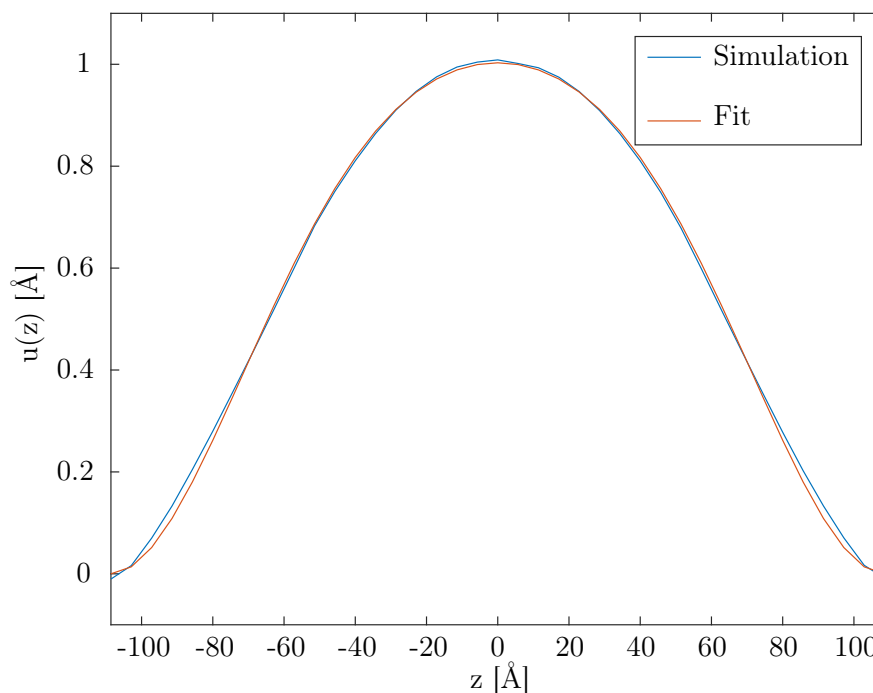


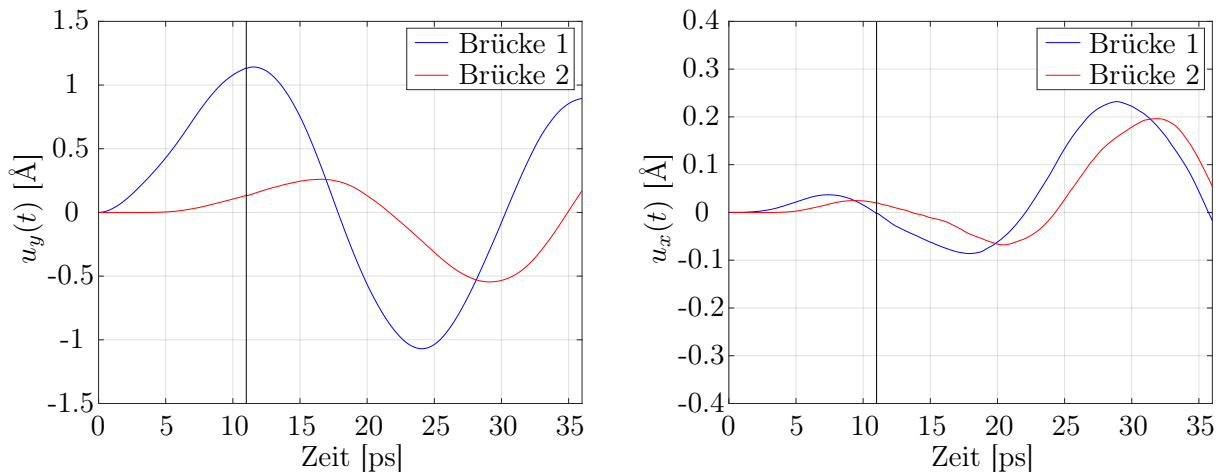
Abbildung 4.6: Darstellung des Fits (rot) nach Gleichung (4.3) an das Auslenkungsprofil der Simulation (blau).

Die berechneten Fitparameter betragen $a = 1.057$, $b = 14.55$ und $c = 2.375 \cdot 10^4$, womit bereits der Einfluss der fünften Harmonischen vernachlässigbar klein ist.

Um im Verlauf der weiteren Simulationen die Anregung höherer Harmonischer zu vermeiden beziehungsweise zu minimieren, wird die Brücke nicht bis zu ihrem Umkehrpunkt ausgelenkt und equilibriert, sondern bereits vorher losgelassen. Auf diese Weise soll möglichst nur die erste Hauptmode angeregt werden.

4.2 Freie Oszillation

Die im vorherigen Schritt ausgelenkte Brücke (ohne Thermostat) wird durch Abschalten der externen Kraft losgelassen wodurch sich eine freie Oszillation ergibt. Insbesondere von Interesse ist das Verhalten der bisher nichtbetrachteten, zweiten Brücke unmittelbar nach dem Loslassen des anderen Resonators. Nachfolgend wird die anfangs ausgelenkte Brücke stets als Brücke 1 und der freie Resonator als Brücke 2 bezeichnet. In Abbildung (4.7) ist das Auslenkungsverhalten während und unmittelbar nach dem Auslenkungsprozess sowohl in y - (Teilbild (a)) als auch x -Richtung (Teilbild (b)) für beide Brücken exemplarisch bei einer Temperatur von 10 K dargestellt. Während der Auslenkung wurden die Schwerpunktskoordinaten wie oben thermisch korrigiert, um den tatsächlichen Einfluss der Kraft zu analysieren.



(a) Schwerpunktsbewegung in y -Richtung.

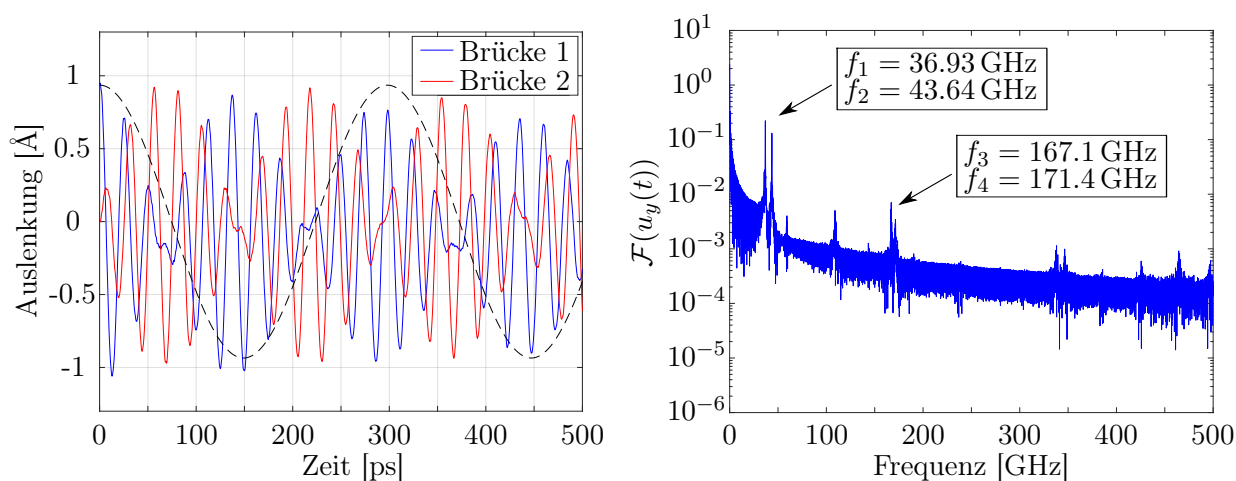
(b) Schwerpunktsbewegung in x -Richtung.

Abbildung 4.7: Einschwingvorgang nach dem Loslassen der ausgelenkten Brücke bei 10 K. In Teilbild (a) ist die Auslenkung in der Schwingungsrichtung y für beide Brücken dargestellt. Teilbild (b) zeigt die Auslenkung in x -Richtung in der selben Zeit. Der Bereich links von der senkrechten schwarzen Linie kennzeichnet den Auslenkungsprozess. Rechts davon ist dementsprechend der Bereich nach dem Loslassen von Brücke 1 dargestellt.

In der Schwingungsrichtung folgt die Auslenkung von Brücke 1 dem in Gleichung (4.2) hergeleiteten Zusammenhang. Nach dem Abschalten der Kraft bei $t = 11$ ps bewegt sich die Brücke aufgrund von Trägheit noch für kurze Zeit weiter in positive y -Richtung, ehe der Umkehrpunkt erreicht ist und der Resonator zu schwingen beginnt. Brücke 2 hingegen bleibt nahezu in Ruhe und beginnt sich erst nach circa 5 ps ebenfalls in positive y -Richtung auszulenken. Zu diesem Zeitpunkt bewegt sich Brücke 1 mit maximaler Geschwindigkeit nach oben und reißt Brücke 2 einfach mit, ehe sich dann

ab circa 15 ps ebenfalls eine Schwingung einstellt. In x -Richtung (entlang der langen Achse des aufliegenden Kopplungsdrahtes, vergleiche Abschnitt (3.2)), wird durch die anliegende Kraft auf Brücke 1 ebenfalls eine Oszillation angeregt. Auch hier lenkt sich die freie Brücke erst zeitlich versetzt zur ersten Brücke aus (ebenfalls ab circa 5 ps). Die Auslenkung in y -Richtung induziert somit eine Verdrehung des Systems in x -Richtung. Insgesamt bilden sich dadurch Rotationsmoden in der xy -Ebene aus.

Im Folgenden wird das Schwingungsverhalten des gekoppelten Systems über einen längeren Zeitraum untersucht und analysiert, inwiefern sich die in Abschnitt (2.2) vorgestellte klassische Beschreibung der Kopplung zur Charakterisierung des simulierten Systems eignet. Abbildung (4.8) zeigt das Oszillationsverhalten der beiden Brücken (Teilbild (a)) sowie die Fourier-Transformation der Schwingung⁶ (Teilbild (b)) für Brücke 1 bei 300 K.



(a) Schwingungsverhalten der beiden Brücken. (b) Fouriertransformierte der Schwerpunktsbewegung

Abbildung 4.8: Schwerpunktsbewegung für die beiden Brücken (a) und Fourier-Transformation der Schwingung von Brücke 1 (b) in logarithmischer Darstellung der freien Oszillation bei 300 K. In Teilbild (a) wurde zusätzlich die Einhüllende der Oszillation von Brücke 1 (schwarz gestrichelt) mit der Schwebungsfrequenz ω_S dargestellt.

Teilbild (a) von Abbildung (4.8) zeigt qualitativ den erwarteten Schwebungsverlauf. Zusätzlich wurde die langsame Einhüllende der Form $A \cdot \cos(\omega_S t)$ mit der Schwebungsfrequenz $\omega_S = 2\pi \frac{f_2 - f_1}{2}$ und der Amplitude A eingezeichnet. Die Frequenzen f_1 und f_2 können dem Inset von Teilbild (b) in Abbildung (4.8) entnommen werden. Die Fourier-Transformation der Schwingung von Brücke 1 zeigt den für die Schwebung charakteristischen Doppelpeak bei f_1 und f_2 . Die Anregung höherer Harmonischer in der Oszillation der beiden Brücken kann in Abbildung (4.8) nicht beobachtet werden. Der zweite sichtbare Doppelpeak bei den Frequenzen f_3 und f_4 kann keinem Vielfachen von f_1 beziehungsweise f_2 zugeordnet werden.

Die freie Oszillation wird im Weiteren zur Bestimmung der Resonanzfrequenzen der beiden Brücken

⁶ Da sich die Fouriertransformierte der Schwingung von Brücke 2 qualitativ nicht von der von Brücke 1 unterscheidet, wurde von einem zusätzlichen Plot abgesehen.

verwendet, um im nächsten Schritt bei der getriebenen Oszillation Brücke 1 mit ihrer Hauptschwingungsfrequenz anzuregen.

4.3 Untersuchung des Synchronisierungsverhaltens

4.3.1 Vorbereitende Schritte

Um das Synchronisierungsverhalten der beiden gekoppelten Nanoresonatoren zu untersuchen, wird eine der beiden Brücken an eine externe periodisch treibende Kraft gekoppelt. Im Vergleich zur vorher untersuchten freien Oszillation hat dies den Vorteil, dass über die Variation der Kraft, in Stärke und Frequenz, das Schwingungsverhalten des Systems direkt manipuliert werden kann. Um eine Resonanzkatastrophe zu verhindern, werden in den Aufhängepunkten, wie in Abschnitt (3.2) beschrieben, Thermostate verwendet. Bevor das Schwingungsverhalten der beiden Brücken auf Synchronisierung untersucht wird, muss zunächst die vorgestellte Methodik analysiert werden. Es wird überprüft, inwieweit die Thermostate die Temperatur des Systems konstant halten können und wie sich die Stärke der Dämpfung der Thermostate auf die Thermalisierung auswirkt.

Abbildung (4.9) zeigt die Temperatur des Systems über einen Zeitraum von 8 ns beim Treiben mit einer externen periodischen Kraft der Form $A \cdot \sin(\omega t)$ mit der Frequenz $\omega = 2\pi \cdot 36.93$ GHz und der Amplitude⁷ $A = 10^{-5}$ eV/Å. Die Thermostate in den Aufhängepunkten sind auf 300 K eingestellt.

