ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 129 за 2019 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Жуков В.Т., Краснов В.М.,
Краснов М.М., Новикова Н.Д.,
Феодоритова О.Б.

О численной модели физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: О численной модели физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках / В.Т.Жуков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 129. 21 с. http://doi.org/10.20948/prepr-2019-129
URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-129

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

В.Т. Жуков, В.М. Краснов, М.М. Краснов, Н.Д. Новикова,
О.Б. Феодоритова

О численной модели физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

Москва – 2019

В.Т. Жуков[1], В.М. Краснов[2,3], М.М. Краснов[1,2], Н.Д. Новикова[1], О.Б. Феодоритова[1]

[1]Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия
[2]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
[3]Department of Physics, Stockholm University, AlbaNova University Center, SE-10691 Stockholm, Sweden.

О численной модели физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

Изложен подход к численному моделированию высокотемпературной сверхпроводимости в полупроводниках, в которых сверхпроводящие и диэлектрические слои образуют анизотропную структуру с джозефсоновским механизмом протекания тока сквозь непроводящие участки. Сформулирована приближенная трехмерная математическая модель, учитывающая нелинейное взаимодействие электро-теплофизических процессов. Такое взаимодействие моделируется заданием зависимости тензоров теплопроводности и электропроводности от температуры. Проведены модельные расчеты висмутового высокотемпературного сверхпроводника Bi-2212.

Ключевые слова: численное моделирование, высокотемпературная сверхпроводимость, уравнения теплопроводности и электрического поля.

Victor Timofeevich Zhukov, Vladimir Mikhailovich Krasnov, Mikhail Mikhailovich Krasnov, Natalia Dmitrievna Novikova, Olga Borisovna Feodoritova

On numerical simulation of physical processes in high-temperature superconductors

The approach to 3D simulation of high-temperature superconductivity in superconductors where the layers form a structure with intrinsic Josephson junctions is presented. An approximate three-dimensional mathematical model is formulated, taking into account the nonlinear interaction of heating and electric field. This interaction is modeled by dependences of thermal conductivity and resistivity on temperature. Model calculations of the bismuth high-temperature superconductor Bi-2212 are carried out.

Keywords: numerical simulation, high-temperature superconductivity, heatconduction, electric field.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-01-00670 с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт», http://computing.nrcki.ru/.

Оглавление

1. Введение

Напомним, что сверхпроводниками называют материалы, которые проводят электрический ток с нулевым сопротивлением. Это явление впервые обнаружилось при очень низких температурах (несколько градусов выше абсолютного нуля), однако затем сверхпроводимости удалось добиться при более высоких температурах (около $90°K$). Высокотемпературной считается сверхпроводимость, соответствующая температурам выше $77°K$ (температура жидкого азота). Оказалось, что в системах, состоящих из сильно анизотропных слоистых высокотемпературных сверхпроводников, сверхпроводящие и диэлектрические слои образуют структуру, в которой наблюдается эффект Джозефсона протекания тока сквозь непроводящий участок. В 1962 г. в короткой статье английского физика Б. Джозефсона исследован туннельный переход (контакт сверхпроводников через прослойку диэлектрика), где было предсказано, что через контакт в отсутствие напряжения может течь постоянный ток, а при конечном напряжении через контакт помимо обычного постоянного тока будет также течь переменный ток. За открытие этого эффекта Б. Джозефсон получил в 1973 г. Нобелевскую премию по физике, и с тех пор идут интенсивные исследования таких систем. Слоистые высокотемпературные сверхпроводники представляют собой естественные стеки джозефсоновских переходов атомного масштаба. Такие переходы позволяют напрямую переводить постоянное напряжение в высокочастотные электромагнитные колебания.

Важность моделирования систем с джозефсоновскими переходами обусловлена их многочисленными практическими приложениями в сверхпроводящей электронике. В частности, они служат для получения мощного когерентного терагерцового электромагнитного излучения, что имеет широкие перспективы для разработки новых устройств в области информационно-телекоммуникационных систем, экологии, химии, медицине (неионизирующее обследование), безопасности, возможно использование таких систем в качестве элементной базы для квантовых процессоров и компьютерной памяти. Такие источники нужны также для многих фундаментальных исследований в области физики конденсированного состояния, химии, астрофизики, биологии и т.п. Особая значимость именно терагерцовой области частот связана с тем, что в этой области находится большинство молекулярных переходов. Например, вода в живых организмах или космосе, углекислый газ в атмосфере и т.д. Однако развитие науки и технологий в терагерцовой области тормозит отсутствие компактных источников в этом диапазоне. Эта актуальная фундаментальная проблема носит название «терагерцовая щель» [1], [2]. В микроволновой области с длиной волны больше 3 мм (с частотой менее 0.1 ТГц) имеется большое количество полупроводниковых источников. В области с длиной волны менее 30 мкм (более 10 ТГц) имеются соответствующие инфракрасные лазеры. Но для промежуточных частот 0.1–10 ТГц пока нет источников, удовлетворяющих всем требованиям исследователей и потребителей.

Поэтому разработка сверхпроводящих ТГц источников требует детального понимания распределения температуры, тока и напряжения в сверхпроводящих мезоструктурах. Задача усложняется существенной нелинейностью всех характеристик таких структур.

Целью настоящей работы является проведение трёхмерного численного моделирования мезоструктур из высокотемпературных сверхпроводников в сильно нелинейном режиме под воздействием большого транспортного тока. Ставится задача решения нелинейной проблемы пространственного распределения температуры, тока и напряжения с учетом реальной формы образцов. Цель состоит в применении аппарата численного моделирования для анализа характеристик мезоструктур монокристаллов висмутсодержащих купратов Bi-2212 ($Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$).

