

Computersimulationen von Nanobrücken mit Fehlstellen

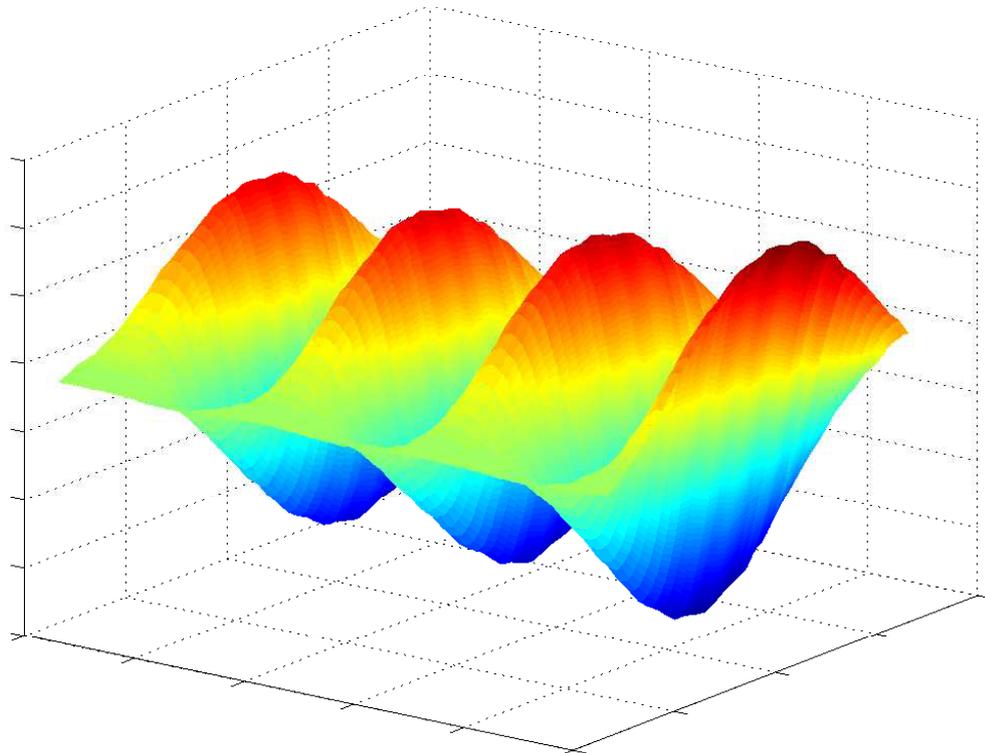
Abgabetermin: 18. September 2012

Bachelorarbeit
von Ralf Schmid

an der Universität Konstanz
im Fachbereich Physik

Erstgutachter: Herr Prof. Dr. Peter Nielaba

Zweitgutachter: Herr Prof. Dr. Wolfgang Dieterich



Danksagung

Ich möchte hier allen danken, die mir beim Schreiben dieser Arbeit geholfen haben. Da wäre zum einen Prof. Dr. Peter Nielaba und die Arbeitsgruppe im Lehrstuhl Nielaba. Besonders danke ich Kristian Scholz und Dr. Daniel Mutter, die mir bei Fragen bezüglich ihren Arbeiten jederzeit zur Seite standen. Bei Netzwerkproblemen half mir oft Dr. Stefan Gerlach, dem ich hiermit auch danken möchte. Außerdem möchte ich auch meinen Eltern für die moralische und finanzielle Unterstützung während meines Studiums danken.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	6
2	Grundlagen	7
2.1	Computersimulationen in der Molekulardynamik	7
2.1.1	Bewegungsgleichungen	7
2.1.2	Numerische Integration	7
2.1.3	Thermalisierung mit dem Andersen-Thermostat	8
2.1.4	Observablen bei Simulationen von Phänomenen der Molekulardynamik	10
2.2	Die Nickel-Titan-Legierung	10
2.2.1	Potential und Parameter	10
2.2.2	Formgedächtnislegierung	11
2.3	Elastizität und Dämpfung	12
2.3.1	Spannung und Verformung	12
2.3.2	Thermoelastische Dämpfung	13
2.3.3	Einfluss der Fehlstellen	14
3	Durchführung der Simulationen	15
3.1	Verwendete Einheiten	15
3.2	Vorbereitende Schritte	15
3.3	Schwingung	16
3.4	Kette von Schwerpunkten	16
4	Auswertung	18
4.1	Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten	18
4.1.1	Bewegungen der Schwerpunkte der einzelnen Nanobrücken	18
4.1.2	Vergleich der Frequenzen	39
4.1.3	Vergleich der Dämpfungen	43
4.2	Genaueres Schwingungsverhalten	48
4.3	Temperaturverteilung im Nanoresonator	55
4.3.1	Temperaturverteilung bei Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung	55
4.3.2	Temperaturverteilung bei Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung	58
4.4	Phasenübergang bei 250 Kelvin	62
5	Zusammenfassung	68

1 Einleitung

Ein wichtiges Bauteil in der Nanotechnologie ist der Nanoresonator, dessen Schwingungseigenschaften von seinem Material, seiner Größe und von der Form abhängen, in der er fabriziert wurde. Da die Geometrie und das Material eines Bauteils im Zusammenspiel mit umgebenden Komponenten einer Einheit jedoch nicht immer beliebig variierbar ist, kommt die Frage auf, wie man sonst noch Einfluss auf die Schwingungseigenschaften des Bauteils ausüben kann.

Diese Arbeit beinhaltet die Untersuchung von Nanoresonatoren aus Nickel-Titan in Brückengeometrie mittels Molekulardynamik Simulationen, wobei beide Enden der Brücken stets fest eingeklemmt bleiben. Es werden Fehlstellen in Form von Bohrungen in der Nanobrücke verteilt, deren Einfluss auf die Schwingungseigenschaften des Nanoresonators untersucht wird.

Nach einem Simulationsteil zur Thermalisierung der Nanobrücke sorgt ein homogenes Kraftfeld für eine Auslenkung, wodurch nach Abschalten des Kraftfeldes die Schwingung der Nanobrücke in Gang gesetzt wird.

In Kapitel 2.1 werden zunächst einige Methoden der Molekulardynamik Simulationen angesprochen. Wichtige Eigenschaften der Nickel-Titan-Legierung sowie das verwendete Potential zur Modellierung der zwischenatomaren Kräfte werden in Kapitel 2.2 beschrieben. Die Erklärung der Dämpfung auf Grund thermischer Effekte, sowie erste Voraussagen über den Einfluss der Bohrungen auf die Dämpfung der Schwingungen der Nanobrücke sind in Kapitel 2.3 zu finden.

Weiteres zum Ablauf und zur Analyse der Simulationen kann Kapitel 3 entnommen werden. Größen wie Frequenzen, Schwerpunktbewegungen und Temperaturen werden auch ortsabhängig untersucht. Die Methode, mit der die Ortsauflösung erstellt wird, wird in Kapitel 3.4 erklärt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit sind in Kapitel 4 zu finden. Es werden zunächst die Bewegungen des Schwerpunkts der Nanobrücken mit verschiedenen Anordnungen der Bohrungen dargestellt (Kapitel 4.1.1). Die sich aus den Schwerpunktbewegungen ergebenden Frequenzen und Dämpfungen werden in Kapitel 4.1.2 und 4.1.3 verglichen. Hier soll der Einfluss der Bohrungen sichtbar gemacht werden.

Um das Schwingungsverhalten der Nanobrücken genauer zu untersuchen, wurde eine Methode erarbeitet, mit der Schwingungsmoden höherer Ordnung sichtbar gemacht werden können (Kapitel 4.2).

Mit einer ähnlichen Methode wird in Kapitel 4.3 die Temperaturverteilung in der Nanobrücke, die in Kapitel 2.3 vorausgesagt wird, sichtbar gemacht, wobei die Bohrungen eine wichtige Rolle spielen.

Da sich bei einer bestimmten Brückenkonfiguration ein besonderer Effekt der Dämpfung bemerkbar machte, wird diese Brücke auf eventuelle Änderungen in der Gitterstruktur des Atomgitters untersucht, wodurch sehr starke Dämpfungen entstehen können (Kapitel 4.4).

In Kapitel 5 werden die wichtigsten Ergebnisse und Abhängigkeiten, die sich in dieser Arbeit ergaben, zusammengefasst.

2 Grundlagen

2.1 Computersimulationen in der Molekulardynamik

Computersimulationen sind ein wichtiges Hilfsmittel der modernen Physik und helfen dabei, theoretische Modelle zu überprüfen. Sie sind in der Molekulardynamik von besonderer Bedeutung, da hier meist eine gewaltige Anzahl von Teilchen vorliegt, was eine Berechnung von Hand unmöglich macht. Die in dieser Arbeit verwendeten Methoden, die dieses Problem lösen werden im Folgenden erklärt. Der interessierte Leser findet den Inhalt dieses Kapitels und weitere Informationen zum Thema in [1].

2.1.1 Bewegungsgleichungen

Die grundlegende Idee besteht darin, die *newtonschen Bewegungsgleichungen*

$$\begin{aligned}\dot{\vec{p}}_i &= \vec{F}_i & i = 1, \dots, N \\ m_i \dot{\vec{r}}_i &= \vec{p}_i\end{aligned}\tag{1}$$

für jedes der N Teilchen zu lösen. Hierbei ist \vec{p}_i der Impuls, m_i die Masse des i -ten Teilchens und \vec{F}_i die auf das i -te Teilchen wirkende Kraft, die man bei gegebenem Potential U_i aus

$$\vec{F}_i = -\nabla U \quad i = 1, \dots, N\tag{3}$$

erhält. Genaueres über das bei der Durchführung verwendete Potential wird im Kapitel über die Nickel-Titan Legierung dargestellt.

Gleichung (2) stellt ein System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen dar. Aus der Analysis ist bekannt, dass solche Gleichungen bei gegebenen Anfangsbedingungen eindeutig lösbar sind. Man nennt eine Herangehensweise, bei der die gesamte zeitliche Entwicklung des Systems durch die Anfangsbedingungen vorgegeben ist, *deterministisch*. Trotzdem wird an dieser Stelle bereits darauf hingewiesen, dass während der Simulation auch Verfahren verwendet werden, die auf dem Zufallsprinzip beruhen und daher vom Determinismus wegführen (siehe Andersen-Thermostat).