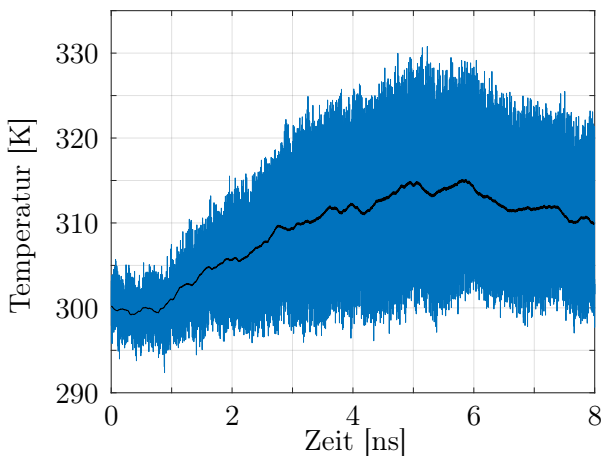


Abbildung 4.9: Gesamttemperatur des Systems bei der getriebenen Oszillation. Die mittlere Temperatur ist in schwarz graphisch dargestellt.

Durch die eingeführten Thermostate kann die in das System gepumpte Energie effizient abgeführt werden und die Temperatur hinreichend konstant gehalten werden. Die mittlere Temperatur um die das Gesamtsystem schwankt liegt bei 309 K. Dabei sei angemerkt, dass die Temperatur des Kopplungsdrahtes größere Fluktuationen in der Temperatur aufweist als die beiden Brücken. Dies liegt daran, dass die Wärme hier erst über die beiden Brücken abfließen muss, wohingegen bei den beiden Brücken eine direkte Ankopplung an die Thermostate besteht. Weiter wird der Einfluss der Dämpfung der Thermostate untersucht. Hierfür wird die selbe Simulation wie oben einmal mit größerer und kleinerer Dämpfung (jeweils um eine Zehnerpotenz) durchgeführt und miteinander

⁷Kraft pro Atom.

verglichen. Abbildung (4.10) zeigt die zeitliche Änderung der Temperatur für die unterschiedlichen Dämpfungskonstanten.

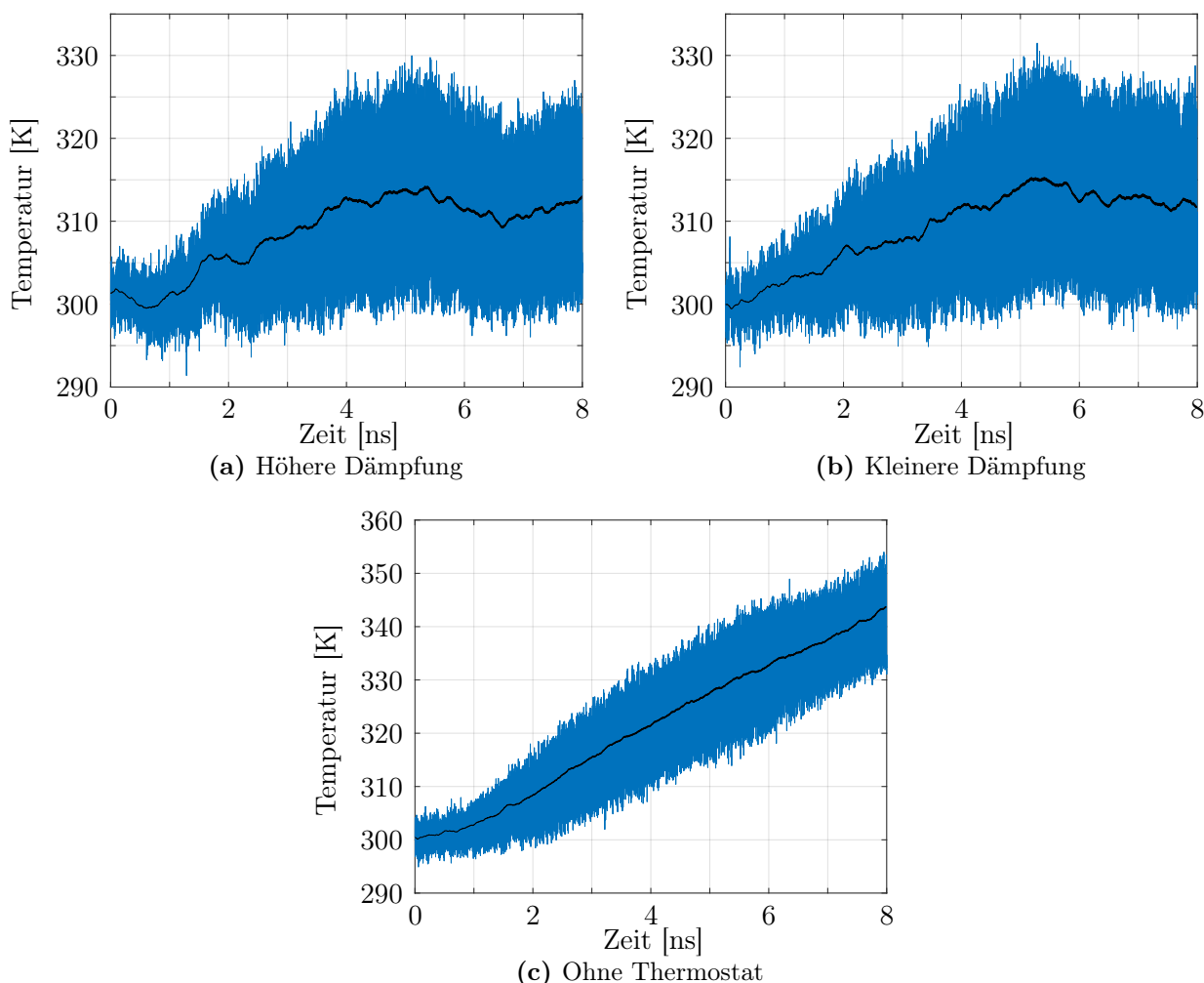


Abbildung 4.10: Einfluss der Dämpfung des Thermostaten auf die Gesamttemperatur. Die Stärke der Dämpfung wirkt sich nur schwach auf die Temperatur des Systems aus (Teilbild (a) und (b)). Ohne Thermostat steigt die Temperatur linear mit der Zeit. In schwarz ist jeweils das zeitliche Mittel der Temperatur dargestellt.

Abbildung (4.10) zeigt, dass der Einfluss der Dämpfung des Thermostaten nur einen marginalen Einfluss auf die Temperatur des Systems hat. Ohne Thermostat jedoch steigt die Temperatur über die komplette Zeit. Dieser Temperaturanstieg wirkt sich dann weiterhin auf die elastischen Eigenschaften der Resonatoren sowie deren Schwingungsfrequenzen aus.

4.3.2 Mathematische Beschreibung

Um das betrachtete System mathematisch zu beschreiben, wird ein Ansatz in Anlehnung an den in Abschnitt (2.4) hergeleiteten Formalismus verwendet. Dabei wird sowohl die Kopplung zwischen den beiden Resonatoren durch den aufliegenden Nanodraht als auch die treibende Kraft als kleine

Störung der autonomen Oszillationen betrachtet. Für die zeitliche Änderung der Phasenwinkel $\varphi^{(1)}$ und $\varphi^{(2)}$ gilt dann

$$\begin{aligned}\dot{\varphi}^{(1)} &= \omega_0^{(1)} + g \sin(\varphi^{(1)} - \varphi^{(2)}) + \varepsilon \sin(\varphi^{(1)} - n\omega t) \\ \dot{\varphi}^{(2)} &= \omega_0^{(2)} + g \sin(\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)})\end{aligned}\quad (4.4)$$

mit den autonomen Frequenzen $\omega_0^{(1)}$ und $\omega_0^{(2)}$, der Frequenz der treibenden Kraft ω , den Kopplungskonstanten g und ε , sowie dem Parameter $n = \omega_0^{(1)}/\omega$ um eine Abweichung zwischen ω und $\omega_0^{(1)}$ zu berücksichtigen. Dabei wurde vorausgesetzt, dass die beiden Resonatoren annähernd in Resonanz sind. Die Konstante ε ist dabei proportional zur Stärke der anliegenden, treibenden Kraft an Brücke 1. Somit kann durch Variation von Amplitude und Frequenz der Kraft die Phasenänderung von Brücke 1 direkt beeinflusst werden. Diese Änderung pflanzt sich dann durch die Kopplung g auch auf die Phase von Brücke 2 fort.

Abbildung (4.11) zeigt schematisch den Verlauf der Phasendifferenz $\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}$ nach Gleichung (4.4) für ein gewähltes Parameterset.

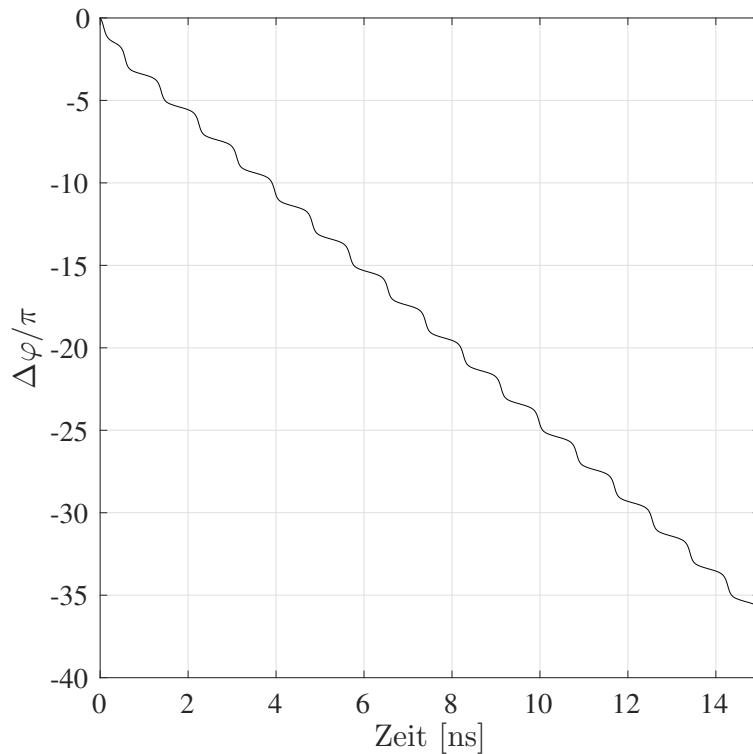


Abbildung 4.11: Lösung nach Gleichung (4.4) für ein gewähltes Parameterset mit $\omega_0^{(1)} = \omega = 2\pi \cdot 37.92$ GHz, $\omega_0^{(2)} = 2\pi \cdot 36.06$ GHz, $g = 8$ GHz und $\varepsilon = 9$ GHz.

Abbildung (4.11) zeigt ähnlich wie in Abschnitt (2.4) Sprünge in der Phasendifferenz. Die Sprünge haben jeweils eine Höhe von 2π und verlaufen in negative y -Richtung.

4.3.3 Ergebnisse

Zur Untersuchung der Synchronisierung zwischen den Oszillationen der beiden Resonatoren wird Brücke 2 um eine Einheitszelle verlängert⁸, sodass diese mit einer kleineren Frequenz $\omega_0^{(2)} < \omega_0^{(1)}$ als Brücke 1 schwingen will. Brücke 1 wird wie oben mit ihrer Resonanzfrequenz getrieben.

Es wird dann das Schwingungsverhalten der beiden Oszillatoren über einen Zeitraum von 15 ns analysiert und die zeitliche Änderung der Phasendifferenz bestimmt. Hierfür wird eine diskrete Hilbert-Transformation (siehe Kapitel (B)) der Schwerpunktsbewegungen durchgeführt und der Phasenwinkel zwischen Real- und Imaginärteil bestimmt. Mithilfe der Kurzzeit-Fourier-Transformation (siehe Kapitel (C)) kann zudem die zeitliche Änderung des Frequenzspektrums der jeweiligen Schwingungen dargestellt werden.

Abbildung (4.12) zeigt die Phasendifferenz $\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}$ der Oszillationen in Vielfachen von π exemplarisch für 4 K und 300 K.

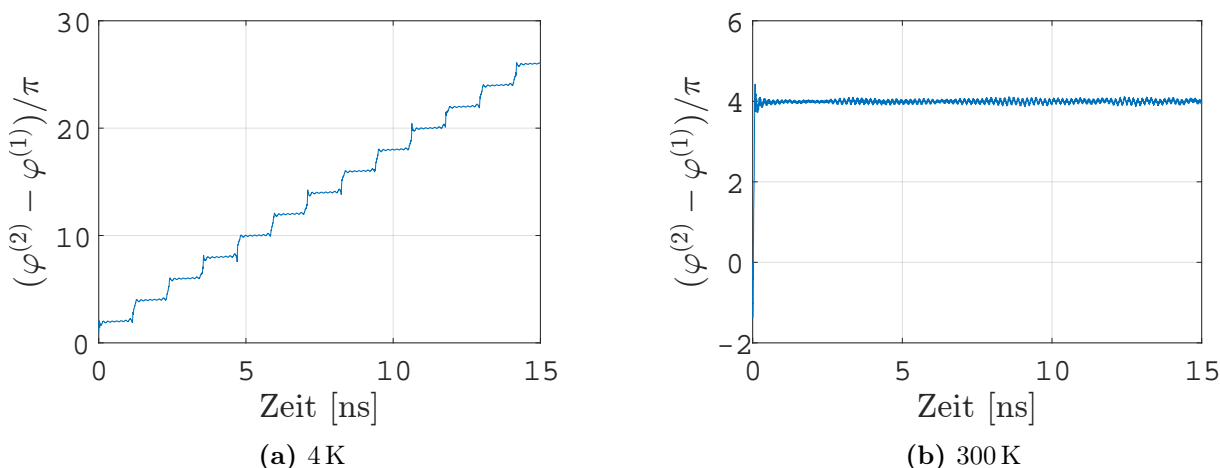


Abbildung 4.12: Phasendifferenz zwischen den gekoppelten Oszillationen in Vielfachen von π . Die Sprünge in Teilbild (a) haben jeweils eine Höhe von 2π .