Теоретические и экспериментальные исследования слоистых джозефсоновских структур интенсивно проводятся в настоящее время в российских и зарубежных научных центрах. В ИПМ такая работа инициирована профессором В.М. Красновым, сотрудником одного из таких центров – лаборатории экспериментальной физики конденсированных сред Стокгольмского университета, [3]–[5].

2. Физическая модель

В данной работе мы рассматриваем задачу создания методологии математического моделирования современной сверхпроводниковой технологии, ориентированной на создание высокочастотных терагерцовых источников излучения на основе монокристаллов Bi-2212. Разработка сверхпроводящих полупроводников требует детального моделирования температурных полей, тока и напряжения в сверхпроводящих мезоструктурах. Для правильной постановки вычислительного эксперимента нужно многократно решать систему нелинейных уравнений в частных производных для исследования физических характеристик сверхпроводниковых устройств в зависимости от параметров физической модели и геометрической формы мезоструктур. Сложность поставленной задачи определяется такими факторами, как пространственная анизотропия структур, что в условиях предсказательных вычислений требует использования аппроксимаций дифференциальной задачи на разностных сетках с большим числом узлов. Поэтому актуальным является развитие параллельных методов численного интегрирования для проведения многопараметрических расчетов на компьютерах с большим числом процессорных элементов. Эти факторы обусловливают необходимость применения специальных методов интегрирования: многосеточных методов, неявных схем, разрешаемых параллельными алгоритмами, других подходов, таких как явно-итерационные методы, использующие свойства многочленов Чебышёва.

Задача создания методики численного моделирования физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках отвечает насущным потребностям сложных и тонких физических экспериментов. В подтверждение приведем работу международной группы ученых, см. [6]. Авторы этой работы обнаружили в сверхпроводящих металлах феномен, который пока еще не имеет объяснения. Исследователи изучили переходную фазу в сверхпроводнике Bi-2212. Сверхпроводимость вызвана электронами, которые ниже определенной критической температуры могут беспрепятственно проходить через кристалл. Выше этой границы в высокотемпературных сверхпроводниках возникает «странная» фаза, при которой электроны ведут себя не как независимые частицы, как в обычных металлах, а словно собираются в коллективы. Кроме температуры, на фазовый переход влияет степень легирования, то есть наличия в металле примесей. При относительно высокой температуре переход между нормальным и «странным» металлом происходит при доле примесей 20%, при этом распределение энергии электронов скачкообразным образом меняется. Расчет таких явлений выходит за рамки возможностей современных компьютеров. Но в некоторой окрестности критической температуры численное моделирование может оказаться успешным и быть адекватным физическим экспериментам. Исследуемые сверхпроводники Bi-2212, относящиеся к так называемым сверхпроводникам BSCCO (Bismuth Strontium Calcium Copper Oxide), достигают критической температуры $108^{\circ}K$. В сверхпроводнике электроны движутся не независимо, а парами (куперовскими парами). Чтобы ток перешёл из одного слоя в другой, зазор между ними должен быть меньше характерной длины когерентности. Для металлов и сплавов этот размер составляет десятки, а то и сотни нанометров. А вот для сверхпроводника Bi-2212 он составляет всего лишь пару нанометров и даже доли нанометра, в зависимости от направления движения. Даже зазоры между отдельными зёрнами поликристалла оказываются уже вполне ощутимым препятствием, не говоря уж о зазорах между отдельными кусками сверхпроводника. В результате сверхпроводящая керамика, если не предпринимать специальных ухищрений, способна пропускать через себя лишь относительно небольшой ток.

В сверхпроводнике электрическое сопротивление может внезапно упасть до нуля при охлаждении материала сверхпроводника ниже так называемой температуры сверхпроводящего перехода T_c, определяемой для каждого конкретного материала. Вторым ключевым параметром сверхпроводника является критический ток I_c (или плотность критического тока J_c). Его значение представляет собой величину постоянного незатухающего электрического тока в сверхпроводнике, выше которого образец возвращается в нормальное несверхпроводящее состояние. Третьим критическим параметром является напряженность приложенного магнитного поля H_c (или магнитная индукция), выше которой восстанавливается электрическое сопротивление сверхпроводника, и он снова становится несверхпроводящим.

Наблюдаемые в экспериментах зависимости коэффициента теплопроводности $\kappa = \kappa(T)$ от температуры можно свести к двум основным типам: с крупномасштабным максимумом $\kappa_{\max}$ при некоторой температуре $T_{\max}$ и с монотонным ростом функции $\kappa(T)$ относительно температуры [7]. В обоих случаях могут наблюдаться локальные аномалии в виде изменения наклона кривой $\kappa = \kappa(T)$, изломов, скачков и т. п.

Зависимость удельного электросопротивления и коэффициента теплопроводности керамики Bi-2212 показана на рис. 1 соответственно вверху, рис. 1, a, и внизу рис. 1, b. По оси ординат на верхнем графике отложено удельное сопротивление в единицах [$\mu\,\Omega\,cm$] = [мкОм$\times$см]. На рис. 1, b показана типичная зависимость коэффициента теплопроводности $\kappa = \kappa(T)$ от температуры; наглядно виден четко выраженный максимум коэффициента теплопроводности при $T = 50\,^{\circ}K$.

Теоретические интерпретации теплопроводности сверхпроводников характеризуются рассмотрением тонких физических явлений, но мы на первом этапе ограничимся достаточно простыми температурными характеристиками.