2.1.2 Numerische Integration

Um die Bewegungsgleichungen zu lösen wurde der *Velocity-Verlet-Algorithmus*, ein numerisches Verfahren mit physikalisch relevanten Eigenschaften, verwendet. Um Funktionsweise dieses Algorithmus besser zu verdeutlichen wird hier zunächst der *Verlet-Algorithmus* hergeleitet. Dazu betrachtet man eine Teilchenkoordinate $r(t)$ zum Zeitpunkt t . Die Taylor-Entwicklungen für die Zeitpunkte $t - \Delta t$ und $t + \Delta t$ lauten dann:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 + \frac{\Delta t^3}{3!}\ddot{r} + O(\Delta t^4)\tag{4}$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 - \frac{\Delta t^3}{3!}\ddot{r} + O(\Delta t^4)\tag{5}$$

Hier ist $v = \dot{r}$ die entsprechende Komponente der Geschwindigkeit und f die der wirkenden Kraft. Der Punkt über den Funktionen steht in dieser Arbeit für die Ableitung nach der Zeit.

Das Betrachten des Ortes aus der Vergangenheit wird dafür sorgen, dass der Algorithmus bei Zeitumkehr identische Trajektorien liefert. Addiert man die beiden Gleichungen (4) und (5) und subtrahiert dann $r(t - \Delta t)$, so erhält man für den *Verlet-Algorithmus*:

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{f(t)}{m} \Delta t^2 \quad (6)$$

Dieses Verfahren liefert einen Näherungswert für die Teilchenkoordinate $r(t + \Delta t)$ nach einem Zeitschritt Δt mit einem Fehler der Ordnung Δt^4 . Dabei wurden keine Geschwindigkeiten verwendet, um die neuen Positionen der Teilchen zu berechnen. Hier erhält man die Geschwindigkeiten indem man Gleichungen (4) und (5) voneinander subtrahiert

$$r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) = 2v(t)\Delta t + O(\Delta t^3)$$

und umstellt:

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (7)$$

Führt man schließlich mit allen Koordinaten aller Teilchen viele Zeitschritte Δt nacheinander aus, so ergeben sich die Trajektorien der Teilchen bis auf den oben genannten Fehler, der mit kleineren Zeitschritten beliebig klein gemacht werden kann, wobei der Rechenaufwand steigt.

Der in der Simulation verwendete *Velocity-Verlet-Algorithmus* liefert als Schätzung für den Ort r nach dem Zeitschritt Δt :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m} \Delta t^2 \quad (8)$$

und für die Geschwindigkeit v :

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{f(t + \Delta t) + f(t)}{2m} \Delta t \quad (9)$$

Hier muss auf die Reihenfolge der einzelnen Rechenschritte geachtet werden:

1. Berechnen der Positionen nach (8) (beim ersten Zeitschritt werden die Daten nur eingelesen)
2. Berechnen der Kräfte f nach (3)
3. Berechnen der Geschwindigkeiten v nach (9)
4. zurück zu 1. (solange das Ende des gewünschten Zeitintervalls nicht erreicht ist)

Man kann zeigen, dass der *Velocity-Verlet-Algorithmus* und der *Verlet-Algorithmus* identische Trajektorien liefern. Den Beweis hierzu findet man in [1] unter 4.3.1 *Other Algorithms*.

Eine für diese Arbeit wichtige Eigenschaft der *Verlet-Verfahren* ist der geringe Fehler in der Erhaltung der Energie. Es treten nur kleine Fluktuationen um einen zeitlich festen Wert der Gesamtenergie auf.

2.1.3 Thermalisierung mit dem Andersen-Thermostat

Da die Temperatur bei vielen Simulationen eine entscheidende Größe darstellt, ist es nötig, die Teilchen auf eine bestimmbar Temperatur zu bringen.

Eine der Möglichkeiten einen Körper zu erwärmen ist, ihn in Kontakt mit einem Wärmebad zu bringen. Zufällig verteilte Stöße der Teilchen auf den Kontaktflächen sorgen für den Energiefluss vom wärmeren zum kälteren Medium. Der *Andersen-Thermostat* simuliert solche stochastisch verteilte Stöße für alle Teilchen des Körpers, der erwärmt werden soll, indem die Geschwindigkeiten der Teilchen reskaliert werden, und der Körper so auf die gewünschte Temperatur gebracht wird.

Den Einfluss der Kopplung an das Wärmebad kann man mit der durchschnittlichen Frequenz ν der zufälligen Stöße zwischen Teilchen aus dem betrachteten Körper und dem Wärmebad ausdrücken. Da die Stöße unabhängig voneinander sind, bilden die Zeitintervalle zwischen zwei erfolgreichen Stößen eine Poisson-Verteilung:

$$P(t, \nu) = \nu \cdot \exp(-\nu t) \quad (10)$$

Der Wert $P(t, \nu)$ gibt an, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist, dass der nächste Zusammenstoß im Intervall $[t, t + dt]$ stattfindet. Der Ablauf eines Zeitschritts Δt der Simulation ist mit angeschlossenem Thermostaten in drei Abschnitte unterteilt:

- Die Konfiguration des Systems mit N Teilchen zum Zeitpunkt t sei $(r^N(t), p^N(t))$. Diese wird mit dem Velocity-Verlet-Algorithmus durch Integration der Bewegungsgleichungen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ verschoben und die neue Konfiguration ist dann $(r^N(t + \Delta t), p^N(t + \Delta t))$.
- Teilchen, die eine Kollision mit Teilchen aus dem Wärmebad erfahren werden ausgewählt. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit für den Zusammenstoß für jedes Teilchen $\nu \Delta t$.
- Die Geschwindigkeiten der für den Kontakt mit dem Wärmebad ausgewählten Teilchen werden durch Werte aus der Maxwell-Boltzmann Geschwindigkeits-Verteilung der gewünschten Temperatur ersetzt. Die Wahrscheinlichkeit $W(p)$, dass eines der ausgewählten Teilchen den Impuls $p = m \cdot v$ hat, ist also:

$$W(p) = \left(\frac{1}{2\pi m k_B T} \right)^{3/2} \exp[-p^2 / (2m k_B T)] \quad (11)$$

Hier ist $k_B = 1.38066 \cdot 10^{-23}$ J/K der Boltzmann-Faktor und T die Temperatur in Kelvin. Die Richtungen, in die die neuen Impulsvektoren definiert werden, sind dabei homogen verteilt. Der Zusammenhang zwischen den Teilchengeschwindigkeiten und der Temperatur wird im nächsten Abschnitt erklärt.

Damit eine lineare Erhöhung der Temperatur während einer bestimmten Simulationsdauer möglich ist, wird in jedem (i -ten) Zeitschritt eine nach diesem Zeitschritt erwünschte Temperatur $T' = \frac{i}{N} T$ definiert, wobei T die am Ende der Erwärmung erwartete Temperatur ist und N die Anzahl der Zeitschritte, die das Programm durchlaufen soll.

Durch den Einfluss des Andersen-Thermostats folgt das System nicht mehr den Gesetzen der Newtonschen Dynamik. Deshalb wurde es nur verwendet, um eine Anfangstemperatur herzustellen und erst dann mit ausgeschaltetem Thermostat die eigentliche Simulation des Schwingungsverhaltens der Nanobrücke begonnen.

2.1.4 Observablen bei Simulationen von Phänomenen der Molekulardynamik

Auch ohne ein Thermostat können sich thermodynamische Größen während der Simulation verändern (speziell lokal!). Da im Rechenalgorithmus Größen wie Temperatur, Druck oder Gesamtenergie nicht berechnet werden, sondern nur mit Teilchenorten, Geschwindigkeiten und dem Potential gearbeitet wird, sind zur Berechnung *relevanter* Ergebnisse weitere Rechenschritte notwendig, die jedoch am Verlauf der Trajektorie des Systems durch den Phasenraum nichts ändern. Die Formeln zur Berechnung der während dem Ablauf des Programms berechneten Größen stellen den Bezug zu den in der Realität messbaren Größen dar, und sind somit das Verbindungsstück zwischen Simulation und Experiment.

Berechnet man die *kinetische Energie* E_{kin} des Systems aus N Teilchen mit

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2, \quad (12)$$

so ergibt sich die Temperatur T aus dem zeitlichen Mittelwert der Energie pro Freiheitsgrade mit

$$T = \frac{\langle 2E_{kin} \rangle}{k_B n} \quad (13)$$

wobei n hier für die Anzahl der Freiheitsgrade steht. Die Anzahl der Freiheitsgrade wird im Programm selbst berechnet, da während der Simulation einige Teilchen festgehalten werden und nicht frei beweglich sind.

Die gesamte *potentielle Energie* des Systems wird bereits während der Kraftberechnung durch einfaches Summieren der potentiellen Energien aller Teilchen berechnet.

Um das Schwingungsverhalten der Nanobrücke beobachten zu können, wird der Koordinatenschwerpunkt berechnet. Dabei werden die Koordinaten aller Teilchen zusammengezählt und durch die Anzahl N aller Teilchen im System geteilt. Aus dem zeitlichen Verhalten des Schwerpunkts werden später wichtige Größen wie Frequenz und Dämpfungskoeffizient der Nanobrücke sichtbar und mittels eines Fits abgeschätzt.

2.2 Die Nickel-Titan-Legierung

Die Nickel-Titan-Legierung hat besondere Eigenschaften, die sich auf das Schwingungsverhalten eines Resonators auswirken. Sie ist die in der Technik am häufigsten verwendete Formgedächtnis-Legierung und ist auf Grund der damit verbundenen Elastizitätseigenschaften von besonderem Interesse in Nanomechanischen Systemen.