Bei 300 K stellt sich nach einem kurzen Einschwingvorgang eine konstante Phasendifferenz von 4π ein. Die betrachtete Schwingung ist somit gleichphasig synchron. Für die Simulation bei 4 K hingegen zeigen sich äquidistante Stufen in der Phasendifferenz zwischen den beiden Brücken. Die Sprunghöhe beträgt jeweils 2π . Nach Abschnitt (2.4) ist demnach hier die Kopplung zwischen den beiden Brücken beziehungsweise die Amplitude der treibenden Kraft nicht ausreichend stark um bei gegebener Frequenzverstimmung eine Synchronisierung zwischen den beiden Oszillatoren zu erzielen.

Um genauer zu verstehen weshalb diese Sprünge in der Phasendifferenz auftreten, wird eine zeitliche Frequenzanalyse der Schwingungen durchgeführt. Abbildung (4.13) zeigt die Änderung der Frequen-

⁸Bei zwei gleich langen Resonatoren kann der Begriff der Synchronisierung der autonomen Schwingungen nicht sinnvoll definiert werden, da beide Brücken mit der selben Resonanzfrequenz schwingen. Vergleiche Abschnitt (2.4).

zen beider Brücken während des Schwingvorgangs. Zusätzlich dargestellt ist der Maximalwert der Intensität an jedem Zeitpunkt.

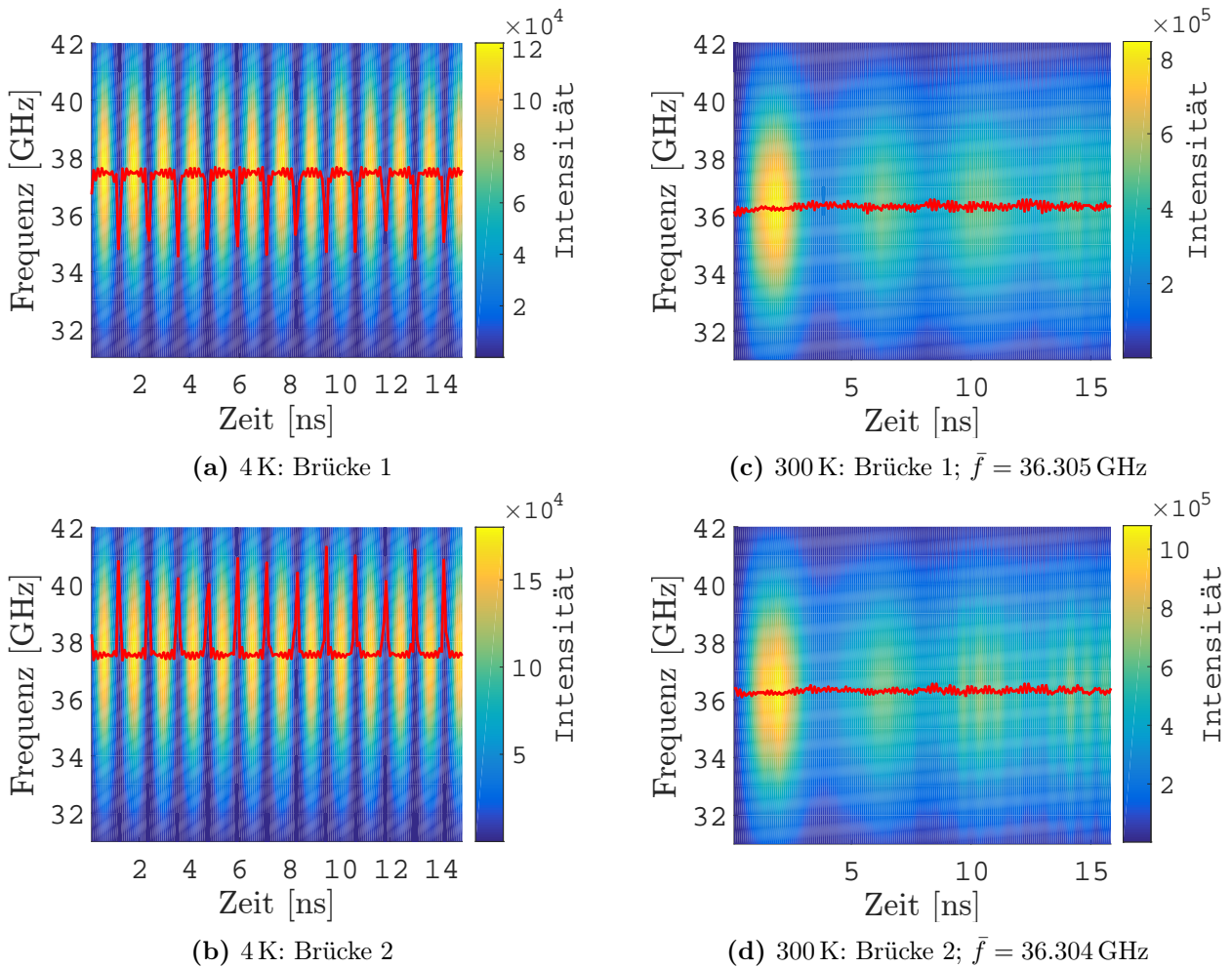


Abbildung 4.13: Kurzzeit-Fouriertransformation der Schwingungen der beiden Brücken für 4K und 300 K. Farbkodierung nach Intensität der Fouriertransformation. Die rote Linie entspricht dem Maximalwert der Intensität an jedem Zeitpunkt.

Durch die höhere Masse der freien (ungetriebenen) Brücke verhält sich diese träger als Brücke 1, weswegen sich in den Oszillationen hier eine höhere Amplitude einstellt. Aufgrund dessen ist die Intensität der Kurzzeit-Fouriertransformation in den Teilbildern (b) beziehungsweise (d) gegenüber denen in (a) respektive (c) erhöht.

Die beiden Brücken in der 300 K Simulation (rechte Spalte von Abbildung (4.13)) schwingen über den gesamten Zeitraum mit der selben Frequenz, erkennbar an der roten Linie in Abbildung (4.13). Dies bestätigt erneut das synchrone Verhalten der Oszillatoren. Bei 4K hingegen treten Bereiche auf, in denen die Frequenzen der beiden Brücken auseinander laufen (Dips und Peaks in der Linie der maximalen Intensität). Die Zeiten, zu denen diese Peaks auftreten koinzidieren mit den Sprüngen der Phasendifferenz in Abbildung (4.12). Interessant zu beobachten ist, dass in jenen Zeiten, zu denen die Frequenz der getriebene Brücke verlangsamt und anschließend wieder beschleunigt wird,

die andere Brücke zunächst schneller und dann wieder langsamer schwingt. Es lässt sich vermuten, dass diese verlangsamte Oszillation der getriebenen Brücke mit der externen Kraft zusammenhängt.

Abbildung (4.14) zeigt die Phasendifferenz $\Delta\varphi = \varphi^{(1)} - \varphi$ zwischen der getriebenen Brücke und der externen Kraft für 4 K und 300 K.

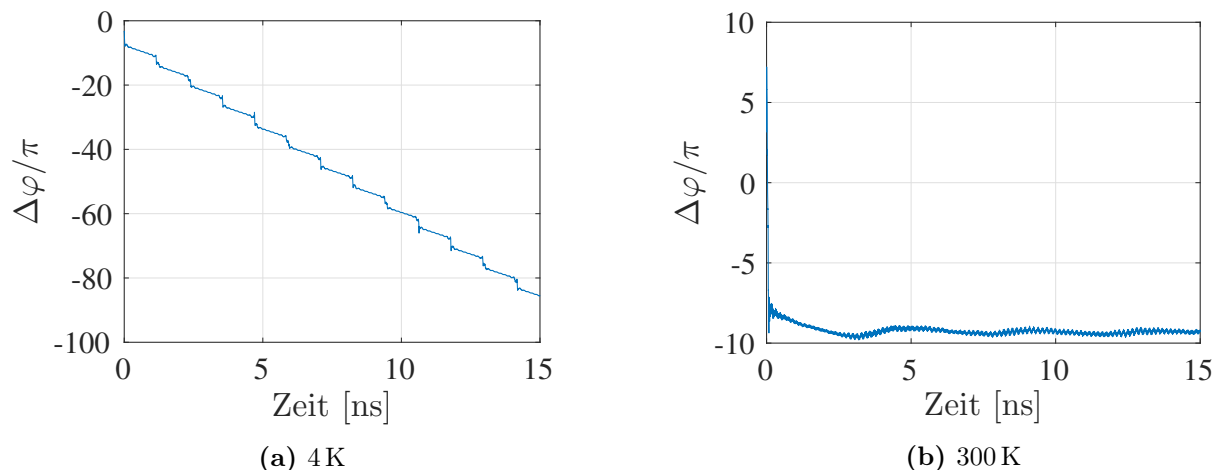


Abbildung 4.14: Phasendifferenz zwischen der getriebenen Brücke und der externen Kraft in Vielfachen von π .

Dabei lässt sich beobachten, dass bei 4 K die Phasen von Brücke und Kraft auseinanderlaufen, wohingegen die Phasendifferenz bei 300 K annähernd konstant ist. Dies lässt sich durch die größere Dämpfung mit steigender Temperatur erklären. Da die Dämpfung eines Oszillators direkt proportional zur Halbwertsbreite des Resonanzpeaks im Fourierraum ist, wirkt sich eine kleine Frequenzverstimmung zwischen ω und $\omega_0^{(1)}$ bei höheren Temperaturen weniger stark aus, als bei tiefen Temperaturen.

Stimmt die Frequenz der treibenden Kraft ω nicht exakt mit der autonomen Frequenz der freien Schwingung $\omega_0^{(1)}$ überein, ergibt sich eine einhüllende Oszillation mit der Differenzfrequenz $|\omega - \omega_0^{(1)}|$. Dies bedeutet, dass es Zeiten gibt zu denen die Amplitude der Schwingung von Brücke 1 nahe Null ist. Es kann dann dazu kommen, dass die Oszillation der getriebenen Brücke eine Schwingung (teilweise) auslöst (Dip) beziehungsweise eine kurze zusätzliche Oszillation ausführt (Peak), um der treibenden Kraft zu folgen. Ersterer Fall ist in Teilbild (b) von Abbildung (4.15) für die Oszillation bei 4 K zu sehen⁹. Teilbild (a) zeigt die langsame (verglichen zur Frequenz der autonomen Oszillation) Einhüllende, die der Schwingung der beiden Resonatoren überlagert ist.

Im Bereich des ersten Nulldurchgangs der Einhüllenden bei circa 1.15 ns lässt die getriebene Brücke (dargestellt in blau) eine halbe Oszillation aus und wird anschließend von der treibenden Kraft und der längeren, trägeren Brücke wieder mitgerissen. Die beiden Resonatoren die vorher gleichphasig synchron geschwungen haben schwingen im Anschluss gegenphasig. Durch das kurzzeitige Aussetzen der Oszillation der getriebenen Brücke wirkt der aufliegende Kopplungsdraht auf den anderen

⁹Das Ausführen einer zusätzlichen schnellen Oszillation wurde bei der Simulation mit 10 K beobachtet. Siehe Anhang (F) Abbildung (F.1).

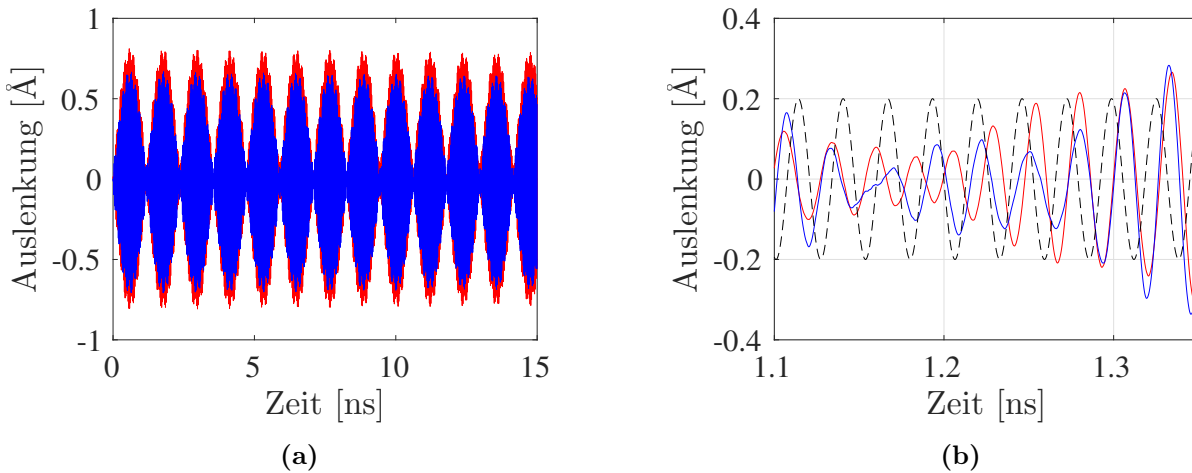


Abbildung 4.15: Schwerpunktsbewegung der beiden Brücken bei 4 K. In blau: Schwingung der getriebenen Brücke, rot: Oszillation der freien Brücke. Teilbild (a) zeigt den Schwingungsverlauf über 15 ns mit langsamer Einhüllender. In Teilbild (b) ist der Bereich um den ersten Nulldurchgang der Einhüllenden detailliert dargestellt. Zusätzlich ist die Schwingung der externen, treibenden Kraft geplottet (schwarz gestrichelt). Die Amplitude der Kraft wurde dabei auf 0.2 \AA gesetzt und entspricht nicht der Stärke der Kraft.