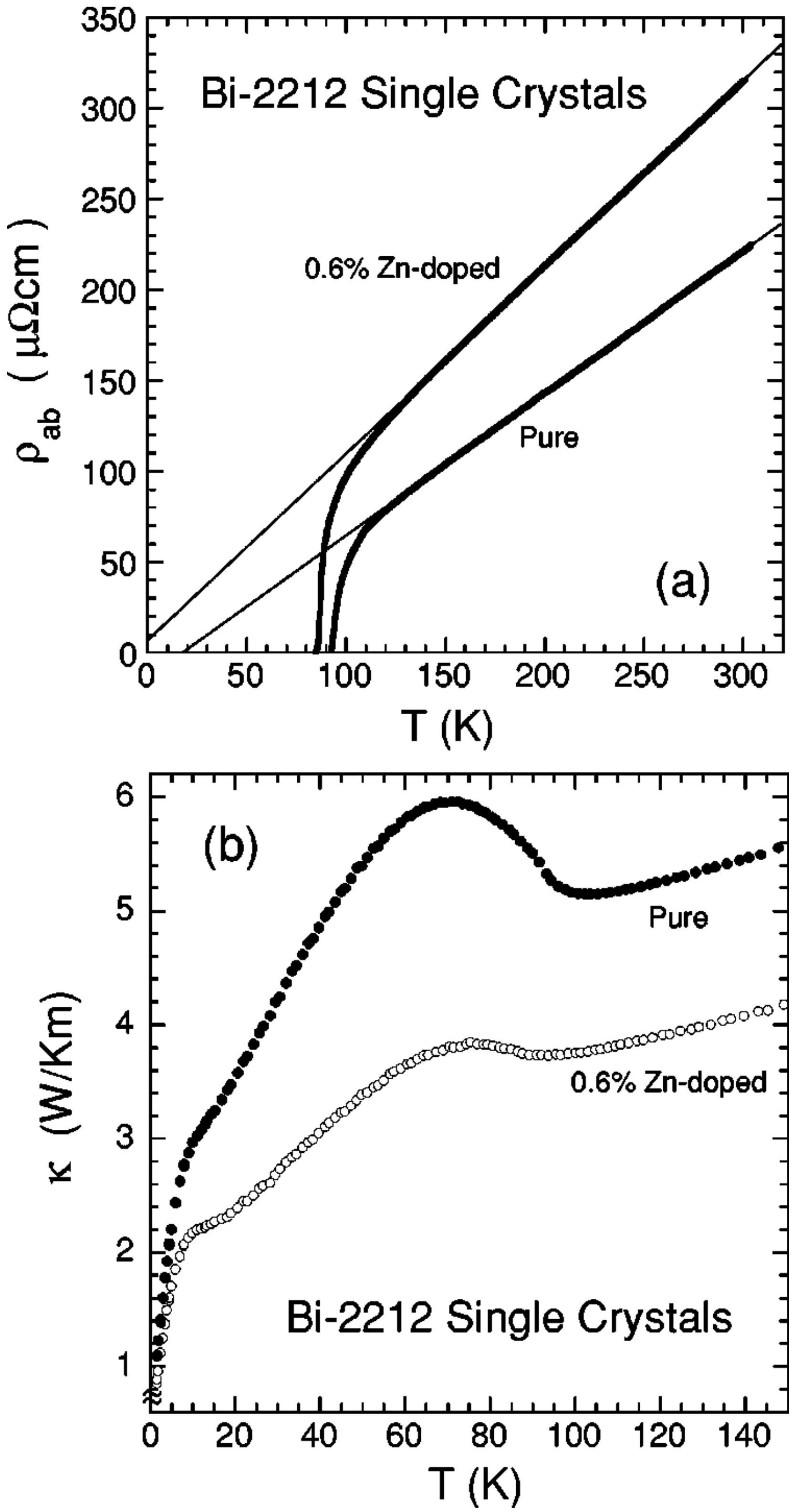

Рис. 1. Зависимость удельного электросопротивления и коэффициента теплопроводности керамики Bi-2212 от температуры [7]

Слоистые высокотемпературные сверхпроводники, такие как купраты Bi-2212, представляют собой естественные стеки джозефсоновских переходов атомного масштаба [8]. Туннельные контакты образуются на кристаллографическом уровне между соседними сверхпроводящими Cu_2O_2 слоями, разделенными слоем изолятора Bi_2O. Таким образом, монокристалл Bi-2212 представляет собой стек джозефсоновских (сверхпроводящих туннельных) переходов с периодом всего 1.5 нм. Сверхпроводящие переходы позволяют напрямую переводить постоянное напряжение в высокочастотные электромагнитные колебания с настраиваемой частотой $f = (2e/\hbar)\cdot V$, где V – напряжение на переходе, е – заряд электрона и $\hbar$ – постоянная Планка. Возможность генерирования ТГц сигнала мезоструктурами Bi-2212 продемонстрирована экспериментально [9, 10]. Исключительно важной, с точки зрения генерации, особенностью Bi-2212 является атомно-плотная компоновка переходов. Это дает возможность для очень простой интеграции большого количества (сотни и тысячи) вертикально расположенных переходов в мезоструктурах (650 переходов на 1 мкм высоты). Большое количество переходов необходимо для достижения когерентного сверхрадиационного усиления мощности излучения, пропорционального квадрату количества синхронизованных переходов.

Некоторые расчетные и экспериментальные характеристики мезы Bi-2212, взятые из [5], [11]–[13], приведены на рис. 2. На нем показана геометрия мезоструктуры на кристалле, наклеенном на подложку (рис. 2, a). На верхней поверхности мезы находится металлический электрод (Au), через который инжектируется ток J [11]. На рис 2, b приведен пример расчета упрощенной задачи распределения температуры в мезе [13]. Область, отмеченная красным цветом, соответствует горячему каналу, нагретому выше критической температуры. На рис. 2, c показаны экспериментально измеренные вольтамперные характеристики (ВАХ – зависимость тока от напряжения) маленькой мезы при различных температурах [5]. Критическая температура $T_c = 93°K$. Видно, что при низких температурах эта функция сильно нелинейна и что степень нелинейности зависит от температуры, а при высоких температурах $T > T_c$ эта функция становится линейной. На рис. 2, d приведена температурная зависимость сопротивления при нулевом напряжении (синяя линия, левая ось) и коэффициента теплопроводности (красная линия, правая ось). Видна существенная нелинейность обеих характеристик [12].