2.2.1 Potential und Parameter

Zunächst soll das in der Simulation verwendete Potential angegeben werden. Die von Martin Vögele [8] geschriebene Implementierung der Kraftberechnung für Nickel-Titan verwendet ein TBSM-Potential (“Tight-Binding-Second-Moment“-Potential).

$$U(r_{ij}) = \sum_i \left\{ \sum_{i \neq j} A_{\alpha\beta} \exp \left[-p_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{d_{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] - \sqrt{\sum_{i \neq j} \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[-2q_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{d_{\alpha\beta}} - 1 \right) \right]} \right\} \quad (14)$$

Hier ist $d_{\alpha\beta}$ der Abstand zwischen den nächsten Nachbarn im Kristallgitter und r_{ij} der Abstand zwischen Teilchen i und j . Das Potential besteht aus einem attraktiven und einem repulsiven

Anteil, wobei der repulsive Anteil (linker Summand) mit der ‘‘Born-Mayer Ion-Ion Abstoßung’’ begründet wird, die die Erhöhung der kinetischen Energie der Leitungselektronen annimmt, wenn sie sich zwischen zwei sich annähernden Ionen befinden. [4]

Die Wurzel über dem attraktiven Anteil (rechter Term) muss wegen der Einheit des zweiten Moments der Zustandsdichte $D_{i\alpha}(\epsilon)$

$$\mu_2^{i\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 D_{i\alpha}(\epsilon) d\epsilon, \quad (15)$$

also Energie im Quadrat, gesetzt werden. Der Index i steht für das i -te Atom und über α werden die Orbitale durchnummeriert. Die Wahl der Exponentialfunktionen wurde z.B. in [6] diskutiert. Als Rechtfertigung für diese Wahl wird das mit dem Abstand exponentielle Verschwinden der Atomorbitale angegeben. Die noch offenen Parameter sind in Tabelle 1 zu finden. [3]

Parameter	Nickel-Nickel	Titan-Titan	Nickel-Titan
$A_{\alpha\beta}$ [eV/Atom]	0.104	0.153	0.3
$\xi_{\alpha\beta}$ [eV/Atom]	1.591	1.879	2.48
$p_{\alpha\beta}$	11.198	9.253	7.9
$q_{\alpha\beta}$	2.413	2.513	3.002
$d_{\alpha\beta}$ [Å]	2.49	2.95	2.607

Tabelle 1: Im Potential verwendete Parameter aus [3]

2.2.2 Formgedächtnislegierung

Durch das angegebene Potential ergibt sich für die Nickel-Titan-Legierung ein Phasenübergang in der Gitterkonfiguration, der in Simulationen beobachtet werden kann. [7]

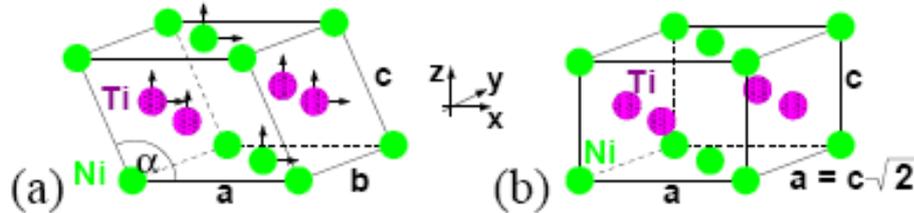


Abbildung 1: Einheitszellen der Nickel-Titan-Legierung bei einem Mischungsverhältnis 1:1. a) Tieftemperaturphase (Martensit) b) Hochtemperaturphase (Austenit), aus [7]

Die Einheitszellen der Resonatoren liegen zu den Koordinatenachsen in dieser Arbeit wie in Abbildung 1 gezeigt. Der Übergang zwischen den Phasen kann durch Temperaturänderungen oder durch äußere Kräfte induziert werden. Beide Effekte werden in den Simulationen auftreten, wobei versucht wird, den jeweiligen Effekt zu bestimmen. Die Werte, die für die Parameter a , b und c in Abbildung 1 verwendet wurden sind in Tabelle 2 zu finden.

Struktur	a	b	c	α
Martensit	4.45	4.03	3.00	97.7°
Austenit	4.26	3.01	3.01	90°

Tabelle 2: Gitterkonstanten für die Einheitszellen von Nickel-Titan in Angström [7]

Verformt man z.B. einen aus Austenit-Kristallen aufgebauten Körper (plastisch), so nimmt

dieser nach einer Temperaturerhöhung und anschließender Abkühlung seine ursprüngliche Gestalt wieder an. Dieser Effekt wird als *Formgedächtniseffekt bezeichnet*. Voraussetzung für diesen Vorgang und weitere Informationen zum Thema Formgedächtniseffekt und Phasenübergang sind in [9] und [7] zu finden.

2.3 Elastizität und Dämpfung

Geht man im einfachsten Fall von einer harmonischen Schwingung aus, so kann man auf Grund der Gleichung des freien gedämpften harmonischen Oszillators mit Auslenkung x , Frequenz ω_0 und Dämpfungskoeffizient γ

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (16)$$

im Schwingfall, d.h. mit $4\omega_0^2 > \gamma^2$, mit einer zeitlich exponentiell abfallenden Schwingungsamplitude rechnen. Die Lösungen der Differentialgleichung haben für $4\omega_0^2 \gg \gamma^2$ die Form:

$$x(t) = A \cdot \exp(i\omega_0 t + i\phi - \gamma t) \quad (17)$$

Hier wurde angenommen, dass die Dämpfung nur von der Geschwindigkeit \dot{x} abhängt, wie es zum Beispiel bei der Reibung der Luft an einem Pendel der Fall wäre. Die umgebende Luft wird in dieser Arbeit jedoch nicht in Betracht gezogen, d.h. die Brücken befinden sich im Vakuum. Es sind jedoch andere Effekte bekannt, die das Abklingen der Schwingung eines Nanoresonators auch im Vakuum erklären können.

2.3.1 Spannung und Verformung

Zunächst muss geklärt werden, wie die Auslenkung und die dadurch verursachten Spannungen im Festkörper beschrieben werden können. Man betrachte einen Nanoresonator im relaxierten Zustand. Bis auf durch Temperatur bedingtes Zittern der Teilchen finden keine Änderungen der Konfiguration des Nanoresonators statt.

Die relative Auslenkung aus der Ruhelage eines Volumenelements, das sich vor dem Auslenken an der Stelle ($\vec{r}=(x,y,z)$) befand, sei durch den Vektor $\vec{u}(\vec{r})$ gegeben. Insgesamt ergibt sich bei der Verformung des Festkörpers ein Verformungsfeld, das im Allgemeinen eine Funktion von den Koordinaten und der Zeit ist, also $\vec{u} = \vec{u}(\vec{r}, t)$.

Die Ableitung von \vec{u} nach allen Raumkoordinaten ergibt den Tensor D :

$$D = \nabla(\vec{u}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} & \frac{\partial u_1}{\partial z} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} & \frac{\partial u_2}{\partial z} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x} & \frac{\partial u_3}{\partial y} & \frac{\partial u_3}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (18)$$

Dieser lässt sich mit

$$S = \frac{1}{2}(\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T)$$

$$\Omega = \frac{1}{2}(\nabla\vec{u} - (\nabla\vec{u})^T)$$

eindeutig in einen symmetrischen Tensor S und einen Antisymmetrischen Tensor Ω aufteilen, sodass $D = S + \Omega$ gilt. S ist der sogenannte Dehnungstensor und Ω der Rotationstensor. Sie

beschreiben in erster Näherung (nach Taylor) die reinen Dehnungen und Rotationen, aus denen sich die Verformung des Körpers zusammensetzt. Bei zu großen Verformungen verliert diese Definition an Gültigkeit, da sie auf einer Taylorentwicklung bis zum linearen Term beruht.

Um einen Ausdruck für die Spannung zu finden, die bei einer solchen (elastischen) Verformung vorliegt, betrachte man ein würfelförmiges Volumelement aus dem Festkörper. Die Kräfte \vec{F}_j , die auf die Seitenflächen A_j des Würfels wirken, müssen im Allgemeinen nicht Senkrecht zu den Flächen stehen. Die auf eine Seitenfläche wirkende Kraft kann also in 3 zueinander senkrecht stehende Komponenten \vec{F}_{ij} aufgeteilt werden, von denen eine senkrecht zur Fläche steht und zwei in der Fläche liegen. So kommt man mit allen Seiten des Würfels auf insgesamt 18 Kräfte.

Da das betrachtete Volumen klein sein soll, kann man annehmen, dass die Kräfte innerhalb des Volumelements konstant bleiben, also auch die Kräfte auf gegenüberliegenden Seiten des Würfels im Betrag gleich sind. Man muss deshalb zur vollständigen Beschreibung der wirkenden Kräfte nur drei Seitenflächen des Würfels betrachten, wobei die auf eine Seitenfläche wirkende Kraft wieder in ihre drei senkrechten Komponenten aufgeteilt wird. Somit bleiben 9 Kraftkomponenten F_{ij} , mit denen die wirkenden Kräfte vollständig beschrieben werden können.

Den Spannungstensor σ_{ij} erhält man dann, indem man durch die jeweiligen Seitenflächen A_j teilt:

$$\sigma_{ij} = \frac{F_{ij}}{A_j} \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (19)$$

Dieser ist im allgemeinen ebenfalls von der Zeit und dem Ort im betrachteten Objekt abhängig, das sich aus vielen der oben genannten Volumelementen zusammensetzt. Der Druck p , der als senkrecht zur Fläche wirkende Kraft definiert ist, lässt sich mit dem Spannungstensor im Falle einer rein hydrostatischen Kompression (d.h. keine Rotationen) als

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (20)$$

schreiben. Um auch Scherungen betrachten zu können, ist für Betrachtungen im Festkörper der Spannungstensor eine geeignetere Schreibweise der wirkenden Kräfte. Mit den hier vorgestellten Tensoren ist es nun möglich, einen Bezug zu thermischen Effekten durch Verformungen zu finden. [2]

2.3.2 Thermoelastische Dämpfung

Den direkten Zusammenhang zwischen Ausdehnung und Temperatur eines Körpers liefert der lineare thermische Ausdehnungskoeffizient

$$\alpha = \frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial T}, \quad (21)$$

wobei hier L die Länge des Körpers ist. Ist die Temperatur zu Beginn einer Betrachtung im relaxierten Resonator durch T_0 gegeben, so kann man mit dem linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α , der thermischen Leitfähigkeit χ , dem Youngschen Modul E , der Poissonzahl σ und der Wärmekapazität bei konstantem Volumen C_V eine Gleichung für die Kopplung der Temperaturverteilung $T = T_0 + \theta$ im Resonator an die bei der Schwingung auftretenden Verfor-

mungen u_{jj} aufstellen:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \chi \nabla^2 \theta - \frac{E\alpha T}{(1-2\sigma)C_V} \frac{\partial}{\partial t} \sum_j u_{jj} \quad (22)$$

Man erkennt, dass es sich um eine Diffusionsgleichung für die Temperatur handelt, die um einen Kopplungsterm erweitert wurde. Mit dieser Gleichung und weiteren vereinfachenden Annahmen gelang es Ron Lifshitz und M. L. Roukes in [11] mit exakten Lösungsmethoden den Qualitätsfaktor Q zu berechnen, der als Maß für den Anteil der Energie, die pro Schwingung in Wärme umgewandelt wird, gilt.

Auf Grund dieser Kopplung ist während der Simulation ein Temperaturfeld $T_0 + \theta(x, y, z, t)$ zu erwarten. Da die Temperatur nach diesem Model diffundieren kann, geht auf diesem Weg Energie der Schwingung des Resonators verloren und er wird gedämpft. Diesen Effekt bezeichnet man als thermoelastische Dämpfung.