Resonator wie eine zusätzliche Feder¹⁰ (vergleiche Abschnitt (2.2)), wodurch dieser kurzzeitig mit höherer Frequenz zu schwingen beginnt (zu erkennen am Abstand der Maxima und Minima in Teilbild (b) von Abbildung (4.15)). Insgesamt ergibt sich so ein Sprung von 2π in der Phasendifferenz der beiden Brücken. Nach kurzer Zeit stellt sich erneut eine synchrone Schwingung zwischen den beiden Resonatoren ein. Interessant zu sehen ist, dass sich trotz der Frequenzverstimmung zwischen Brücke und Kraft eine über weite Teile synchrone Schwingung der beiden Brücken einstellt, die nur bei den Nulldurchgängen der Einhüllenden auseinanderläuft. Die Kopplung zwischen den beiden Brücken ist somit stärker als die Ankopplung der getriebenen Brücke an die externe Kraft. Die gleichphasige Oszillation der beiden Resonatoren ist somit eine bevorzugte Hauptmode des Systems, von der die Schwingung nur abweicht, wenn äußere Kräfte relevant werden. Energetisch bedeutet dies, dass sich die beiden Resonatoren analog zu zwei Teilchen in einer Potentiallandschaft bewegen, mit einer Vorzugsrichtung, entlang derer die Energie minimal ist. Um dies zu überprüfen wird die NEURAL NETWORK Toolbox von Matlab verwendet um aus einem gegebenen Trainingsdatenset die Oberfläche der potentiellen Energie des Systems zu interpolieren. In Abschnitt (D) ist das verwendete Verfahren ausführlich beschrieben. Abbildung (4.16) zeigt die bestimmte Energieoberfläche des gekoppelten Systems bei 300 K.

Deutlich zu erkennen sind zwei Rillen in der potentiellen Energie entlang der Diagonalen von Abbildung (4.16), welche der gleichphasigen (von links unten nach rechts oben) beziehungsweise der gegenphasigen (von rechts oben nach links unten) Schwingung des Systems entsprechen. Solange die beiden Brücken synchrone Schwingungen ausführen befinden sie sich energetisch in einer dieser Rillen.

¹⁰Vorrausgesetzt die Trägheit des Drahtes ist gegenüber der Federkraft zu vernachlässigen.

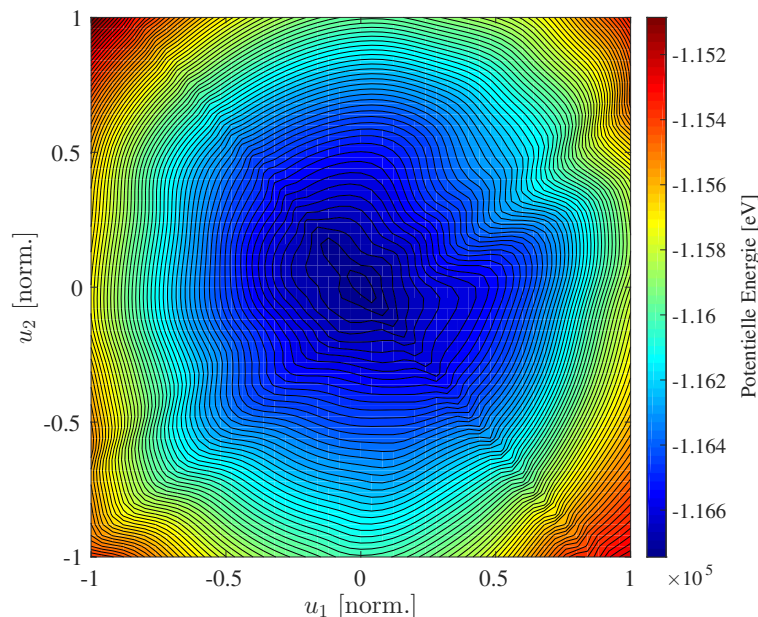


Abbildung 4.16: Energieoberfläche des gekoppelten Systems. Farbkodierung nach potentieller Energie. Die Auslenkungen sind dabei jeweils auf das Intervall $[-1; 1]$ normiert.

In einem weiteren Schritt wird durch Variation von Frequenz ω und Amplitude A der externen, treibenden Kraft untersucht, inwieweit das Synchronisierungsverhalten der beiden Resonatoren von außen beeinflusst werden kann. Dazu wird bei 300 K die getriebene Brücke mit Frequenzen ungleich ihrer Eigenfrequenz $\omega_0^{(1)}$ angeregt und für verschiedene Amplituden der Kraft die Phasendifferenz zwischen den beiden Resonatoren bestimmt. Die Frequenz ω wird dabei im Intervall zwischen $\omega = 0.5\omega_0^{(1)}$ und $\omega = 2.0\omega_0^{(1)}$ variiert. Da bei einer großen Frequenzverstimmung auch eine entsprechend große Kraft benötigt wird um das System zu synchronisieren (vergleiche Abschnitt (2.4)), treten teils chaotische Schwingungen auf. Um zu entscheiden ob eine Schwingung synchron ist, wird deshalb die erhaltene Phasendifferenz in Intervalle der Länge 520 ps unterteilt. Anschließend wird die quadratische Abweichung (SE) von der mittleren Phasendifferenz $\Delta\bar{\varphi}$ für jedes Teilintervall bestimmt. Es kann dann ein Ordnungsparameter q definiert werden, mit

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{SE}^{(i)}(\Delta\bar{\varphi}) \quad , \quad (4.5)$$

wobei N die Anzahl der Teilintervalle bezeichnet. q ist somit ein Maß dafür wie lange die beiden Resonatoren in der betrachteten Simulation synchron waren. In Abbildung (4.17) sind die berechneten Ordnungsparameter für die unterschiedlichen Frequenzverstimmungen graphisch dargestellt. Auf eine zusätzliche Darstellung der dabei verwendeten Kraft wurde hierbei verzichtet.

Abbildung (4.17) zeigt, dass es einige Simulationen gab mit $q < 10$ (rote Quadrate) und wiederum einige mit $q > 100$ (blaue Kreise), aber keine Werte dazwischen angenommen wurden. Für die weitere Untersuchung werden deshalb Schwingungen, bei denen $q < 10$ ist als synchron, und

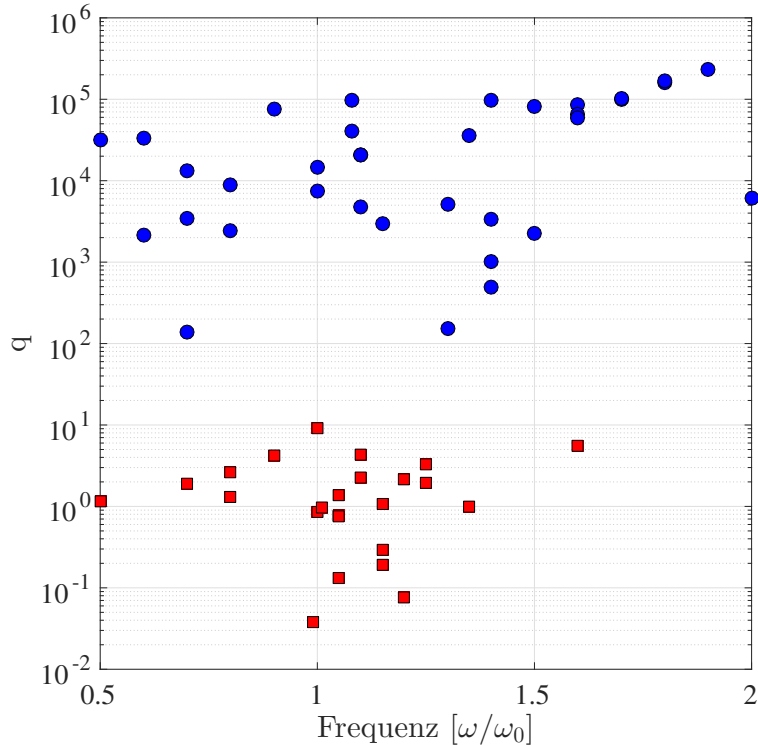


Abbildung 4.17: Ordnungsparameter der Synchronisierung für die unterschiedlichen Frequenzverstimmlungen zwischen treibender Kraft und Resonator in logarithmischer Darstellung.

diejenigen bei denen $q > 10$ ist als nicht synchron gewertet¹¹. In Abschnitt (F) sind exemplarisch einige Verläufe der Phasendifferenz graphisch dargestellt.

In Abbildung (4.18) sind in einem Kraft-Frequenz-Plot die Bereiche für die eine synchrone Schwingung der beiden Brücken beobachtet werden konnte dargestellt. Dabei wurde zunächst eine Referenzamplitude A_0 der treibenden Kraft bestimmt, indem, beim Treiben mit $\omega = \omega_0^{(1)}$, die Kraft solange verringert wurde, bis keine konstante Phasenbeziehung zwischen den beiden Brücken mehr beobachtet werden konnte.

Man erkennt in Abbildung (4.18) zwei klar abgegrenzte Bereiche um $\omega = \omega_0^{(1)}$ beziehungsweise $\omega = 1.2\omega_0^{(1)}$. Diese beiden Frequenzen entsprechen gerade den beiden Hauptschwingungsfrequenzen des Systems, die der gleichphasigen beziehungsweise gegenphasigen Oszillation der beiden Resonatoren entsprechen. Eine Synchronisierung bei höheren Harmonischen, wie in Abschnitt (2.4.3) beschrieben, kann hier nicht beobachtet werden.

Abschließend wird Gleichung (4.4) anhand der simulierten Phasendifferenzen verifiziert. Hierfür werden die Parameter in Gleichung (4.4) mithilfe eines genetischen Algorithmus optimiert um einen Fit der Lösung an die Simulationsdaten zu erhalten. Der genetische Algorithmus hat gegenüber anderen Optimierungsverfahren den Vorteil, dass keine genauen Kenntnisse der Startwerte der Parameter nötig sind. Eine detaillierte Beschreibung der Funktionsweise des genetischen Algorithmus findet

¹¹Als Referenzwert für eine nicht synchrone Schwingung wird die durchgeführte Simulation bei 4K herangezogen. Mit dem gewählten Zeitfenster ergibt sich hier ein Ordnungsparameter von $q = 492$.

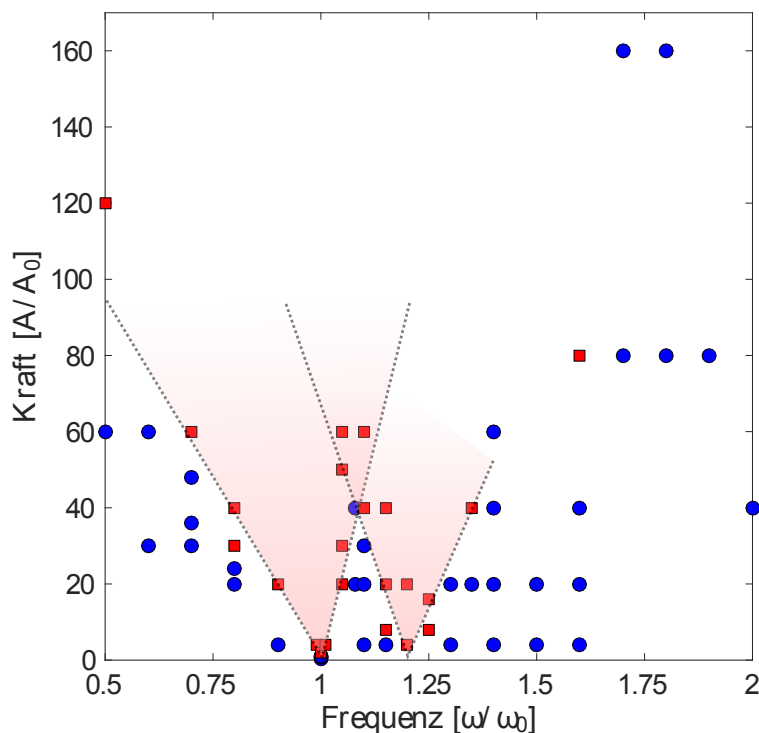


Abbildung 4.18: Synchronisierungsregimes des gekoppelten Systems bei Variation von Frequenz und Stärke der Kraft relativ zur getriebenen Brücke. Blaue Kreise kennzeichnen nicht-synchrone Schwingungen. Rote Quadrate kennzeichnen synchrone Schwingungen. Dabei ist $\omega_0^{(1)} = 2\pi \cdot 36.32$ GHz und $A_0 = 0.25 \cdot 10^{-5}$ eV/Å (Kraft pro Atom). Die gestrichelten Geraden dienen als “guide to the eye”.

sich in Abschnitt (E). Die verwendeten Optimierungsparameter sind die autonomen Frequenzen $\omega_0^{(1)}$ und $\omega_0^{(2)}$, die Kopplungsstärke g zwischen den beiden Brücken, die Kopplungsstärke ε an die treibende Kraft, sowie die Anfangswerte $\varphi^{(1)}(t=0)$ und $\varphi^{(2)}(t=0)$. Außerdem wurde noch eine zusätzliche additive Konstante c an die Lösung der Phasendifferenz nach Gleichung (4.4) eingeführt¹².