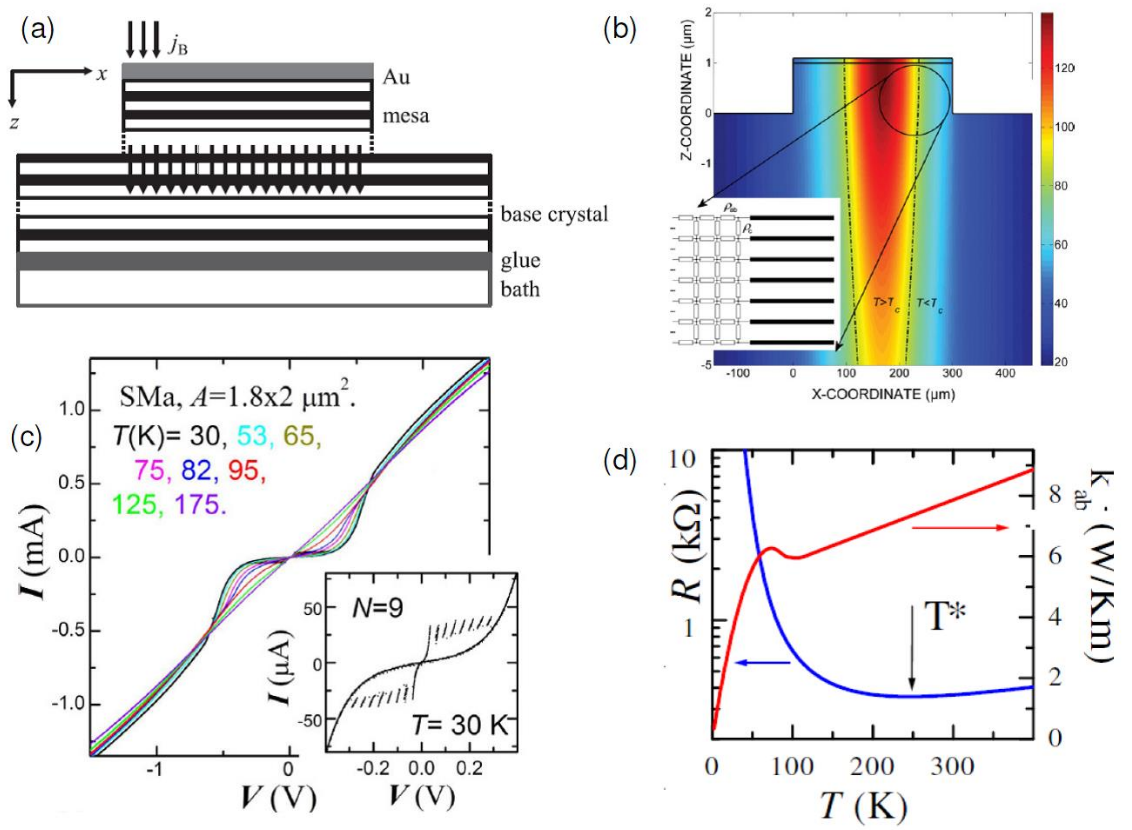

Рис. 2. (a) – геометрия мезоструктуры на кристалле [11];
(b) – температура в мезе [13], (c) – вольтамперные характеристики мезы при различной температуре [5], (d) – температурная зависимость сопротивления (синяя линия, левая ось) и коэффициента теплопроводности (красная линия, правая ось) [12]

Сверхпроводящие устройства чувствительны к перегреву и перестают работать, когда температура превышает критическую температуру сверхпроводимости [11], [13]-[15]. Поэтому разработка сверхпроводящих ТГц источников требует тщательного численного моделирования теплопроводности с учетом нелинейного взаимодействия с электрическим полем в сверхпроводящих мезоструктурах для образцов с различными трёхмерными формами [11] с целью исследования теплового баланса и работы устройств. Это и есть главная цель данной работы. Именно поэтому в данной задаче формулируется согласованная математическая модель расчета электро-теплофизических процессов.

3. Математическая модель

Пусть внутри твёрдого тела имеется некоторое стационарное распределение электрического потенциала φ и температуры T. Тогда напряжённость электрического поля внутри тела удовлетворяет уравнению

$$E = -grad\ \varphi = -\nabla\varphi. \tag{1}$$

Плотность электрического тока внутри тела определяется уравнением

$$j = \sigma E = -\sigma\nabla\varphi, \tag{2}$$

где $\sigma = \sigma(T)$ – тензор удельной электропроводности среды. Мы будем считать этот тензор диагональным с элементами σ_{xx}, σ_{yy}, σ_{zz}, но сильно анизотропным, компоненты тензора σ_{xx} и σ_{yy} равны друг другу и в $10^5 \div 10^6$ раз превышают σ_{zz}. Кроме того, электропроводность существенно и нелинейно зависит от температуры (чем выше температура, тем больше электропроводность). Точный характер зависимости электропроводности от температуры может задаваться формулой или таблично (в этом случае электропроводность при некоторой температуре T определяется путём линейной интерполяции двух известных соседних значений). Такая зависимость электропроводности от температуры может приводить к перегреву некоторой области тела, например, середина нагревается больше, чем другие части. Тогда ток в этой области начинает расти, что приводит к ещё большему нагреванию этой области и ещё большему росту тока в ней. В результате почти весь ток начинает течь внутри этой области, температура в ней становится гораздо выше температуры в других областях, что может привести к разрушению (плавлению) образца. Обнаружение подобных эффектов также является целью будущей работы.