Die Frequenz des Resonators hat einen entscheidenden Einfluss auf das Ausmaß, in dem die thermoelastische Dämpfung ins Gewicht fällt. Ist die Frequenz zu hoch, so bleibt keine Zeit für die Temperatur zu diffundieren. Bei zu geringen Frequenzen entstehen die Temperaturunterschiede langsamer als sich die Temperatur verteilt, weswegen die Temperatur in diesem Fall räumlich konstant bleibt.

Für den Anteil, zu dem die thermoelastische Dämpfung zur gesamten Dämpfung des Resonators beiträgt, ist also ein bestimmtes Verhältnis zwischen der Frequenz des Resonators und der Wärmeleitfähigkeit χ des Materials, aus dem der Resonator aufgebaut ist, entscheidend. [11]

2.3.3 Einfluss der Fehlstellen

Betrachtet wird ein Gebiet im Resonator, in dem beim Schwingvorgang Verbiegungen auftreten. Hier baut sich durch die Verbiegungen ein Verformungsfeld u_j mit entsprechendem Verformungstensor u_{ij} auf.

Es fehle nun an einer Stelle in dem Gebiet eine kleine Kugel von mehreren Atomen (Kugel zur Vereinfachung). Da das gesamte betrachtete Gebiet in jedem Querschnitt, der auch die Kugel schneidet, weniger Teilchen enthält, wird es auf externe Kräfte mit größeren Verformungen reagieren. Mit anderen Worten hat sich die Festigkeit des betrachteten Gebiets durch das Fehlen der Kugel von Teilchen reduziert.

Bezieht man nun wieder Gleichung 22 mit ein, so ergeben sich durch die größeren Verformungen auch größere Temperaturunterschiede. Dieser Effekt wird im Laufe dieser Arbeit sichtbar gemacht.

3 Durchführung der Simulationen

Dieses Kapitel beinhaltet Einzelheiten über das Programm *seevn*, die einzelnen Schritte der Simulation sowie Vorgehensweisen beim Auswerten der Daten.

3.1 Verwendete Einheiten

Um zu verhindern, dass zwischen den verwendeten Größen mehrere Größenordnungen liegen, werden in Simulationen von molekulardynamischen Phänomenen Einheiten verwendet, die besser zum Maßstab der Teilchen passen. Dadurch werden letztendlich Rundungsfehler minimiert. Die verwendeten Einheiten sind in Tabelle 3 zu finden.

Größe	Einheit
Längen	10^{-10} m=1 Å
Massen	$1.66 \cdot 10^{-27}$ Kg=1u
Energien	$1.602 \cdot 10^{-19}$ J= 1eV
Geschwindigkeiten	$9.823 \cdot 10^3$ m/s
Kräfte	$1.602 \cdot 10^{-9}$ N
Temperaturen	$1.160 \cdot 10^4$ K
Zeiten	$1.018 \cdot 10^{-14}$ s

Tabelle 3: Verwendete Einheiten in den Simulationen

In der Arbeit von Martin Vögele [8] wurde ermittelt, dass der Zeitschritt $\Delta t = 0.1$ (reduzierte Einheit) gerade klein genug ist, um die benötigte Rechengenauigkeit zu erreichen. Daher wird auch in dieser Arbeit mit diesem Zeitschritt gerechnet. Einem Zeitschritt in der Simulation entsprechen also $1.108 \cdot 10^{-15}$ Sekunden.

3.2 Vorbereitende Schritte

Bevor die eigentlichen Simulationen der Schwingungseigenschaften beginnen konnten, mussten die Brücken vorbereitet werden. Die Erstellung der Gitterstruktur wurde mit einem abgewandelten Programm von Daniel Mutter [7] durchgeführt. Dabei konnte zwar auch das Mischungsverhältnis eingestellt werden, jedoch wurden alle Brücken mit einem Verhältnis 1:1 von Nickel und Titan erstellt. So wurden zunächst nur 4 verschiedene Brücken erstellt, von denen je zwei aus einer der oben beschriebenen Phasen (Martensit und Austenit) waren.

Die Maße der Brücken mussten erhöht werden, um Spielraum für das Anbringen der Bohrungen zu erhalten. Sie bestehen nun anders als bei Martin Vögele [8] aus 40-8-8 und 8-40-8 Einheitszellen in x-y-z-Richtung.

Anschließend erfolgte das Anbringen der Fehlstellen. Dabei wurde entschieden, die Fehlstellen in Form einer zylinderförmigen Bohrung anzubringen, wobei die Achse des Zylinders senkrecht zur späteren Schwingungsrichtung und senkrecht zur längsten Achse des Resonators gewählt wurde. Der Mittelpunkt des Zylinders fällt, falls nicht anders erwähnt, mit dem Mittelpunkt der Brücke zusammen. Das Anbringen der Bohrungen wurde in das von Kristian Scholz [10] geschriebene Programm *seevn* implementiert. Der Radius der Bohrungen wurde zwischen 4, 6 und 8 *Angström* variiert.

Der nächste Simulationsschritt wird nur mit den Martensit-Brücken durchgeführt. Es werden 30000 Zeitschritte mit angeschaltetem Andersen-Thermostat durchlaufen mit einer Zieltemperatur von 0 Kelvin. Das soll verhindern, dass sich anfängliche Spannungen in der Brücke auf

den späteren Verlauf der Schwingungen auswirken. Bei den Austenit-Brücken wurde auf diesen Schritt verzichtet, da diese beim Abkühlen sonst einen Phasenübergang vollziehen würden.

Alle Brücken wurden anschließend innerhalb von 50000 Zeitschritten erhitzt. Da sich viele Brücken auf Grund der Bohrungen beim Erhitzen verformten und die Berechnungen einheitlich sein sollten, wurden die Enden aller Brücken von Beginn der Simulation an fest fixiert.

Nach dem Erhitzen durchliefen die Brücken nochmals 50000 Zeitschritte ohne Andersen-Thermostat, um sicherzustellen, dass sich die Wärme gleichmäßig verteilt und das ganze System wieder in einen Zustand kommt, der durch deterministische Zeitschritte nach den Newtonschen Bewegungsgleichungen zu Stande kam.

Beim folgenden Simulationsteil wurden die Brücken durch Anlegen eines homogenen Kraftfeldes in z -Richtung ausgelenkt. Bei der Wahl der Stärke des Feldes wurde auf die Arbeit von Martin Vögele zurückgegriffen, der ermittelte, dass eine Kraft von $0,0005 \cdot 1.602 \cdot 10^{-9}$ N pro Atom für die richtige Auslenkung sorgt. Damit dieser Simulationsteil bei allen Brücken genau beim Maximum der Auslenkung durch die Kraft endete, musste zuerst in einem zuvor durchgeführten Anlauf für jede Konfiguration, d.h. für jede Brücke und jede Temperatur, ermittelt werden, nach wie vielen Zeitschritten das erste Maximum der induzierten Auslenkung erreicht war. Dann wurde mit der eigentlichen Auslenkung mit genau so vielen Zeitschritten begonnen. Die resultierende Dateien (mit Koordinaten und Geschwindigkeiten aller Teilchen im System) der ausgelenkten Brücken sind nach dieser Prozedur bereit für die eigentliche Schwingung.

Um das Verhalten der Brücken bei mehreren Bohrungen, die eventuell auch besondere Symmetrien aufweisen, untersuchen zu können, wurde das Programm *seevn* nochmals erweitert, sodass man nun nach Bedarf bis zu 10 Bohrungen mit unterschiedlichen Radien beliebig in der Brücke verteilen konnte. Mit den so entstandenen Brücken wurde gleich verfahren wie in den vorigen Simulationsreihen.

3.3 Schwingung

Alle Simulationen des Schwingungsverhaltens wurden mit 10^6 Zeitschritten durchgeführt. Dabei wurde zur eventuellen Wiederholung einzelner Zeitintervalle alle 50000 Zeitschritte eine Datei mit einem Zwischenstand der Teilchenkoordinaten und Geschwindigkeiten angelegt, von der aus die Simulation bei Bedarf wiederholt werden konnte.

Als Observablen wurden Temperatur, kinetische Energie, potentielle Energie, Gesamtenergie, Druck und vor allem die Bewegung des Koordinatenschwerpunkts aufgezeichnet. Da es sich um eine Simulation eines nano-mechanischen Systems handelt, muss hier gesagt werden, dass nicht quantenmechanisch gerechnet wird, weil keine der Messungen eine Auswirkung auf das System hat.

Die Bewegung des Koordinatenschwerpunktes sagt jedoch nicht alles über das Schwingungsverhalten aus. Der Schwerpunkt des Resonators schwingt zum Beispiel bei der zweiten Eigenschwingung mit zwei Wellenbäuchen nicht mit. Es musste eine Methode gefunden werden, mit der die gesamte Bewegung des Resonators untersucht werden konnte, ohne jedoch die Koordinaten jedes einzelnen Teilchens auswerten zu müssen.

3.4 Kette von Schwerpunkten

Zur Untersuchung des Schwingungsverhaltens wird das Programm *seevn* ein weiteres mal erweitert. Der Resonator wird vor dem Auslenken senkrecht zu seiner langen Achse in gleich dicke

Scheiben geschnitten. Dafür wird die Datei des nicht ausgelenkten Resonators bei der Schwingung zusätzlich mit eingelesen. Die Unterteilung in die einzelnen Scheiben geschieht derart, dass der Index eines Teilchens, das zum Beispiel in die i -te Scheibe gehört, an das Ende der i -te Zeile einer Matrix mit Dimensionen $n \times m$ angefügt wird. Dabei ist n die Anzahl der Scheiben und m die maximale Anzahl von Teilchen, die in der Scheibe landen. Diese Einteilung erweist sich im Festkörper als zweckmäßig, da keine Durchmischungen der Teilchen auftreten.

Von jeder der Scheiben wurde der Koordinatenschwerpunkt berechnet und nach jedem fünften Zeitschritt für die spätere Untersuchung abgespeichert. Der so entstandene zeitliche Verlauf der Bewegung des gesamten Resonators kann nun mittels Fourier-Transformationen untersucht werden.

Die gleiche Methode der Aufteilung wird auch verwendet, um die Temperaturverteilung im Resonator zu berechnen.