Wie in Abschnitt (4.3.2) gezeigt, verläuft die berechnete Phasendifferenz nach Gleichung (4.4) in negative Richtung für $\omega_0^{(1)} > \omega_0^{(2)}$ und damit entgegen dem Verlauf der bisher betrachteten Simulationsergebnisse. Eine mögliche Erklärung ist die Nichtberücksichtigung der Trägheit der beiden Brücken in Gleichung (4.4). Durch die höhere Masse von Brücke 2, schwingt diese mit einer größeren Amplitude. Ist Brücke 1 an ihrem Umkehrpunkt angekommen, wird sie in ihrer Schwingung von der trägeren, zweiten Brücke leicht gedämpft. Dadurch ergeben sich in den Simulationen (mit der gewählten Definition von $\Delta\varphi = \varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}$) meist Phasensprünge in positive Richtung.

Zum Fitten der Lösung der Phasendifferentialgleichung (4.4) wird deshalb künstlich ein Vorzeichenwechsel eingebaut um Sprünge in die erwartete Richtung zu generieren. Abbildung (4.19) zeigt die bestimmten Fits an die Simulationsdaten exemplarisch für 4 K und 300 K.

¹² c hat keinen Einfluss auf die Gültigkeit von Gleichung (4.4). Es zeigte sich jedoch in anfänglichen Optimierungsversuchen, dass dadurch eine bessere Optimierung erreicht werden kann.

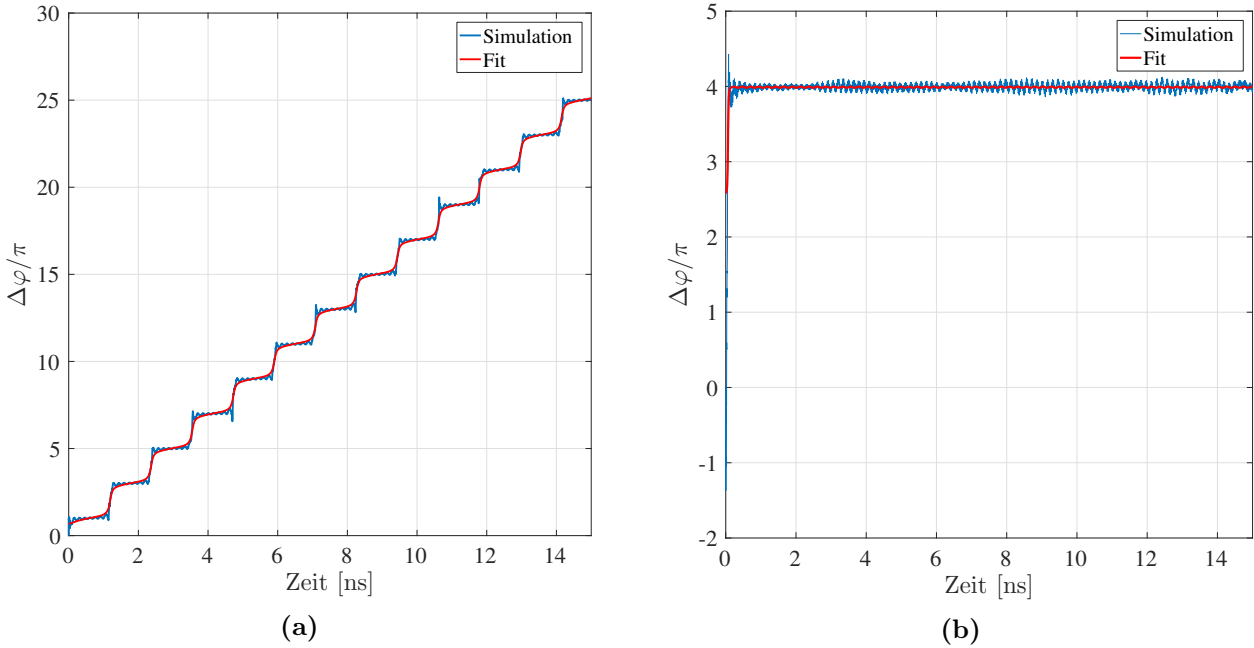


Abbildung 4.19: Fit der Gleichungen (4.4) an die Simulationsdaten der Phasendifferenz bei 4 K (a) und 300 K (b).

Mit den beschriebenen Anpassungen liefert das vorgestellte Optimierungsverfahren eine sehr gute Übereinstimmung mit dem simulierten Verlauf der Phasendifferenz zwischen den beiden Resonatoren. Es wird nun anhand der Fits bei verschiedenen Temperaturen untersucht, wie sich die Kopplungsstärke g zwischen den beiden Brücken, beziehungsweise die Kopplungsstärke ε der getriebenen Brücke an die externe Kraft, mit der Temperatur ändern. Insgesamt wird ein temperaturunabhängiges g erwartet. Bei tiefen Temperaturen jedoch kann das betrachtete System wie eine ideale Hantel angesehen werden. Deshalb wird hier eine leicht höhere Kopplungsstärke vermutet. Für die Ankopplung zwischen Kraft und getriebener Brücke gelten die selben Überlegungen. Abbildung (4.20) zeigt die Kopplungsstärken g (Teilbild (a)) und ε (Teilbild (b)) im untersuchten Temperaturbereich zwischen 4 K und 600 K.

Die aus den durchgeführten Fits bestimmten Kopplungsstärken zeigen eine starke Schwankung mit der Temperatur. Um aussagekräftige Ergebnisse zu produzieren müsste in weiteren Schritten die Abhängigkeit der einzelnen Simulationen von den Anfangswerten (die Erzeugung der anfänglichen Geschwindigkeiten des Systems, siehe Abschnitt (3.2)) bestimmt werden um statistisch relevante Ergebnisse zu erhalten.

5 Ausblick

Mit der in Abschnitt (4.3.3) vorgestellten Berechnung der effektiven Energieoberfläche, die die Schwingung der beiden Brücken beschreibt, lässt sich ein Verfahren für ein “coarse-grained”-Modell des betrachteten Systems entwickeln. Dabei werden die Schwerpunkte der beiden Resonatoren als

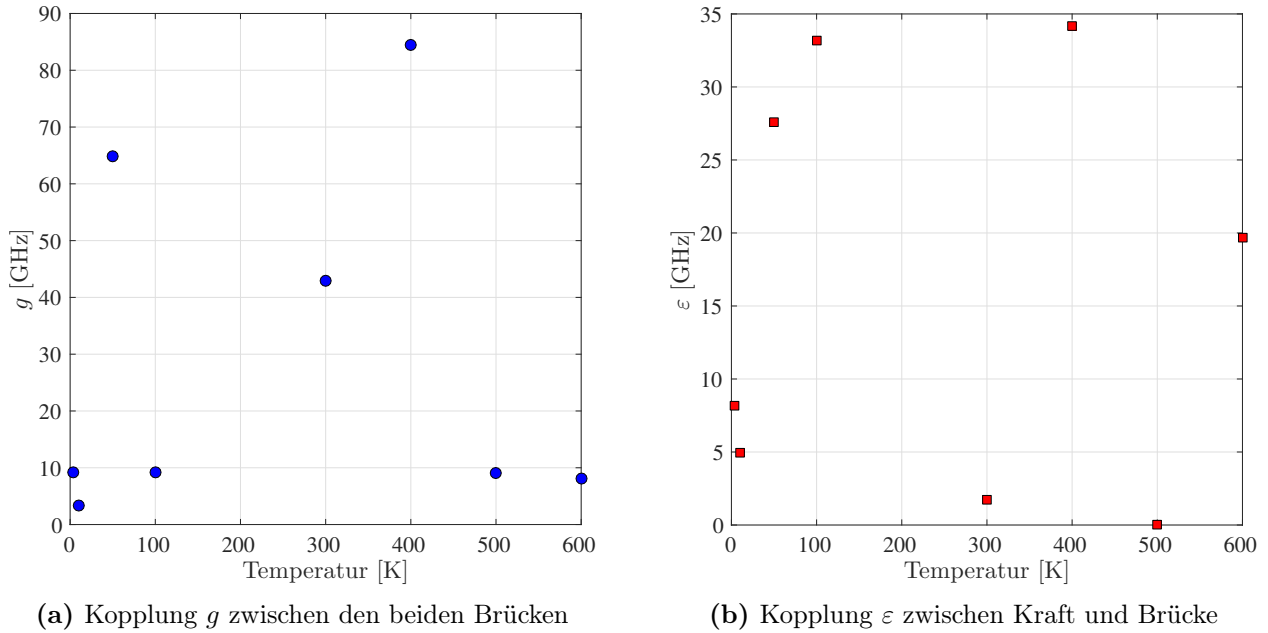


Abbildung 4.20: Temperaturabhängigkeit der Kopplungsstärken g (a) und ε (b).

einzelne Massenpunkte angenommen, die sich innerhalb einer Potentiallandschaft bewegen. Die Information über die Kopplung zwischen den beiden Teilchen steckt dabei vollkommen in der potentiellen Energie. Es lässt sich dann eine gekoppelte Bewegungsgleichung der Teilchen aufstellen:

$$\begin{aligned} m^{(1)}\ddot{y}^{(1)} &= -\frac{\partial}{\partial y^{(1)}}U + A \cdot \sin(\omega t) - \gamma\dot{y}^{(1)} \\ m^{(2)}\ddot{y}^{(2)} &= -\frac{\partial}{\partial y^{(2)}}U - \gamma\dot{y}^{(2)} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Dabei bezeichnet γ eine Dämpfungskonstante. Die Gleichungen (5.1) beinhalten ebenfalls eine externe, treibende Kraft über die das Schwingungsverhalten der beiden Teilchen gesteuert werden kann. Da die bisherigen Simulationen gezeigt haben, dass auch eine relevante Schwingung in x -Richtung auftritt, wird zusätzlich auch eine analoge Differentialgleichung für die x -Koordinaten der Oszillation betrachtet:

$$\begin{aligned} m^{(1)}\ddot{x}^{(1)} &= -\frac{\partial}{\partial x^{(1)}}U - \gamma\dot{x}^{(1)} \\ m^{(2)}\ddot{x}^{(2)} &= -\frac{\partial}{\partial x^{(2)}}U - \gamma\dot{x}^{(2)} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Die Massen der Teilchen werden berechnet, indem die Massen der einzelnen Atome der Brücken addiert werden und dann mit dem Quadrat des Maximums des Auslenkungsprofils u_m^2 der ersten Hauptschwingungsmode nach Euler-Bernoulli (vergleiche Abschnitt (2.3.1)) gewichtet werden. Auf

diese Weise soll eine, bezüglich des Biegeverhaltens, effektive Masse definiert werden, bei der die Massen der Randatome weniger stark gewertet werden, als die Massen in der Balkenmitte. Die Amplitude der Kraft wird ebenfalls mit u_m^2 gewichtet. Es wird dann zu jedem Zeitpunkt t und der aktuellen Auslenkungskonfiguration $\{y^{(1)}, y^{(2)}, x^{(1)}, x^{(2)}\}$ die zugehörige potentielle Energie aus dem neuronalen Netz bestimmt und der Gradient berechnet, siehe Abschnitt (D). Als Dämpfung wird ein fester Wert von $\gamma = 10^{-9}$ 1/ns angenommen.

Abbildung (5.1) zeigt den Schwingungsverlauf sowie das FOURIERSpektrum der erhaltenen Schwingung in y -Richtung bei externer Anregung mit einer Kraft der Frequenz $\omega = 2\pi \cdot 36.32$ GHz. Zum Lösen der Gleichungen (5.1) wird ein Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung verwendet [Mat16c] [Dor80].

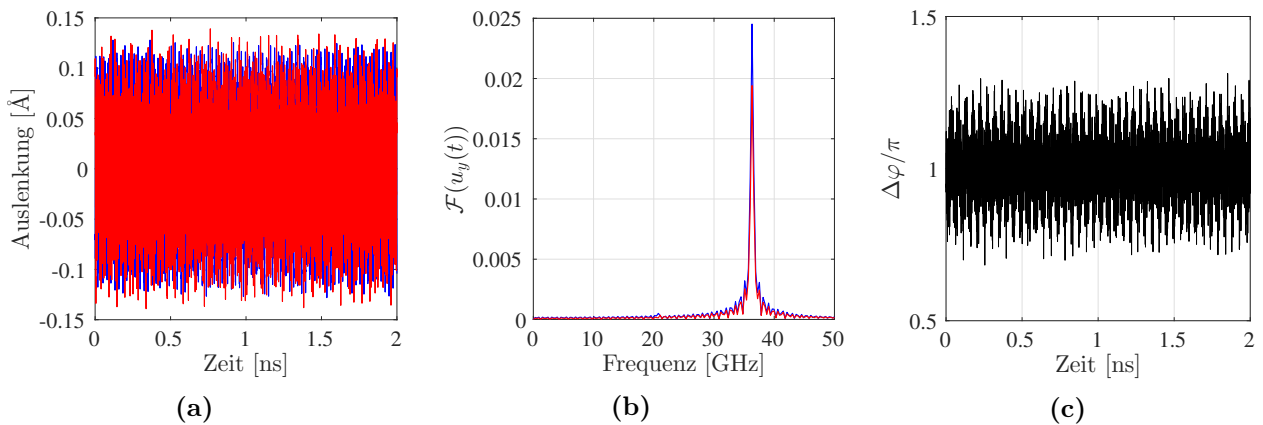


Abbildung 5.1: Schwingungsverlauf (a), Frequenzspektrum (b) und berechnete Phasendifferenz (c) im coarse-grained-Modell. In blau dargestellt ist das extern getriebene Teilchen. Die roten Kurven entsprechen dem freien Teilchen.

Teilbild (b) von Abbildung (5.1) zeigt, dass beide Teilchen in ihrer Schwingung der externen Kraft folgen. Dies ist insbesondere deswegen hervorzuheben, da Teilchen 2 nach Gleichung (5.1) keine direkte Ankopplung an die Kraft besitzt und somit nur durch das gebildete effektive Potential und die Kopplung an Teilchen 1 zu schwingen beginnt. Die Amplituden in Teilbild (a) hingegen liegen um eine Größenordnung unter den erwartenden Amplituden der entsprechenden Simulation. Die berechnete Phasendifferenz der beiden Teilchen in Teilbild (c) schwankt um $\Delta\varphi = \pi$.