Плотность электрического тока удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\ j = 0, \tag{3}$$

где ρ – объёмная плотность заряда. Так как мы ставим задачу нахождения стационарного состояния, то для плотности электрического тока получаем уравнение $div\ j = 0$. Следовательно, для электрического потенциала получаем эллиптическое уравнение $div\left(\sigma\ grad\ \varphi\right) = 0$, которое запишем с использованием символа ∇ (набла) в виде

$$\nabla \cdot \sigma\ \nabla\varphi = 0. \tag{5}$$

Здесь и далее символом «$\cdot$» применительно к векторам будем обозначать скалярное произведение векторов. На границе данное уравнение дополняется подходящими граничными условиями. Они делятся на два типа. На границах, к которым приложено постоянное напряжение (это, как правило, верхняя часть мез), поддерживается постоянный потенциал (т.е. заданы условия Дирихле). Если разность потенциалов равна U_0, то на одной границе поддерживается постоянный потенциал $0.5U_0$, а на другой $-0.5U_0$. На оставшихся границах выполняется условие «невытекания» заряда (проекция вектора плотности тока на вектор нормали должна равняться нулю, т.е. задано условие Неймана). Таким образом, на границах поставлены краевые условия вида

$$\varphi = +0.5U_0, \quad \varphi = -0.5U_0\ , \tag{4}$$

$$\nabla\varphi \cdot n = 0\,, \tag{5}$$

где n – вектор внешней нормали к поверхности границы.

Для описания температуры рассмотрим нестационарное уравнение теплопроводности

$$c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla\ k(T)\ \nabla \mathrm{T} + q(T), \tag{6}$$

где $k(T)$ – тензор теплопроводности, $c(T)$ – объёмная теплоёмкость, $q(T)$ – функция тепловых источников. Тензор теплопроводности $k(T)$, так же как и тензор электропроводности $\sigma(T)$, будем считать диагональным с элементами κ_{xx}, κ_{yy}, κ_{zz} и анизотропным. Коэффициент анизотропии для теплопроводности не так велик, как для электропроводности.

Источник тепла $q(T)$ моделирует нагрев вещества электрическим током, текущим в образце. Интенсивность тепловыделения в единичном объеме равна

$$q(T) = E \cdot j = \nabla\varphi \cdot \sigma(T)\ \nabla\varphi. \tag{7}$$

На границе области уравнение (6) дополняется граничными условиями отсутствия потока тепла через границу области, т.е. границы теплоизолированы:

$$\nabla T \cdot n = 0. \tag{8}$$

Для нахождения стационарного распределения потенциала и температуры воспользуемся известным методом сведения стационарной задачи к решению установлением по времени нестационарной системы уравнений

$$\begin{aligned} & c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla\ k(T)\ \nabla \mathrm{T} + \nabla\varphi \cdot \sigma(T)\ \nabla\varphi, \\ & \frac{\partial\varphi}{\partial t} = \nabla \cdot \sigma \nabla\varphi \end{aligned} \tag{9}$$

с краевыми условиями (4), (5), (8) и заданными начальными условиями.

Решать отдельно уравнение для потенциала и уравнение для температуры нельзя, т.к. в уравнении для потенциала электропроводность $\sigma = \sigma(T)$ существенно зависит от температуры, а в уравнении для температуры энерговыделение зависит нелинейно (квадратично) от первых производных (градиента) потенциала.

Компоненты удельного сопротивления для модельной задачи $\rho_{xx}, \rho_{yy}, \rho_{zz}$ заданы в виде

$$\begin{aligned} & \rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_0 \exp\left(\frac{300}{150+T}\right), \\ & \rho_0 = 0.3, \quad \rho_{zz} = 10^5 \rho_{xx}. \end{aligned} \tag{10}$$

Диагональные элементы тензора электропроводности имеют вид $\sigma_{xx} = 1/\rho_{xx}$, $\sigma_{vy} = 1/\rho_{vy}$, $\sigma_{zz} = 1/\rho_{zz}$.

Компоненты тензора теплопроводности $\kappa_{xx}, \kappa_{yy}, \kappa_{zz}$ заданы в виде

$$\kappa_{xx} = \kappa_{yy} = \kappa_0 T\,,$$
$$\kappa_0 = 0.1, \quad \kappa_{zz} = \kappa_{xx}/8\,. \qquad (11)$$

Теплоемкость сверхпроводника не зависит от направления (т.е. изотропна) и описывается скалярной функцией

$$C(T) = C_0 \cdot T^2, \quad C_0 = 10^{-3}\,. \qquad (12)$$

Зависимости (10)–(12) носят модельный характер. В окрестности температуры сверхпроводящего перехода реальное поведение электропроводности, теплопроводности и теплоемкости является более сложным, см., например, рис. 1.

4. Технология и результаты расчётов

Опишем сначала геометрию модели. На рис. 3 показана расчетная область, но в искаженном для наглядности виде. На рис. 4 приведено сечение модели фронтальной вертикальной плоскостью Oxz. Прямоугольник ABCD – это сечение левой мезы. Обе мезы одинаковы и имеют размеры LmX, LmY, LmZ по координатным осям Ox, Oy, Oz соответственно. Мезы расположены на основном кристалле со сторонами Lx, Ly, Lz и составляют вместе полупроводниковую мезоструктуру. Эта конструкция лежит на полубесконечном основании с изотропными свойствами. Для расчета основание задается ограниченным и имеет вид прямого параллелпипеда со сторонами L_1, L_2, L_3. Геометрические размеры являются параметрами задачи, они будут в дальнейшем подбираться.

Расчёты проводились с использованием программного комплекса NOISEtte [16], предназначенного для крупномасштабных расчётов задач аэродинамики и аэроакустики. Применение данного комплекса потребовало внесения в него изменений, направленных на возможность расчёта теплопроводности и потенциала электрического поля в твёрдом теле. Для таких расчетов комплекс NOISEtte изначально не предназначен, но оказалось, что соответственные модификации позволили наделить этот комплекс новыми функциями.