4 Auswertung

4.1 Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird die Bewegung des Koordinatenschwerpunkts ausgewertet. Zunächst werden die zeitlichen Verläufe in z-Richtung der einzelnen Schwingungen präsentiert und kommentiert. Dabei ist der zeitliche Verlauf der Schwerpunktbewegung stets in blau dargestellt. Die Parameter A und γ der Exponentialfunktion

$$\Gamma(t) = A \cdot \exp(-\gamma t) \quad (23)$$

wurden mit linearem Ausgleich über die Beträge der Extremwerte der Schwingung berechnet. Die so erhaltene Ausgleichskurve wird im Folgenden in grün dargestellt. Der Parameter γ ist der gesuchte Dämpfungskoeffizient. Die rot markierten Punkte sind die für den linearen Ausgleich verwendeten Stützstellen. Diese wurden, falls nicht anders erwähnt, automatisch bestimmt.

Danach werden die Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Brücken bei verschiedenen Temperaturen miteinander verglichen.

4.1.1 Bewegungen der Schwerpunkte der einzelnen Nanobrücken

4.1.1.1 Martensit Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung

Die Simulationsreihe der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung wurde für sieben verschiedene Temperaturen zwischen 0 und 300 Kelvin (Abbildung 2) durchgeführt. Bei 300 Kelvin wurde festgestellt, dass sich die Brücke beim Auslenken plastisch verformt, weswegen diese Simulation nicht weiter untersucht wurde.

Bei 0 Kelvin ist auffällig, dass der Verlauf der roten Extrema stark vom Verlauf der grünen Ausgleichskurve abweicht. Die Schwingung scheint zu Beginn der Simulation schneller abzuklingen als gegen Ende. Zwischen 20 und 150 Kelvin passt die Dämpfung der Schwingungsamplitude besser zur grünen Exponentialfunktion.

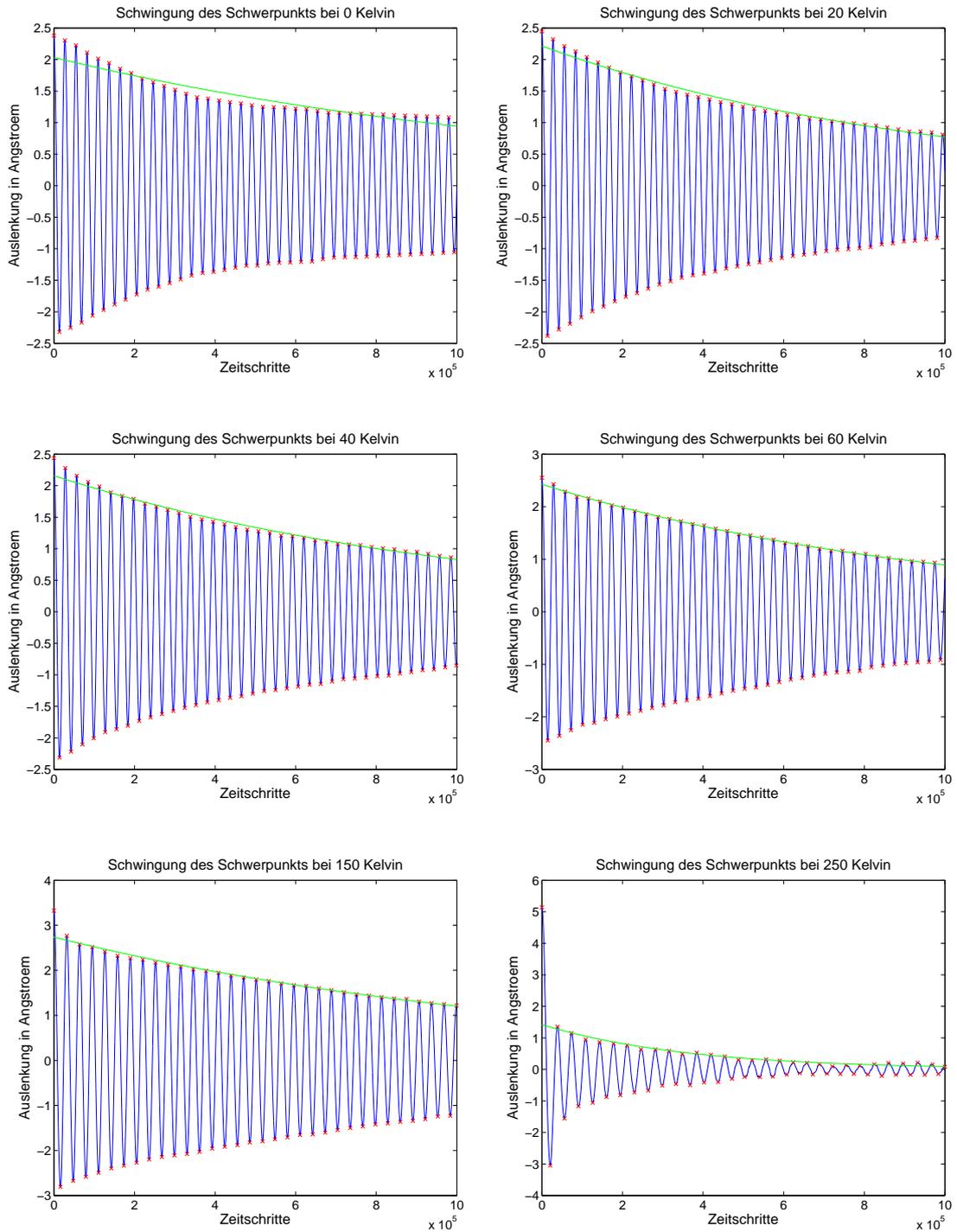


Abbildung 2: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung

Die Schwingung bei 250 Kelvin stellt einen Sonderfall dar. Nach der ersten Schwingungsperiode ist die Amplitude bereits auf weniger als ein Drittel der Anfangsauslenkung gesunken. Dann fällt die Amplitude, wie der Vergleich mit der grünen Exponentialfunktion zeigt, exponentiell ab. Dieser plötzliche Abfall der Schwingungsamplitude wird nun etwas genauer untersucht. Betrachtet man den zeitlichen Verlauf der Temperatur in Abbildung 3, so fällt auf, dass gleichzeitig

zum starken Abklingen der Schwingung innerhalb der ersten 50.000 Zeitschritte auch ein kurzer Temperaturverlust zu beobachten ist, der jedoch sofort wieder verschwindet. Als Zeitintervall, über das die Temperatur hier durch zeitliches Mitteln berechnet wurde, wurde die Dauer einer Schwingungsperiode verwendet. Insgesamt liegt die Temperatur natürlich ein wenig über 250 Kelvin, da dem System durch das beim Auslenken angelegte Kraftfeld Energie zugeführt wurde.

Zum Vergleich mit einer Schwingung, bei der kein so plötzliches Verschwinden der Schwingungsamplitude zu beobachten war, wird auch der Temperaturverlauf der Schwingung bei 150 Kelvin gezeigt. In diesem Fall gibt es keinen auffälligen Peak zu kleineren Temperaturen, wie bei der Simulation mit Anfangstemperatur 250 Kelvin. In beiden Fällen ist während der ganzen Simulationsdauer ein langsames Ansteigen der Temperatur zu beobachten, was mit der Umwandlung von kinetischer Energie der Schwingung von der ganzen Brücke in die Energieform Wärme zu erklären ist, da insgesamt Energieerhaltung vorherrscht.

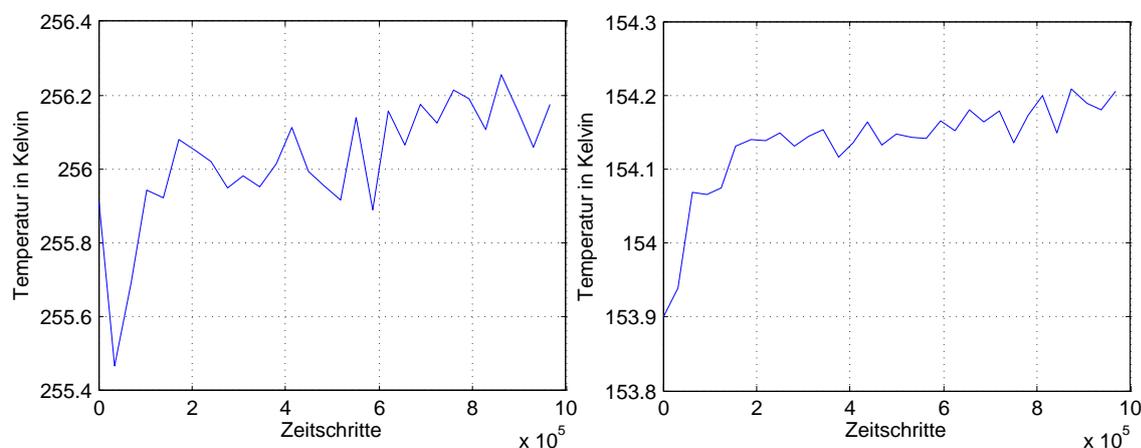


Abbildung 3: Temperaturverlauf der Brücke 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung während der Schwingung; links: 250 Kelvin, rechts: 150 Kelvin

Die Schwingung mit 250 Kelvin Anfangstemperatur wird bezüglich des Phasenübergangs in Kapitel 4.4 untersucht.

4.1.1.2 Martensit Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen und einer mittleren Bohrung mit Radius von 4 Angström

Diese Simulationsreihe wurde mit Anfangstemperaturen von 20, 150 und 300 Kelvin durchgeführt. Die Brücke mit 300 Kelvin Anfangstemperatur war wie im Fall ohne Bohrung instabil. In Abbildung 4 sind die Schwingungen bei 20 und 150 Kelvin dargestellt. Mit bloßem Auge ist den Abbildungen kein Unterschied zum Fall ohne Bohrung anzusehen. Im Abschnitt zum Vergleich der Frequenzen und Dämpfungen werden die Unterschiede jedoch klarer dargestellt.