Für größere Amplituden der treibenden Kraft, stellt man jedoch fest, dass die berechnete Schwingung mit der als konstant angenommenen Dämpfung nicht stabil bleibt, vergleiche Abbildung (5.2).

Die Oszillationen der beiden Teilchen schaukeln sich immer weiter auf, bis sie sich letztlich aus dem Potentialtopf (vergleiche Abbildung (4.16)) bewegen. Die Bewegung der beiden Teilchen für $t > 500$ ps verläuft dann annähernd linear.

In weiterführenden Schritten müsste daher eine geeignete, kraftabhängige Dämpfung γ definiert werden. Denkbar wäre eine Art Thermostatdämpfung, bei der in jedem Zeitschritt die Gesamtenergie des Systems mit der thermischen Energie $Nk_B T$ (mit der Anzahl der betrachteten Teilchen $N = 2$) verglichen wird und die Geschwindigkeiten entsprechend reskaliert werden.

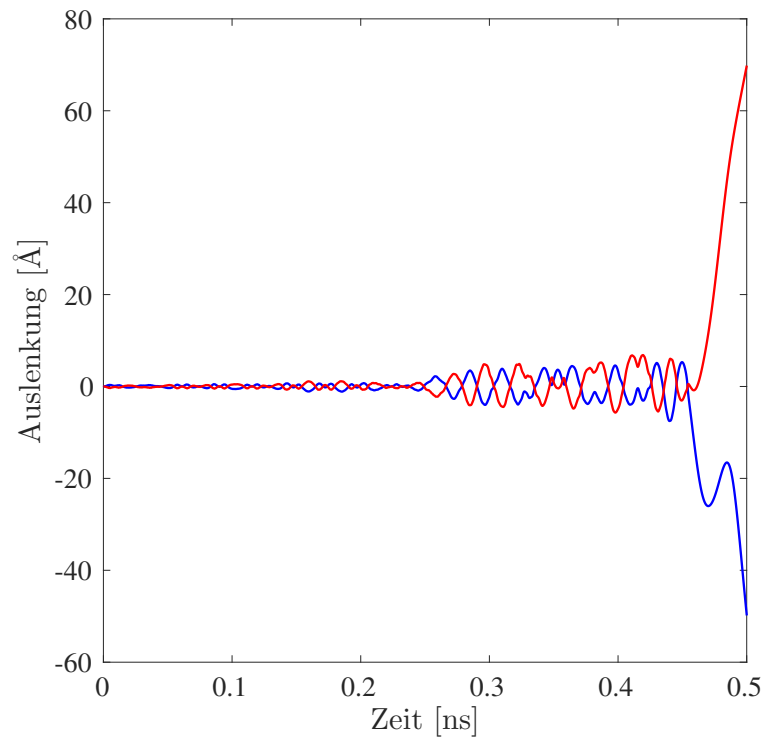


Abbildung 5.2: Schwingungsverlauf der beiden Teilchen bei achtfacher Kraft im Vergleich zu Abbildung (5.1). Blau: Teilchen 1, rot: Teilchen 2. Die Schwingung bleibt nicht stabil und explodiert ab circa 450 ps.

6 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung des Synchronisierungsverhaltens der mechanischen Schwingungen atomar gekoppelter Nanoresonatoren. Hierfür wurden Molekulardynamik-Simulationen mit dem Open-Source-Programm LAMMPS durchgeführt. In vorbereitenden Schritten wurde ein NVE-NVT-kombiniertes Verfahren zur Simulation der Oberflächenrekonstruktion von Silizium eingeführt und analysiert. Es konnte gezeigt werden, dass durch die verwendete Simulationsmethodik eine wesentlich schnellere und genauere Rekonstruktion erzielt werden konnte, als es in klassischen NVT-Simulationen erreicht werden kann.

Es wurde weiterhin die Linearität des Systems im betrachteten Auslenkungsbereich von 2 % bis 5 % der Resonatorstärke verifiziert. Zudem wurde gezeigt, dass der Einfluss des Thermostaten auf die Elastizität der Brücke klein ist. Bei höheren Temperaturen zeigte sich ohne Thermostat ein verändertes Elastizitätsverhalten, was auf einsetzende Aufschmelzprozesse zurückgeführt werden konnte. Bei der Analyse des Auslenkungsprofils entlang der langen Achse der Nanobrücke wurde gezeigt, dass durch das Auslenken bis zum Umkehrpunkt höhere, ungerade Hauptmoden angeregt werden. Die Untersuchung der freien Oszillation des Systems zeigte das klassisch erwartete Schwebungsverhalten der beiden Resonatoren. Weiter konnte eine zusätzliche Anregung von Moden in der Auslenkungsrichtung der orthogonalen Achse beobachtet werden. Eine mögliche Erklärung hierfür ist die Diamantstruktur von Silizium. Zur genaueren Untersuchung könnten analoge Simulationen mit anderen Materialien durchgeführt werden.

Den Hauptteil der Arbeit machte die Untersuchung des Synchronisierungsverhaltens im betrachteten gekoppelten und extern getriebenen System aus. Zur Untersuchung wurde eine der beiden Brücken verlängert, um eine Frequenzdifferenz in den autonomen Oszillationen zu erhalten. Es wurde untersucht, ob sich die Phasen und Frequenzen der beiden Brücken während des Schwingvorgangs angleichen. Es zeigte sich bei tiefen Temperaturen (< 50 K) ein stufenförmiges Auseinanderlaufen der Phasendifferenz, was mit einer Frequenzverstimmung zwischen der Frequenz der treibenden Kraft und der autonomen Eigenfrequenz der getriebenen Brücke erklärt werden konnte. Durch diese Verstimmung zeigte sich eine langsame Einhüllende in der Schwerpunktsschwingung, an deren Nulldurchgängen die getriebene Brücke kurzzeitig eine Oszillation (teilweise) auslies oder eine zusätzliche Schwingung ausführte. Bei höheren Temperaturen zeigte sich beim Treiben auf der Resonanzfrequenz eine konstante Phasenbeziehung bei konstant gleicher Frequenz der beiden Resonatoren. Mit einem neuronalen Netz konnte eine effektive Energieoberfläche bestimmt werden, die die gemeinsame Bewegung der beiden Resonatorschwerpunkte beschreibt. Dabei zeigte sich, dass das betrachtete System zwei Vorzugsrichtungen aufweist, entlang derer die potentielle Gesamtenergie lokale Minima aufweist, welche der gleichphasig synchronen beziehungsweise der gegenphasig synchronen Schwingung entsprechen. Weiter wurde die externe Steuerung des Synchronisierungsverhaltens durch die treibende Kraft untersucht. Es zeigte sich, dass bei Anregung mit der Frequenz der gleich- respektive gegenphasigen Oszillation bereits bei kleiner Kraft eine synchrone Schwingung beobachtet werden kann. Bei Anregung mit davon abweichenden Frequenzen wurde eine entsprechend größere Kraft

benötigt um die Oszillationen zu synchronisieren. Weitere Synchronisierungsregimes bei Anregung mit ganzzahligen Vielfachen der autonomen Resonanzfrequenz konnten nicht bestätigt werden.

Zur mathematischen Beschreibung der Synchronisierung wurde eine Differenzialgleichung in den Phasen der beiden Resonatoren eingeführt. Unter Verwendung eines genetischen Algorithmus wurden die Parameter dieser Differenzialgleichungen optimiert um einen Fit an die Simulationsdaten zu erhalten. Es konnte gezeigt werden, dass die hergeleiteten Gleichungen die beobachteten Ergebnisse sehr gut bestätigen konnten. Weiter wurde aus den entsprechenden Fits die Kopplungsstärke zwischen den beiden Resonatoren ausgewertet und deren Verlauf über die Temperatur analysiert. Die erhaltenen Ergebnisse zeigten allerdings keine statistische Relevanz. Zur genaueren Untersuchung können Ensembles von Simulationen aufgesetzt werden, bei denen die Geschwindigkeitsverteilung der Atome variiert wird. Dadurch könnte ein statistisches Mittel der Kopplungsstärke bestimmt werden.

Abschließend wurde ein “coarse-grained”-Modell zur vereinfachten Darstellung des gekoppelten Systems vorgestellt. Dabei wurden die beiden Resonatoren als Massepunkte in einem effektiven Wechselwirkungspotential beschrieben und eine gekoppelte Bewegungsgleichung aufgestellt. Das Potential wurde dabei über ein neuronales Netz berechnet. Es zeigte sich, dass sich durch das Anschalten einer externen Kraft in einer der Bewegungsgleichungen eine Schwingung beider Massepunkte mit der treibenden Frequenz einstellt. Zur weiteren Untersuchung muss jedoch noch eine Möglichkeit der Temperaturregelung beziehungsweise eine effektive Dämpfung eingeführt werden um das System zu stabilisieren.

A Mathematische Typografie

Tabelle A.1: Verwendete mathematische Typografie und Erklärung

Symbol	Bezeichnung	Definition
x	Skalar	
\mathbf{x}	Vektor	
\mathbf{x}_i	i -te Komponente des Vektors \mathbf{x}	
$f(x)$	Funktion f in Abhängigkeit von x	
dx	totales Differenzial von x	
∂x	partielles Differenzial von x	
∇	Nabla-Operator	$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$
\dot{x}	Zeitableitung von x	$\dot{x} = \frac{d}{dt}$
\mathbf{r}	Ortsvektor eines Teilchens	
r	Betrag des Ortsvektors	
r_{ij}	Abstand zwischen Teilchen i und j	$r_{ij} = r_i - r_j $

B Hilbert-Transformation

Zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Phasendifferenz der beiden Brücken wird die diskrete Hilbert-Transformation verwendet [Opp99, S. 775 ff.]. Es handelt sich dabei um eine Transformation $\mathcal{H}\{X_R[n]\}$, mit der aus einem realen Signal $X_R[n]$ ein analytisches Signal $X[n] = X_R[n] + iX_i[n]$ gebildet werden kann¹³. Dabei entspricht der Realteil von X dem ursprünglichen Signal und X_i der Hilbert-Transformation von X . Die in dieser Arbeit verwendete Implementierung geht auf die Arbeit von S. L. Marple [Mar99] zurück. Dazu wird zunächst die FOURIER-Transformation des reellen Signals $X_R[n]$ gebildet und das Ergebnis punktweise mit einem Vektor h multipliziert, für den gilt

$$h(i) = \begin{cases} 1, & i = 1, (N/2) + 1 \\ 2, & i = 2, 3, \dots, (N/2) \\ 0, & i = (N/2) + 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

wobei N die Länge des Signals $X_R[n]$ ist. Die gesuchte Hilbert-Transformation ist dann die inverse FOURIER-Transformation der punktweisen Multiplikation von $X_R[n]$ und h .

¹³Die eckigen Klammern kennzeichnen die Diskretheit des Signals.

C Kurzzeitfourier-Transformation

Die Kurzzeitfourier-Transformation (STFT) wird in der Signalverarbeitung genutzt um die Änderung der Frequenzen eines Signals zeitlich aufzulösen [Opp99, S. 714 ff.]. Das Signal wird dazu in einzelne Fenster aufgeteilt mit einem Überlapp von jeweils 60 % und eine Länge von 1 % der Signallänge N . Das Signal wird dann punktweise mit der Fensterfunktion multipliziert und dann für jedes Fenster eine FOURIER-Transformation durchgeführt. Mathematisch ergibt die STFT eines diskreten Signals $X[n]$

$$STFT \{X[n]\} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} X[n+m]w[m] \exp[-i\omega m] \quad (\text{C.1})$$

mit der Fensterfunktion $w[n]$ und der Frequenz ω . In dieser Arbeit wird das Hamming-Fenster [Opp99, S. 468] verwendet, für welches gilt:

$$w_h[n] = \begin{cases} 0.54 - 0.46 \cos(2\pi n/N) & , 0 \leq n \leq N \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Abbildung (C.1) zeigt das Hamming-Fenster geplottet über eine (kontinuierliche) Variable n .

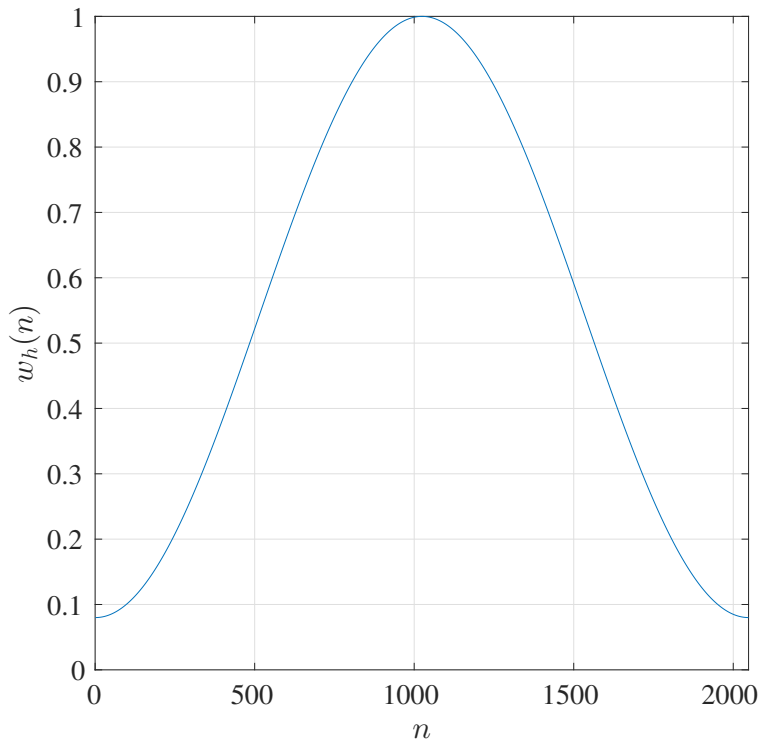


Abbildung C.1: Schematische Darstellung des Hamming-Fensters.