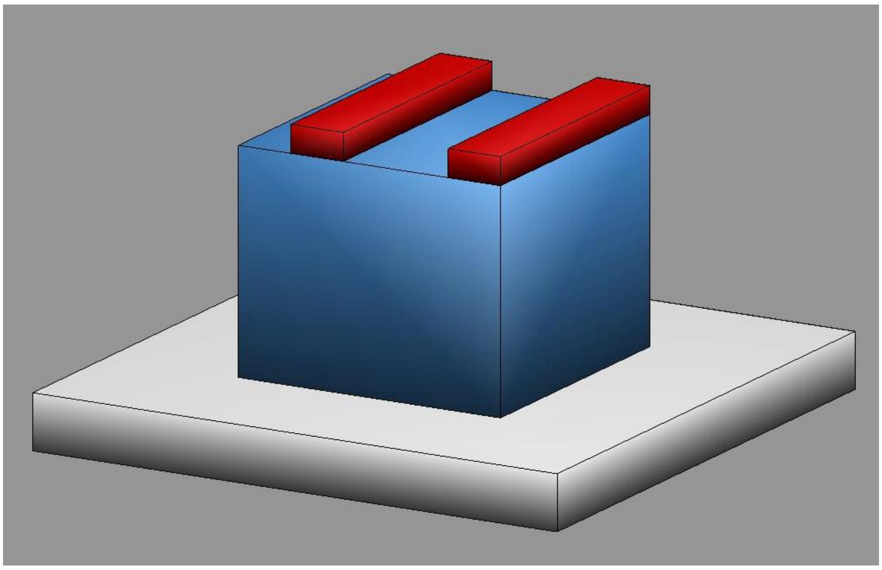

Рис. 3. Упрощенный схематический вид модели

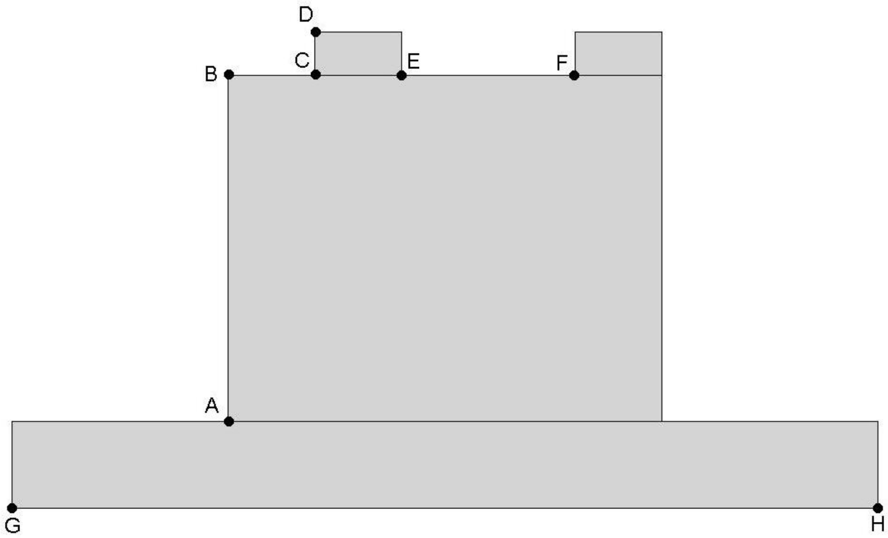

Рис. 4. Сечение модели фронтальной плоскостью

При расчёте теплопроводности в твёрдом теле вместо пяти (в трехмерном случае) консервативных переменных, нужных для расчётов течений сплошной среды в приближении Навье-Стокса (масса, компоненты импульса и энергия), остаётся только энергия.

Как уже говорилось выше, расчёт ведётся одновременно для двух величин – электрического потенциала и температуры. Результатом расчёта является стационарное распределение в теле этих двух величин. Расчёт потенциала, как и температуры, ведётся по коду решения параболического уравнения методом установления. При этом для потенциала правая часть (источниковый член) в энергетическом параболическом уравнении считается нулевой, а внутренняя энергия интерпретируется как потенциал. Проблема состоит в том, что, во-первых, как электрические (удельное сопротивление), так и тепловые (теплопроводность, теплоёмкость) характеристики твёрдого тела существенно и нелинейно зависят о температуры, а во-вторых, источниковый член в уравнении теплопроводности (мощность источника) зависит от градиента электрического потенциала (плотности электрического тока). Поэтому нельзя, например, один раз рассчитать стационарное распределение потенциала, а затем для него найти распределение температуры. С изменением температуры распределение потенциала также меняется – температура и потенциал являются согласованными пространственными распределениями, поэтому процесс решения носит итерационный характер.

Важным отличием при расчёте потенциала и температуры является различие граничных условий. Для температуры на всех границах единое граничное условие – отсутствие теплового излучения (на границе проекция вектора градиента температуры на вектор нормали к границе равен нулю). Для электрического потенциала на двух границах (поверхностях мез) поддерживается постоянный потенциал ($+0.5U_0$ и $-0.5U_0$), на остальных границах условие такое же, как и для температуры (нулевой поток).

Расчёт ведётся следующим образом. Вводятся два набора переменных (для электрического потенциала и температуры). В этот набор входят массивы (сеточные функции) для распределения (на текущем и на предыдущем расчётных шагах по времени) соответствующего поля, граничные условия, источниковые члены и некоторые параметры расчётов, например, диффузионное число Куранта. Когда ведётся расчёт потенциала, расчётный модуль программного комплекса переключается на один набор переменных, а при расчёте температуры – на другой.