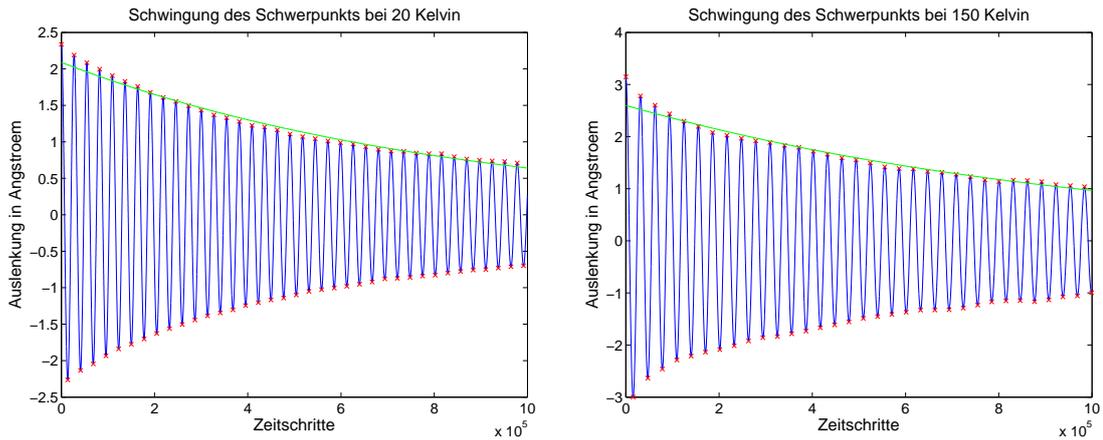


Abbildung 4: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström

4.1.1.3 Martensit Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen und einer mittigen Bohrung mit Radius von 6 Angström

Die Simulationsreihe dieser Brücken wurde ebenfalls mit Anfangstemperaturen von 20, 150 und 300 Kelvin angesetzt, wobei die Schwingung bei 300 Kelvin ebenfalls nicht durchführbar war. In Abbildung 5 sind die Schwerpunktbewegungen mit Ausgleichskurven der Extremwerte zu finden. Man kann hier bereits eine leicht erhöhte Dämpfung erahnen.

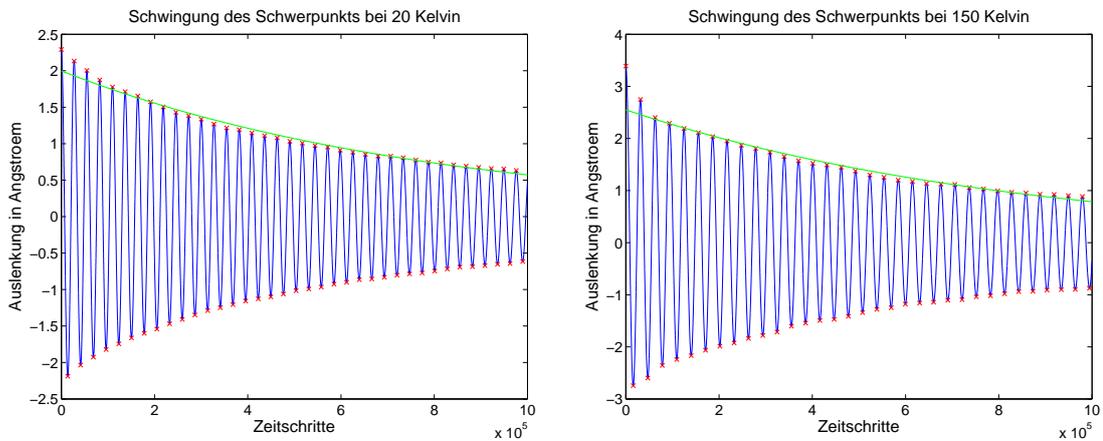


Abbildung 5: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström

4.1.1.4 Martensit Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen und einer mittigen Bohrung mit Radius von 8 Angström

Bei den Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen und einer mittigen Bohrung von 8 Angström wurden sieben Simulationen mit Temperaturen zwischen 0 und 300 Kelvin angesetzt. Da bei dieser Konfiguration der Durchmesser der Bohrung sehr groß war, wurde die Brücke bei steigenden Temperaturen schnell instabil. Bei 300 Kelvin ist die Brücke an der Stelle der Bohrung sogar auseinandergerissen. Die Simulationsergebnisse für die anderen sechs Temperaturen sind in Abbildung 6 zu finden. Der lineare Ausgleich über die automatisch bestimmten Extremwerte lieferte

keine brauchbaren Ausgleichskurven, weswegen hier dazu übergegangen wurde, die Extremwerte, die zum linearen Ausgleich verwendet wurden, von Hand auszuwählen. Beim Bestimmen dieser Stützstellen wurde auf zwei Faktoren geachtet. Die entstehende Exponentialfunktion sollte das Maximum beim nullten Zeitschritt möglichst genau treffen und sie sollte zumindest im Anfangszeitintervall, in dem die Amplitude auf den $1/e$ -ten Teil der Anfangsamplitude abfällt, wenigstens qualitativ gut zum Verlauf der Einhüllenden der Extrema der Schwingungskurve passen.

Um die von Hand ausgewählten Extrema von den automatisch bestimmten zu unterscheiden, wurden die von Hand ausgewählten Extrema mit kleinen roten Sternchen (*) dargestellt und die automatisch bestimmten Extrema stets mit kleinen roten Kreuzen. Bei 0 Kelvin war es nicht möglich passende Stützstellen zu finden, da die Schwingung nach den ersten zwei Schwingungsperioden nahezu nicht abnahm. Daher wird hier die Exponentialfunktion aus dem linearen Ausgleich mit automatisch bestimmten Stützstellen akzeptiert.

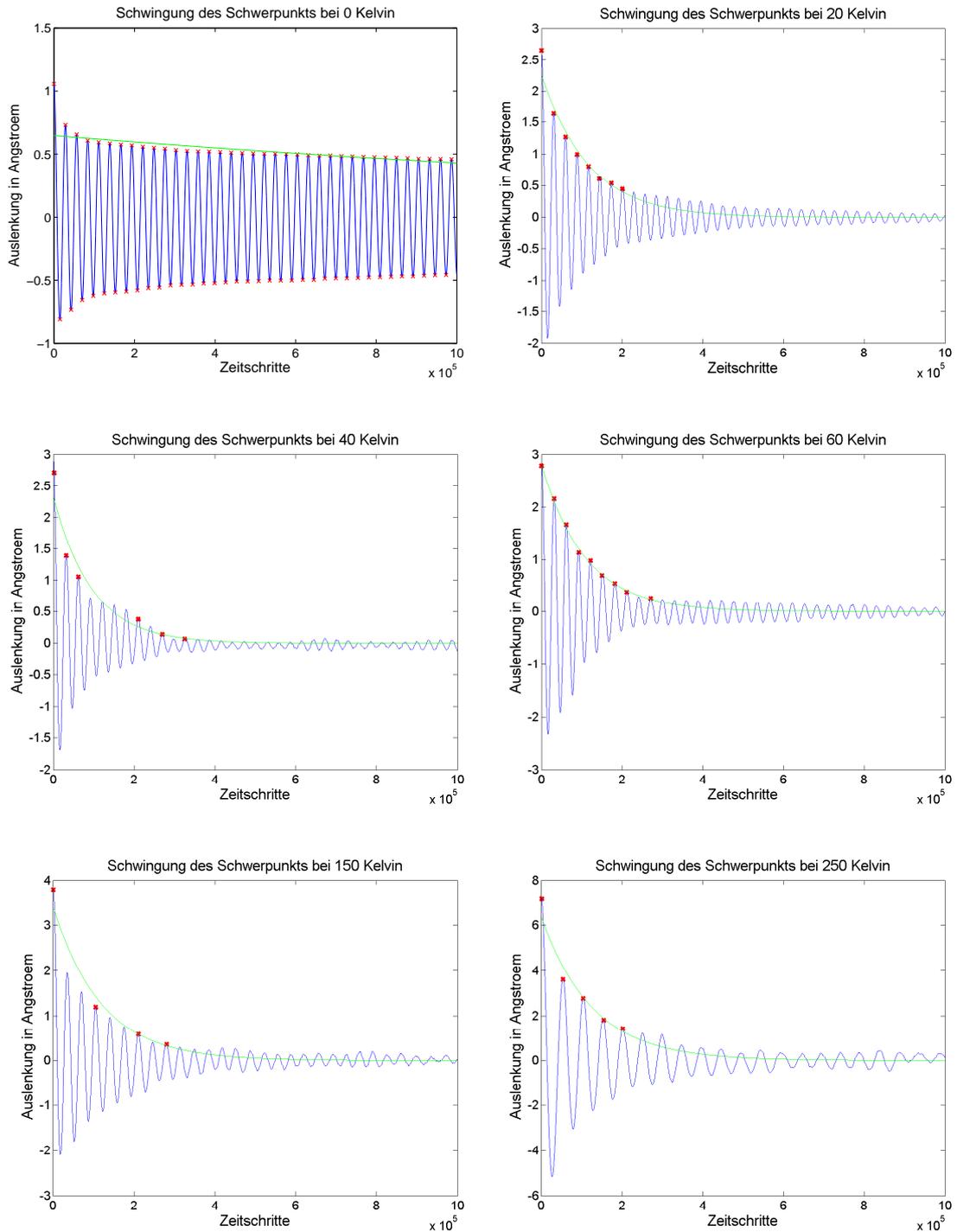


Abbildung 6: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström

4.1.1.5 Martensit Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen und Bohrungen von 0, 4, 6 und 8 Angström

Bei der Konfiguration mit 8-40-8 Einheitszellen erweisen sich die Nanobrücken als besonders stabil. Für jede Brückenkonfiguration wurden Simulationen mit Anfangstemperaturen von 20, 150 und 300 Kelvin angesetzt. Im Gegensatz zur zuvor untersuchten Struktur halten die Brücken

nun auch Schwingungsversuchen bei 300 Kelvin stand. Durch die hohe Stabilität wird es gleichzeitig schwerer, die Brücken zu biegen, d.h. die Auslenkung zu Beginn der Schwingung ist kleiner und die Frequenz ist höher. Bei 20 Kelvin ist die Auslenkung sogar unter 0,4 Angström.

Außerdem sind bei 20 und 150 Kelvin Schwebungen zu erkennen, deren Ursache wohl auf eine Eigenschaft der Gitterstruktur zurückzuführen ist. Die Simulationsergebnisse sind in Abbildungen 7 bis 10 zu finden. Im Falle der Schwebungen wurden die Ausgleichspunkte von Hand ausgewählt, die wieder mit kleinen roten Sternchen dargestellt sind, um sie von den automatisch bestimmten Extrema (=kleine rote Kreuze) zu unterscheiden.