D Neuronale Netze

Künstliche neuronale Netze sind eine Klasse von Algorithmen, die meist im maschinellen Lernen (*engl.*: machine learning) zum Einsatz kommen. Sie eignen sich insbesondere für die Lösung von Problemen, bei denen kein oder nur wenig Wissen über die entsprechenden Zusammenhänge bekannt ist. Der grundsätzliche Aufbau eines neuronalen Netzes ist in Abbildung (D.1) dargestellt. Es besteht immer aus mindestens drei Schichten von Neuronen. Die erste Schicht entspricht dabei den Inputdaten aus denen das Netz einen funktionalen Zusammenhang zu den Outputs der letzten Schicht finden soll. Dazwischen befinden sich eine oder mehrere Schichten sogenannter versteckter Neuronen.

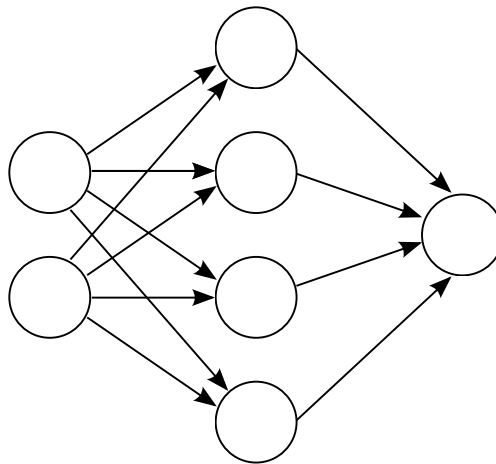


Abbildung D.1: Schematischer Aufbau eines neuronalen Netz. Hier mit zwei Inputs, einem Output und vier Neuronen in der versteckten Schicht.

Jeder Input x wird mit jedem einzelnen Neuron der Zwischenschicht verknüpft, welche wiederum mit jedem Neuron des Outputs verbunden sind. Jede Verknüpfung entspricht dabei einer Multiplikation mit sogenannten Gewichten Θ . Zusätzlich erhält jedes Neuron einen allgemeinen Offset. Dieser entspricht einem gedachten Neuron in der vorigen Schicht, dessen Output auf 1 fixiert und mit einem Gewicht b multipliziert wird. Der Output eines Neurons der Zwischenschicht entspricht dann einer Transferfunktion $\Gamma(z)$ ausgewertet an der Stelle der Summe aller parameterbehafteten Inputs $z = b + \Theta \cdot \mathbf{x}$. Auf diese Weise wird der dem Netz übergebene Input von Schicht zu Schicht weitergegeben, wobei nach jeder Schicht eine erneute Auswertung mit Gewichten Θ und b erfolgt, bis in der letzten Schicht das entsprechende Ergebnis ausgegeben wird. Der Lernprozess besteht dann im Vergleich vom Ergebnis mit einem gegebenen Trainingsdatenset aus Input und Output und der Anpassung der Gewichte Θ und b aller Schichten, sodass die quadratische Abweichung minimiert wird. Dadurch kann das neuronale Netz nun auch für bisher unbekannte Inputdaten einen Wert berechnen¹⁴ [Dem02].

In dieser Arbeit wird ein Netz mit vier Inputneuronen, den Schwerpunktskoordinaten der betrach-

¹⁴Wie gut dieser Wert das betrachtete Problem wiedergeben kann, hängt dabei stark von der gewählten Netzgeometrie ab.

teten Teilchen in y - und x -Richtung, zwei Outputneuronen, der potentiellen Gesamtenergie V und der kinetischen Energie T , sowie 20 versteckten Neuronen in der Zwischenschicht verwendet. Als Trainingsdatenset werden drei verschiedene Simulationen über jeweils 2 ns verwendet. Um dem Netz möglichst viele Zwischenstände in den Auslenkungen mit zugehörigen Energien zu liefern, wird zusätzlich zur getriebenen Oszillation mit der Resonanzfrequenz von Brücke 1 auch eine freie Oszillation (wobei beide Brücken gleichzeitig aus ihrer Ruhelage heraus und in entgegengesetzte Richtung ausgelenkt werden) und eine rein thermische Oszillation (ohne äußere Kraft) simuliert. Als Optimierungsverfahren wird die “Bayesian regularization” verwendet, das auf dem Verfahren von Levenberg-Marquardt [Mar63] beruht, um die Gewichte Θ und b zu bestimmen. Als Transferfunktion wird der Tangenshyperbolicus verwendet. Da es sich um ein Fit-Problem handelt, wird in der letzten Schicht (den Outputs) als Transferfunktion die Identität genutzt und einfach z ausgegeben. Insgesamt kann der Output mathematisch als

$$\begin{aligned} V_{NN} &= b_1^{(2)} + \sum_{i=1}^{20} \Theta_{i,1}^{(2)} \cdot \tanh \left(b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^4 \Theta_{i,j}^{(1)} \cdot x_j \right) \\ T_{NN} &= b_2^{(2)} + \sum_{i=1}^{20} \Theta_{i,2}^{(2)} \cdot \tanh \left(b_i^{(1)} + \sum_{j=1}^4 \Theta_{i,j}^{(1)} \cdot x_j \right) \end{aligned} \tag{D.1}$$

dargestellt werden. Dabei bezeichnet der Laufindex i die Neuronen der Zwischenschicht, der Index j die Inputneuronen, der Subskript das jeweilige Outputneuron und der Superskript die entsprechende Schicht (wobei die Zwischenschicht als 1 und der Output als 2 gezählt wird).

Für die spätere Auswertung wird zwar nur die potentielle Energie verwendet, jedoch zeigte sich, dass die potentielle Energie besser reproduziert werden konnte, wenn das neuronale Netz zu den entsprechenden Auslenkungsconfigurationen die zusätzliche Informationen über den Schwingungszustand des Systems (die kollektiven Geschwindigkeiten) besitzt.

E Genetischer Algorithmus

Die Rechengeschwindigkeit und -genauigkeit verschiedener Optimierungsverfahren hängt stark von der Wahl der entsprechenden Startwerte der Optimierungsparameter ab. Sind diese Startwerte nicht bekannt oder können nur auf ein großes Intervall eingeschränkt werden, so scheitern die meisten Optimierungsverfahren. Bei der Beschreibung der Simulationen über die in Gleichung (4.4) vorgestellte Phasenbeziehung wird deshalb ein genetischer Algorithmus verwendet um die gesuchten Parameter zu bestimmen [Mat16a]. Das Grundprinzip einer genetischen Rechnung ist es eine Vielzahl von Parametersets (Population) zu erzeugen und jeweils die Summe der quadratischen Abweichung zum Optimierungsproblem (Fitness) zu bestimmen. Die einzelnen Parametersets werden Individuen genannt. Nach jedem Optimierungsschritt werden die Individuen anhand ihrer Fitness sortiert. Ein

prozentualer Anteil der Individuen mit dem geringsten Fehler werden direkt in die nächste Population übergeben. Zur Erzeugung der restlichen Individuen werden aus den Parametersets neue Individuen erzeugt, indem entweder die Parameter eines einzelnen Individuums zufällig variiert werden (Mutation) oder zufällige Elternpaare gebildet und einzelne Parameter (Gene) aus jedem Elternteil zufällig zu einem neuen Parameterset zusammengestellt werden. Auf diese Weise werden mit dem genetischen Algorithmus neue Generationen aufgesetzt und eine Art biologische Evolution imitiert. Nach genügend langer Generationsentwicklung konvergiert das System zu einer optimalen Lösung [Mit99, S. 8 ff.].

In dieser Arbeit wird ein genetischer Algorithmus mit einer Populationsgröße von 700 über insgesamt 500 Generationen genutzt. Mit jedem Parameterset wird das gekoppelte Differentialgleichungssystem (4.4) mit dem ode45-Solver [Mat16c] [Dor80], einem Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung, gelöst und die Summe der quadratischen Abweichung zur Simulation bestimmt. Die besten 2% der aktuellen Population werden als Elite-Kinder behandelt und unverändert in die nächste Generation übernommen. Von den restlichen neuen Parametersets werden 20% durch Mutation und 80% durch Parametertausch gebildet.

F Ergänzende Ergebnisse

Phasendifferenz Bei der Analyse der Sprünge in der Phasendifferenz bei 4 K wurde gezeigt, dass an den Nulldurchgängen der langsamen Einhüllenden, die getriebene Brücke kurzzeitig eine Oszillation auslöst. Bei 10 K wurde beobachtet, dass ebenso der entgegengesetzte Fall einer zusätzlichen Oszillation auftreten kann. Die simulierte Phasendifferenz, sowie der Schwingungsverlauf um den ersten Nulldurchgang der Einhüllenden ist in Abbildung (F.1) dargestellt.

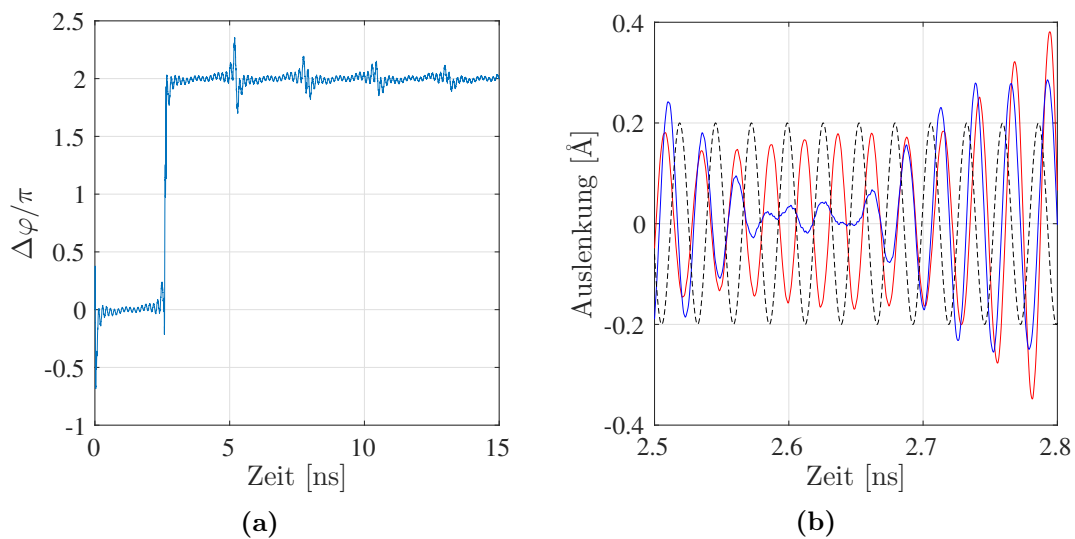


Abbildung F.1: Phasendifferenz (a) und Schwingungsverlauf (b) um den ersten Phasensprung bei 10 K. Blau: Brücke 1, Rot: Brücke 2, Schwarz: treibende Kraft mit Frequenz $\omega = 2\pi \cdot 37.42$ GHz und Amplitude 0.2 \AA .

In Teilbild (b) ist zu erkennen, dass bei circa $t = 2.58$ ns Brücke 1 (blau) eine zusätzliche halbe Oszillation ausführt und bei $t = 2.65$ ns eine volle Oszillation auslöst. Brücke 2 schwingt in der Zeit mit einer höheren Frequenz, wodurch sich insgesamt wieder ein Sprung von 2π in der Phasendifferenz der beiden Brücken (Teilbild (a)) einstellt. Weiter kann in Teilbild (a) beobachtet werden, dass sich nach dem ersten Phasensprung eine konstante Phasenbeziehung einstellt, wobei in äquidistanten Abständen kurze "Ausschläge" auftreten. Eine mögliche Erklärung hierfür ist, dass sich das System durch die Schwingung leicht erwärmt hat, was zu einer größeren Dämpfung im System führt. Dadurch wirkt sich die Abweichung in den Frequenzen von externer Kraft und getriebener Brücke weniger stark aus.

Synchronisierung bei Variation der treibenden Kraft Abbildung (F.2) zeigt einige Verläufe der Phasendifferenz zu verschiedenen Amplituden der treibenden Kraft bei der Frequenz $\omega = 1.60\omega_0^{(1)}$. Zusätzlich ist der Ordnungsparameter q nach Gleichung (4.5) angegeben.