В начале расчётов устанавливаются начальные значения всех переменных в обоих наборах. Поле электрического потенциала полагается всюду (кроме двух границ) нулевым, а поле температуры – всюду равным одному заданному в файле конфигурации значению (например, $T = 100^\circ K$). Основной цикл считает стационарное распределение температуры (до установления). Один шаг этого цикла начинается с расчёта стационарного распределения потенциала при текущем (на предыдущем расчётном шаге по времени) распределении температуры. Это делается в ещё одном внутреннем цикле. После этого в каждом узле сетки вычисляется градиент потенциала, этот градиент затем используется для вычисления удельной мощности выделяемой энергии в источниковом члене уравнения теплопроводности для температуры. Затем расчёт переключается на набор переменных для температуры и делается один шаг по времени. Если температура при этом меняется мало согласно заданной точности (температура стабилизировалась), то происходит выход из основного цикла, иначе расчёт переключается на переменные для потенциала и основной цикл начинается сначала.

На самом первом шаге основного цикла расчёт стационарного распределения потенциала может длиться достаточно долго (несколько десятков тысяч шагов), на следующих же шагах потенциал считается уже гораздо быстрее (несколько десятков шагов по времени).

Отметим, что расчет шагами по времени не ставит целью найти эволюцию процессов во времени, поэтому диффузионное число Куранта задается достаточно большим, $10^5 - 10^6$.

Такой расчет является заменой метода Ньютона, используемого для решения нелинейной стационарной системы уравнений.

Отметим, что на каждом шаге по времени записывается линейная неявная схема, которая решается методом сопряженных градиентов с предобусловлителем в виде неполного LU-разложения ILU(0). В дальнейшем предполагается использовать многосеточную технологию, детально представленную в работах [17]–[20].

Покажем результаты одного из расчётов. На рис. 5, 6 представлены результаты расчетов на блочно-структурной трехмерной сетке с общим числом

17 тыс. узлов. Сетка согласована по границам блоков, размеры ячеек, имеющих общие грани, одинаковы. На рис. 5 показано стационарное распределение температуры во всей расчетной области (слева) и в вертикальном сечении (справа). На этом рисунке справа показано сечение в плоскости Oxz с увеличением масштаба по оси Oz в 30 раз. На рис. 6 показано стационарное распределение потенциала. На этом рисунке справа показано сечение в плоскости Oxz с увеличением масштаба по оси Oz в 50 раз.

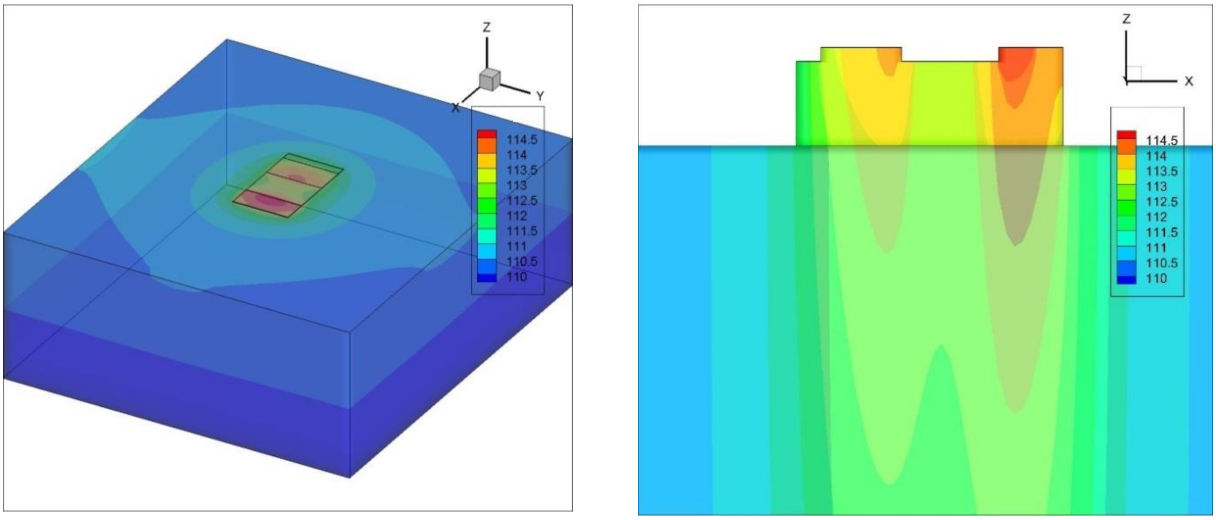

Рис 5. Стационарное распределение температуры. На рисунке справа (срез в плоскости Oxz) масштаб по оси Oz увеличен в 30 раз