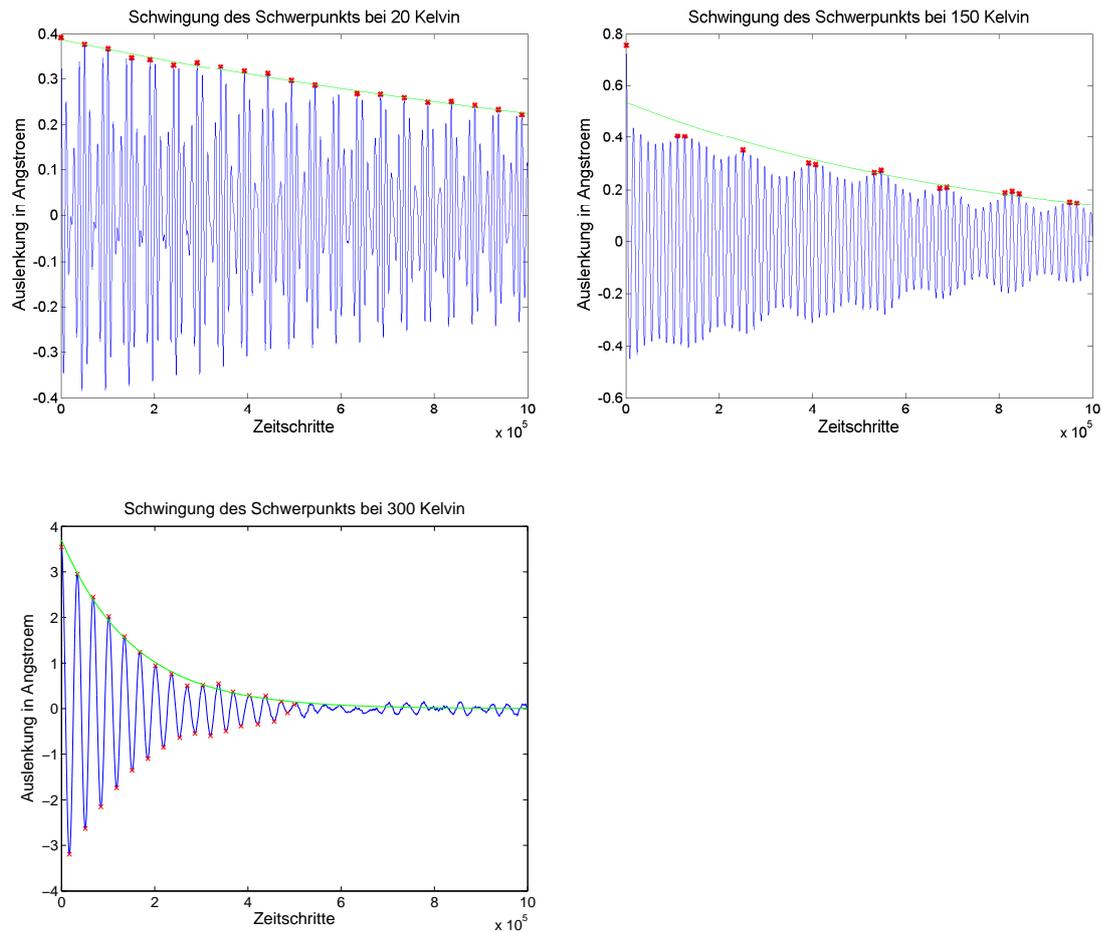


Abbildung 7: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen ohne Bohrung

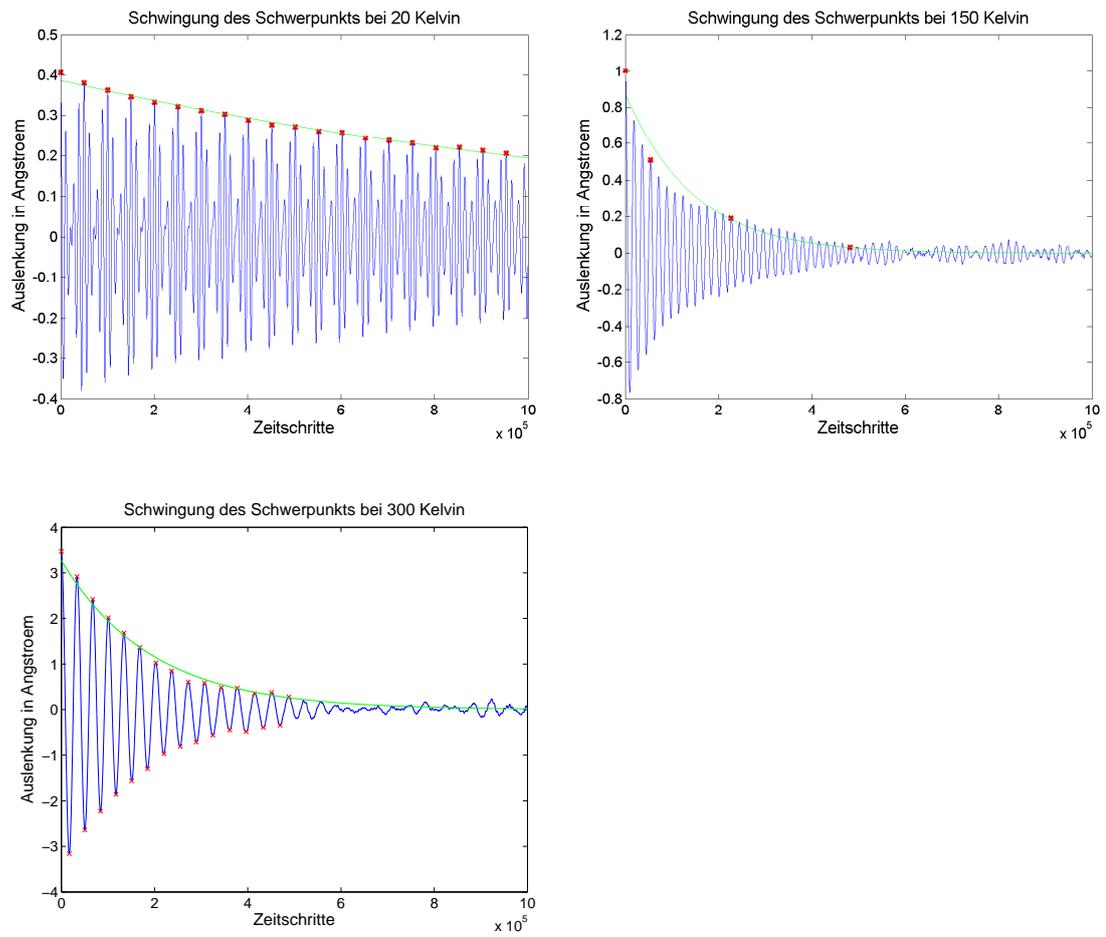


Abbildung 8: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström

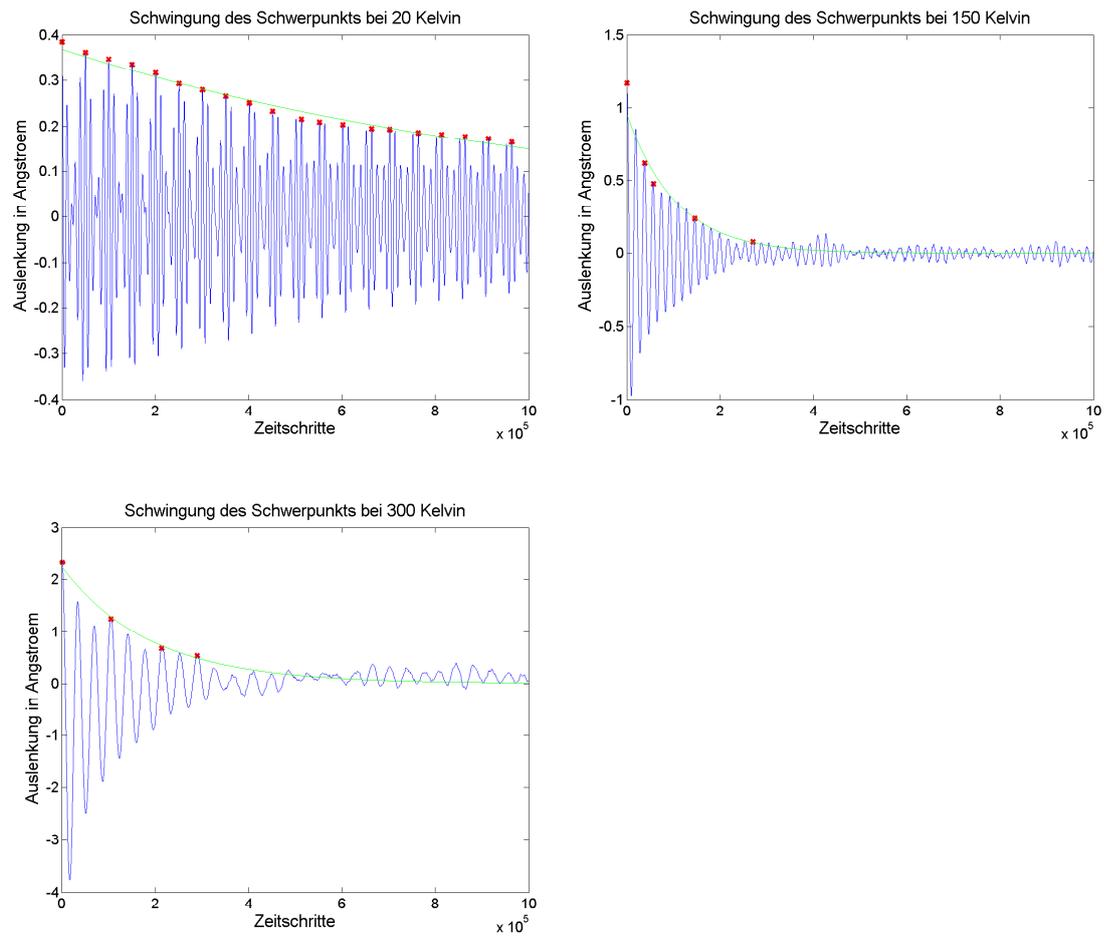


Abbildung 9: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström

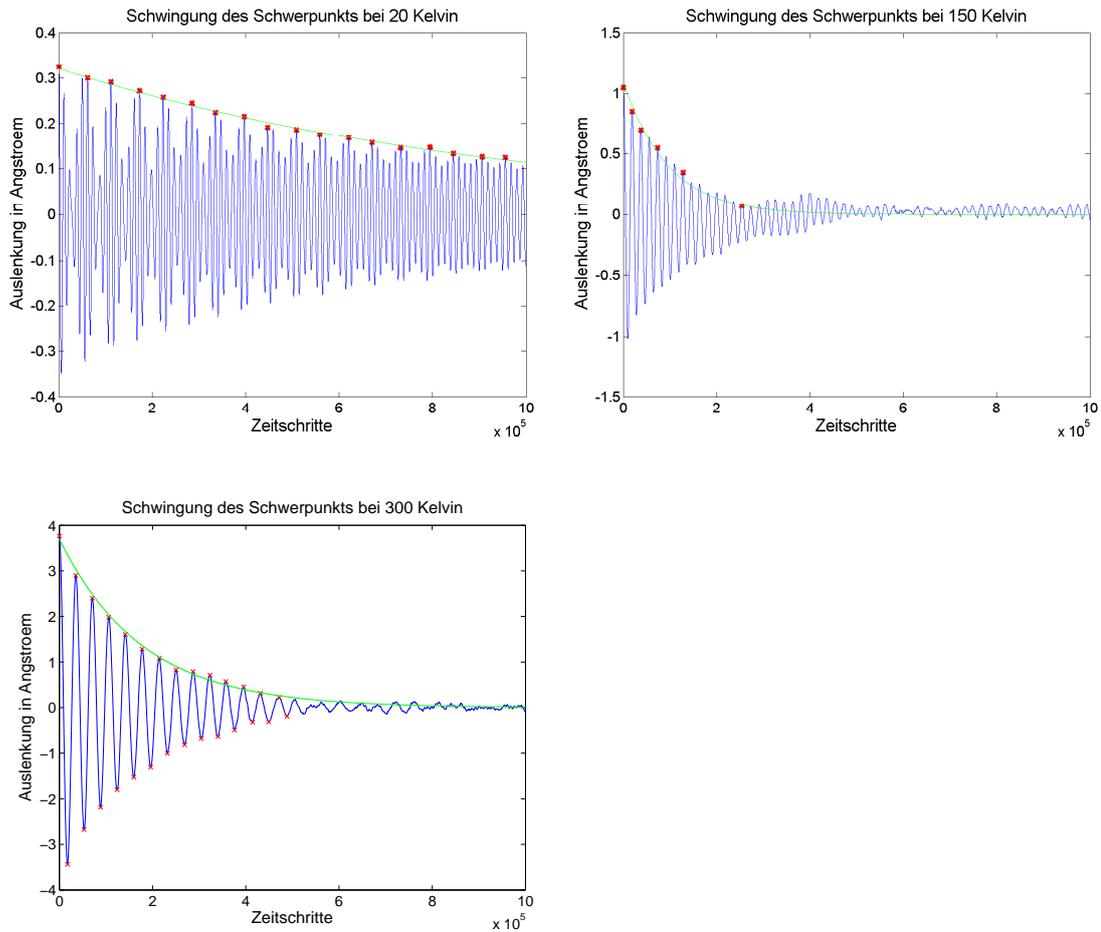


Abbildung 10: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittlerer Bohrung mit Radius von 8 Angström

4.1.1.6 Austenit Brücken mit 40-8-8 und 8-40-8 Einheitszellen und mittigen Bohrungen mit Radien von 0, 4, 6 und 8 Angström

Die Schwerpunktbewegungen der Brücken in der Hochtemperaturphase (=Austenit-Brücken) sind in Abbildungen 11 bis 18 gezeigt. Wie der Name schon sagt, sind die Temperaturen dieser Simulationsreihe höher. Jeder Brückenkonfiguration der Hochtemperaturphase wurde mit Anfangstemperaturen von 300, 350, 400 und 600 Kelvin angesetzt.