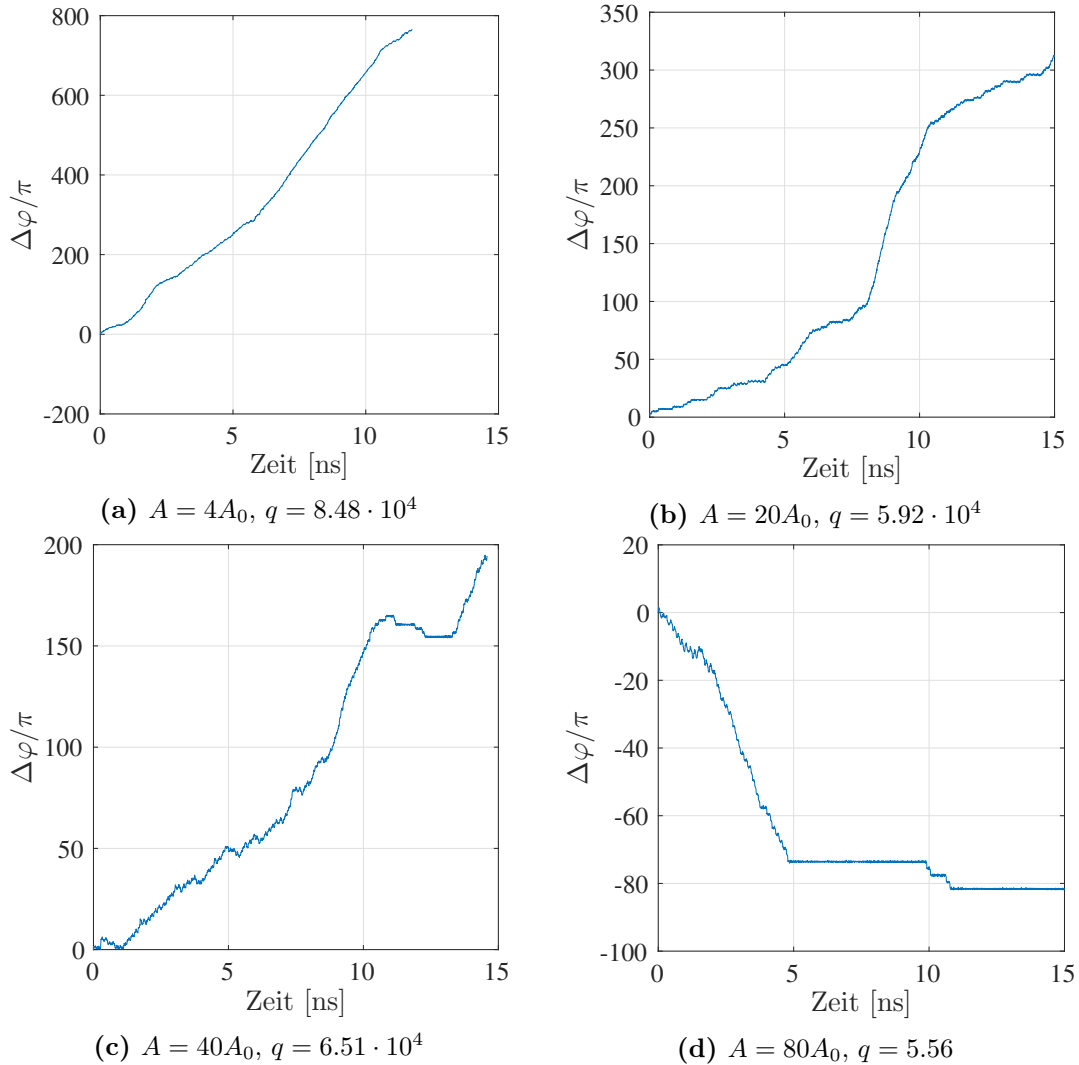


Abbildung F.2: Phasendifferenz für verschiedene Amplituden der treibenden Kraft bei $\omega = 1.60\omega_0^{(1)}$.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Nosé-Hoover-Thermostat am Beispiel des harmonischen Oszillators	9
2.2	Schematische Darstellung zur Kopplung zweier Oszillatoren	12
2.3	Beispiel einer Schwebung	13
2.4	Auslenkungsprofil der ersten Hauptschwingungsmode nach Euler-Bernoulli	15
2.5	Zusammenhang zwischen Kopplungsstärke und Frequenzabweichung bei der Synchronisierung zweier Oszillatoren	19
2.6	Phasendynamik für zwei gekoppelte autonome Oszillatoren	20
2.7	Synchronisierung höherer Ordnung - Arnold-Tongues	21
3.1	Erzeugte Brückengeometrie	24
3.2	Simulationsverfahren zur Oberflächenrekonstruktion	25
3.3	Oberflächenrekonstruktion - Vergleich der beiden Verfahren	25
3.4	Trimer-Dimer-Bildung	26
3.5	Oberflächen- und kantenrekonstruiertes System bei 500 K	27
4.1	Auslenkungsprozess - Thermische Korrektur	29
4.2	Theoretischer Fit an den Auslenkungsprozess	30
4.3	Temperaturabhängigkeit der Federkonstanten	31
4.4	Unterteilung der Nanobrücke in einzelne Boxen	32
4.5	Simuliertes Auslenkungsprofil der ersten Hauptschwingungsmode	32
4.6	Fit an das simulierte Auslenkungsprofil	33
4.7	Einschwingvorgang nach dem Loslassen	34
4.8	Schwerpunktsbewegung und Fourier-Transformation der freien Oszillation	35
4.9	Gesamttemperatur bei getriebener Oszillation	36
4.10	Einfluss der Dämpfung des Thermostaten auf die Temperatur	37
4.11	Mathematisches Modell zur Beschreibung der Phasendynamik	38
4.12	Phasendifferenz	39
4.13	Zeitliche Änderung der Frequenz	40
4.14	Phasendifferenz zur treibenden Kraft	41
4.15	Schwingungsverhalten beim Phasensprung	42
4.16	Energieoberfläche des gekoppelten Systems	43
4.17	Ordnungsparameter der Synchronisierung	44
4.18	Arnold-Tongues	45
4.19	Fit der Phasendifferentialgleichung an die Simulationsdaten	46
4.20	Temperaturabhängigkeit der Kopplungsstärken	47
5.1	Schwingungsverlauf, Frequenzen und Phasendifferenz im coarse-grained-Modell	48
5.2	Schwingungsverlauf im coarse-grained-Modell bei größerer Kraft	49
C.1	Hamming-Fenster	54
D.1	Schematischer Aufbau eines neuronalen Netz	55
F.1	Phasendifferenz und Schwingungsverlauf um den ersten Phasensprung bei 10 K	57
F.2	Phasendifferenz für verschiedene Amplituden der treibenden Kraft bei fester Frequenz	58

Literatur

- [Adl46] R. Adler, *A Study of Locking Phenomena in Oscillators*, Proceedings of the IRE **34**, 351 - 357 (1946).
- [Cha79] D. J. Chadi, *Atomic and Electronic Structures of Reconstructed Si (100) Surfaces*, Physical Review Letters **43**, 43-47 (1979).
- [Cha12] J. Chaste, A. Eichler, J. Moser, R. Rurali G. Ceballos und A. Bachtold, *A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution*, Nature Nanotechnology **7**, 301 - 304 (2012).
- [Cle03] A. N. Cleland, *Foundations of Nanomechanics - From Solid-State Theory to Device Applications*, 1. Aufl., Springer, 2003.
- [Dem02] H. Demuth und M. Beale, *Neural Network Toolbox*, 2002, http://www.image.ece.ntua.gr/courses_static/nn/matlab/nnet.pdf (aufgerufen am: 24.10.2016).
- [Dor80] J. R. Dormand und P. J. Prince, *A family of embedded Runge-Kutta formulae*, Journal of Computational and Applied Mathematics **6**, 19 - 26 (1980).
- [Dün91] B. Dünweg und W. Paul, *Brownian Dynamics Simulations Without Gaussian Random Numbers*, International Journal of Modern Physics C **2**, 817-827 (1991).
- [Fre02] D. Frenkel und B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, 2. Aufl., Academic Press, 2002.
- [Hum16] W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten und J. Stone, *VMD - Visual Molecular Dynamics*, 2016, <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/> (aufgerufen am: 17.09.2016).
- [Lab16] Sandia National Laboratories, *LAMMPS Molecular Dynamics Simulator*, 2016, <http://lammps.sandia.gov/> (aufgerufen am: 17.09.2016).
- [Mar63] D. W. Marquardt, *An Algorithm of least-squares estimation of nonlinear parameters*, Journal of the society for industrial and applied mathematics **11**, 431-441 (1963).
- [Mar92] G. J. Martyna, M. L. Klein und M. Tuckerman, *Nosé-Hoover chains: The canonical ensemble via continuous dynamics*, The Journal of Chemical Physics **97**, 2635-2643 (1992).
- [Mar99] S. L. Marple, *Computing the Discrete-Time "Analytic" Signal via FFT*, IEEE Transactions on Signal Processing **47**, 2600 - 2603 (1999).
- [Mat16a] MathWorks, *ga*, 2016, <https://de.mathworks.com/help/gads/ga.html> (aufgerufen am: 24.10.2016).
- [Mat16b] MathWorks, *MathWorks*, 2016, <http://de.mathworks.com/> (aufgerufen am: 17.09.2016).
- [Mat16c] MathWorks, *ode45*, 2016, <https://de.mathworks.com/help/matlab/ref/ode45.html> (aufgerufen am: 24.10.2016).
- [Mit99] M. Mitchell, *An Introduction to Genetic Algorithms*, 1. Aufl., MIT Press, 1999.

-
- [Opp99] A. V. Oppenheim, R. W. Schaffer und J. R. Buck, *Discrete-Time Signal Processing*, 2. Aufl., Prentice Hall, 1999.
- [Pik03] A. Pikovsky, M. Rosenblum und J. Kurths, *Synchronization - A Universal Concept in Nonlinear Sciences*, 1. Aufl., Cambridge University Press, 2003.
- [Sch78] T. Schneider und E. Stoll, *Molecular-dynamics study of a three-dimensional one-component model for distortive phase transitions*, Physical Review B **17**, 1302-1322 (1978).
- [Sch11] K. Scholz, *Simulation elastischer Eigenschaften von Nanobrücken*, Diplomarbeit, Universität Konstanz, 2011.
- [Sch12] R. Schmid, *Computersimulationen von Nanobrücken mit Fehlstellen*, Bachelorarbeit, Universität Konstanz, 2012.
- [Sti85] F. H. Stillinger und T. A. Weber, *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon*, Physical Review B **31**, 5262-5271 (1985).
- [Tia07] B. Tian, X. Zheng, T. J. Kempa, Y. Fang, N. Yu, G. Yu, J. Huang und C. M. Lieber, *Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources*, Nature **449**, 885 - 890 (2007).
- [Tuc06] M. E. Tuckerman, J. Alejandre, R. López-Rendón, A. L. Jochim und G. J. Martyna, *A Liouville-operator derived measure-preserving integrator for molecular dynamics simulations in the isothermal-isobaric ensemble*, Journal of Physics A: Mathematical and General **39**, 5629 (2006).

Danksagungen

Zum Abschluss möchte ich mich an dieser Stelle bei allen bedanken, die mit ihrer tatkräftigen Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Ein großer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Peter Nielaba, für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe, die Ermöglichung der Arbeit in diesem interessanten Themengebiet und die Begutachtung der Arbeit.

Ebenfalls möchte ich mich bei Frau Prof. Dr. Eva Weig bedanken, für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Für die Betreuung der Arbeit, die vielen hilfreichen Ideen und Anregungen (Zitat: "Nimm doch 'en neuronales Netz!") und die konstruktive Kritik, gilt ein besonderer Dank Ralf Schmid. Die vielen Diskussionen über Fachspezifisches oder auch Fachfremdes haben mir sehr geholfen und wesentlich zur entspannten Arbeitsatmosphäre beigetragen.

Ein besonderer Dank gilt auch meinen beiden Büromitbewohnern Markus Ring und Manuel Matt. Durch ihre offene und hilfsbereite Art habe ich mich hier sofort willkommen und wohl gefühlt. Bei Problemen technischer oder fachlicher Natur standen sie mir immer mit Rat und Tat zur Seite und konnten die Stimmung auch und vor allem in der Endphase meiner Arbeit stets auflockern (auch wenn Markus sich wohl hin und wieder die Frage "Warum?" stellen sollte).

Generell möchte ich allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe danken. Die vielen Diskussionen und Gespräche beim Mittagessen, in der Kaffecke oder am Arbeitsplatz haben nicht nur wesentlich zum Wohlfühlen beigetragen, sondern auch viele hilfreiche Tipps und Ideen hervorgebracht.

Abschließend möchte ich mich bei meinen Eltern und meiner gesamten Familie bedanken. Durch die jahrelange Unterstützung und den Rückhalt privater und finanzieller Art war es mir erst überhaupt möglich Physik zu studieren und diese Arbeit anzufertigen. Danke!

Erklärung zur Urheberschaft

Ich versichere hiermit, dass ich diese Masterarbeit mit dem Titel „Molekulardynamik-Simulation zur Untersuchung der atomistischen Kopplung von Silizium-Nanobrücken“ selbständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel und Quellen als die angegebenen benutzt habe.

Die Stellen, die anderen Werken (einschließlich des Internets und anderer elektronischer Text- und Datensammlungen) dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, habe ich in jedem einzelnen Fall durch Angabe der Quelle bzw. der Sekundärliteratur als Entlehnung kenntlich gemacht.

Weiterhin versichere ich hiermit, dass die o.g. Arbeit noch nicht anderweitig als Abschlussarbeit einer Diplom-, Bachelor- bzw. Masterprüfung eingereicht wurde. Mir ist ferner bekannt, dass ich bis zum Abschluss des Prüfungsverfahrens die Materialien verfügbar zu halten habe, welche die eigenständige Abfassung der Arbeit belegen können.

Die Arbeit wird nach Abschluss des Prüfungsverfahrens der Bibliothek der Universität Konstanz übergeben und katalogisiert. Damit ist sie durch Einsicht und Ausleihe öffentlich zugänglich. Die erfassten Daten wie z.B. Autor, Titel usw. stehen öffentlich zur Verfügung und können durch Dritte (z.B. Suchmaschinenanbieter oder Datenbankbetreiber) weiterverwendet werden.

Als Urheber der anliegenden Arbeit stimme ich diesem Verfahren zu.

Ort, Datum

Unterschrift