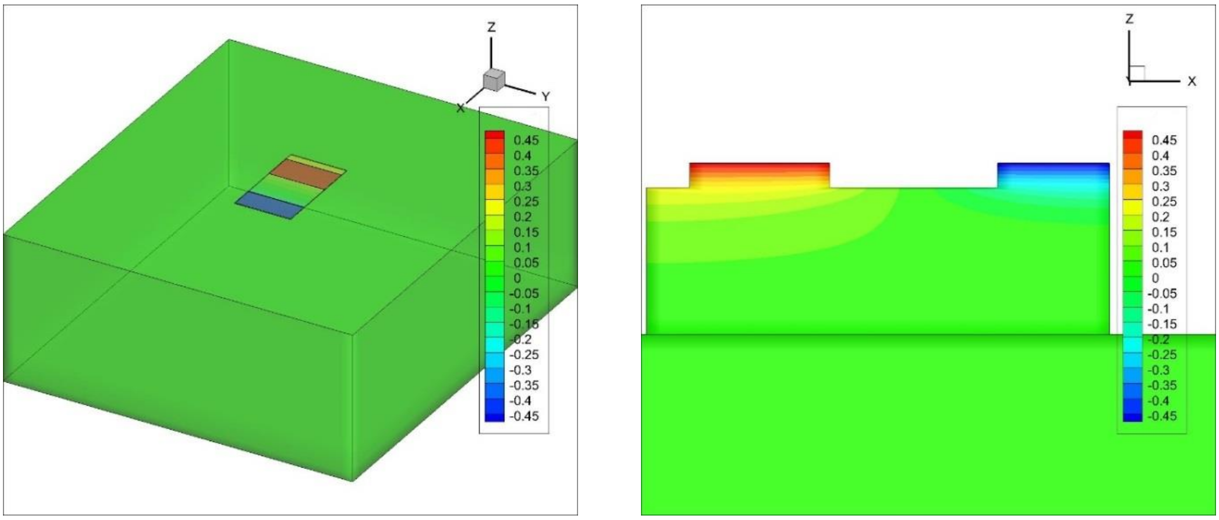

Рис 6. Стационарное распределение потенциала. На втором рисунке (срез в плоскости Oxz) масштаб по оси Oz увеличен в 50 раз

Приведенные результаты расчетов носят демонстрационный характер и подтверждают возможности комплекса NOISEtte решать новые классы задач. Предполагается проведение дальнейшей работы по методической верификации результатов и введению нелинейных связей модели с учетом экспериментальных данных.

5. Заключение

В данной работе изложен подход к численному моделированию трехмерных согласованных распределений температуры и электрического поля с учетом их нелинейного взаимодействия в сверхпроводящих высокотемпературных полупроводниковых мезоструктурах. Даны формулировки физической и математическая моделей, изложены детали адаптации аэродинамического программного комплекса к решению нового класса задач математического моделирования.

В математической постановке задачи использованы модельные нелинейные зависимости электро- и теплофизических характеристик от температуры. На следующем этапе эти нелинейности будут основаны на физически обоснованных соображениях с учетом экспериментальных данных.

В результате работы созданы основы численной модели, которая будет основным инструментом исследования физических систем, состоящих из сильно анизотропных слоистых высокотемпературных сверхпроводников, с целью поддержки сложных и тонких физических экспериментов.

Авторы выражают благодарность за помощь в адаптации аэродинамического кода NOISEtte [16] к решению нового класса задач математического моделирования всему коллективу разработчиков этого программного комплекса и в особенности П.А. Бахвалову.

Библиографический список

1. Ferguson B., Zhang X.C. Materials for terahertz science and technology// Nature Materials. 2002. 1. P. 26–33. doi:10.1038/nmat708.
2. Tonouchi M. Cutting-edge terahertz technology. // Nature Photonics 1. 2007. P. 97 - 105.
3. Krasnov V.M. Quantum Cascade Phenomenon in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Single Crystals // Phys. Rev. Lett. 2006. 97, 257003.
4. Krasnov V.M. Non-equilibrium spectroscopy of high-Tc superconductors // J. of Phys.: Conf. Ser. 2009. 150. 052129.
5. Krasnov V.M. Temperature dependence of the bulk energy gap in underdoped $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$: Evidence for the mean-field superconducting transition // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, № 21.
6. Chen S., et al. Incoherent strange metal sharply bounded by a critical doping in Bi2212 // Science 29. 2019. V.366. № 6469. P.1099–1102. DOI: 10.1126/science.aaw8850
7. Ando Y., Takeya J., Abe Y., Nakamura K., Kapitulnik A. Temperature- and magnetic-field-dependent thermal conductivity of pure and Zn-doped $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ single crystals // Phys. Rev. B. 2000. V. 62, № 1. P. 626 – 630.
8. Kleiner R., Mueller P. Intrinsic Josephson effects in high-Tc superconductors.// Phys. Rev. B. 1994, 49, 1327–1341.
9. Ozyuzer L., et al. Emission of Coherent THz Radiation from Superconductors. // Science. 2007. 318, p.1291.
10. Welp U., Kadowaki K., Kleiner R. Superconducting emitters of THz radiation. // Nature Photonics, 2013, 7, p. 702–710.
11. Rudau F., et al. Three-Dimensional Simulations of the Electrothermal and Terahertz Emission Properties of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ Intrinsic Josephson Junction Stacks.// Phys. Rev. Appl. 2016, 5, 044017.
12. Krasnov V.M., Sandberg M., Zogaj I. In situ Measurement of Self-Heating in Intrinsic Tunneling Spectroscopy. // Phys. Rev. Lett. 2005, 94, 077003.
13. Yurgens A. Temperature distribution in a large $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ mesa. // Phys. Rev. B 83.2011, 184501.
14. Wang H.B., et al. Coherent Terahertz Emission of Intrinsic Josephson Junction Stacks in the Hot Spot Regime. // Phys. Phys. Lett. 2010,105, 057002.
15. Kashiwagi T., et al. Efficient Fabrication of Intrinsic-Josephson-Junction Terahertz Oscillators with Greatly Reduced Self-Heating Effects. // Phys. Rev. Appl. 2015, 4, 054018.

16. Параллельный программный комплекс NOISEtte для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики / И.В.Абалакин, П.А.Бахвалов, А.В.Горобец [и др.] // Вычисл. методы и программирование. 2012. Т.13. № 3. С. 110–125.

17. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений // Матем. моделирование, 2014. Т. 26. №. 1. С. 55–68.

18. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для анизотропных уравнений диффузии на основе адаптации чебышевских сглаживателей // Матем. моделирование, 2014. Т. 26. №. 9. С.126-140.

19. Жуков В.Т., Краснов, М.М., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Сравнение эффективности многосеточного метода на современных вычислительных архитектурах // Программирование, 2015. № 1. С. 21-31.

20. Жуков В.Т., Краснов, М.М., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б Алгебраический многосеточный метод с адаптивными сглаживателями на основе многочленов Чебышева // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016, № 113.