Man erkennt in den Abbildungen, dass die Schwingungen der Austenit-Brücken im Allgemeinen exponentiell gedämpft sind. Der Verlauf der Maxima der Schwingungen passt besser zum Verlauf der grünen Ausgleichskurve, also einer Exponentialfunktion, als bei den Martensit-Brücken.

Ob dieser Unterschied an der reinen Gitterkonfiguration oder an den hier erhöhten Temperaturen liegt, ist schwer zu beurteilen. Da es jedoch keine Martensit-Brücken mit Temperatur über 300 Kelvin gibt, wird diese Frage im Experiment, und damit auch für die Theorie, irrelevant. Denn: Ist eine Größe prinzipiell im Experiment nicht messbar, so ist sie auch uninteressant für die Theorie.

Man kann den Schaubildern für 300 Kelvin entnehmen, dass bei steigendem Bohrungsradius die Dämpfung ebenfalls steigt. Dies wird im Kapitel zum Vergleich der Dämpfungen nochmals besser visualisiert.

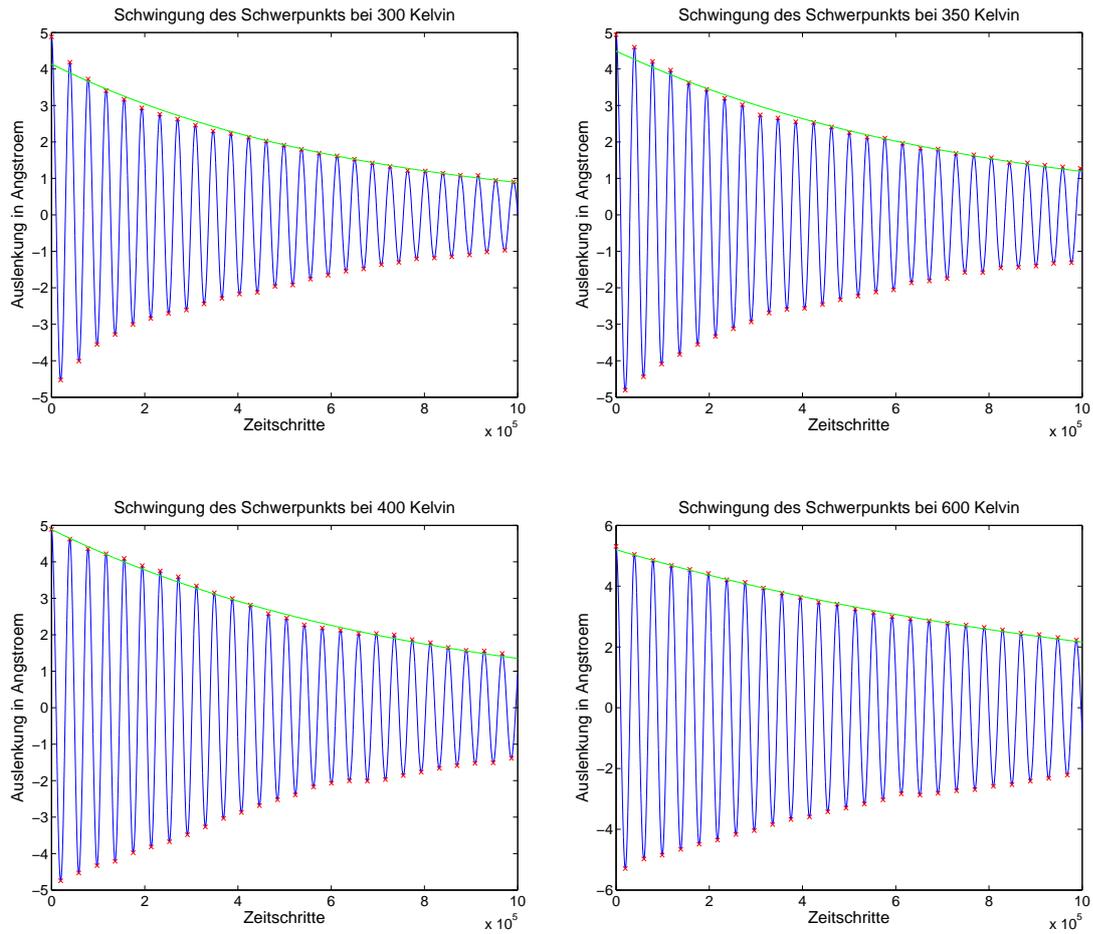


Abbildung 11: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung

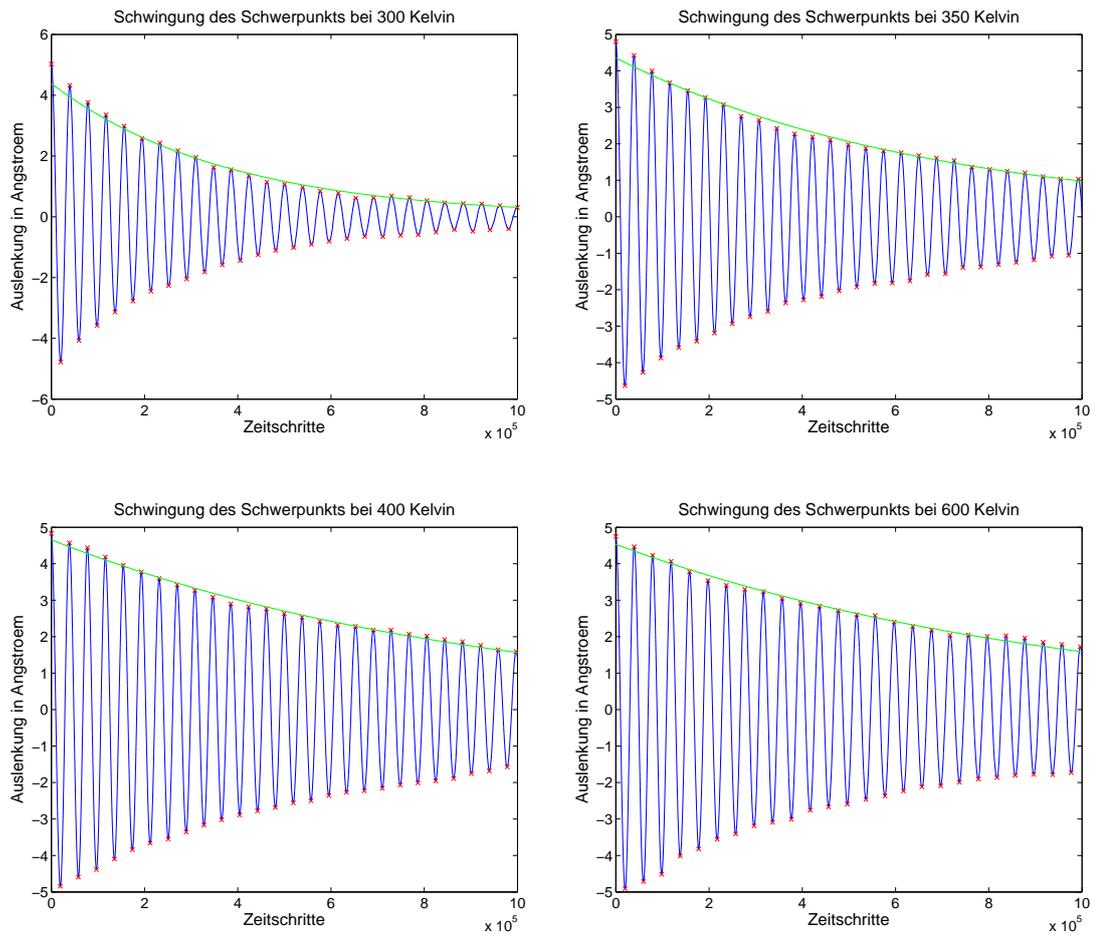


Abbildung 12: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström

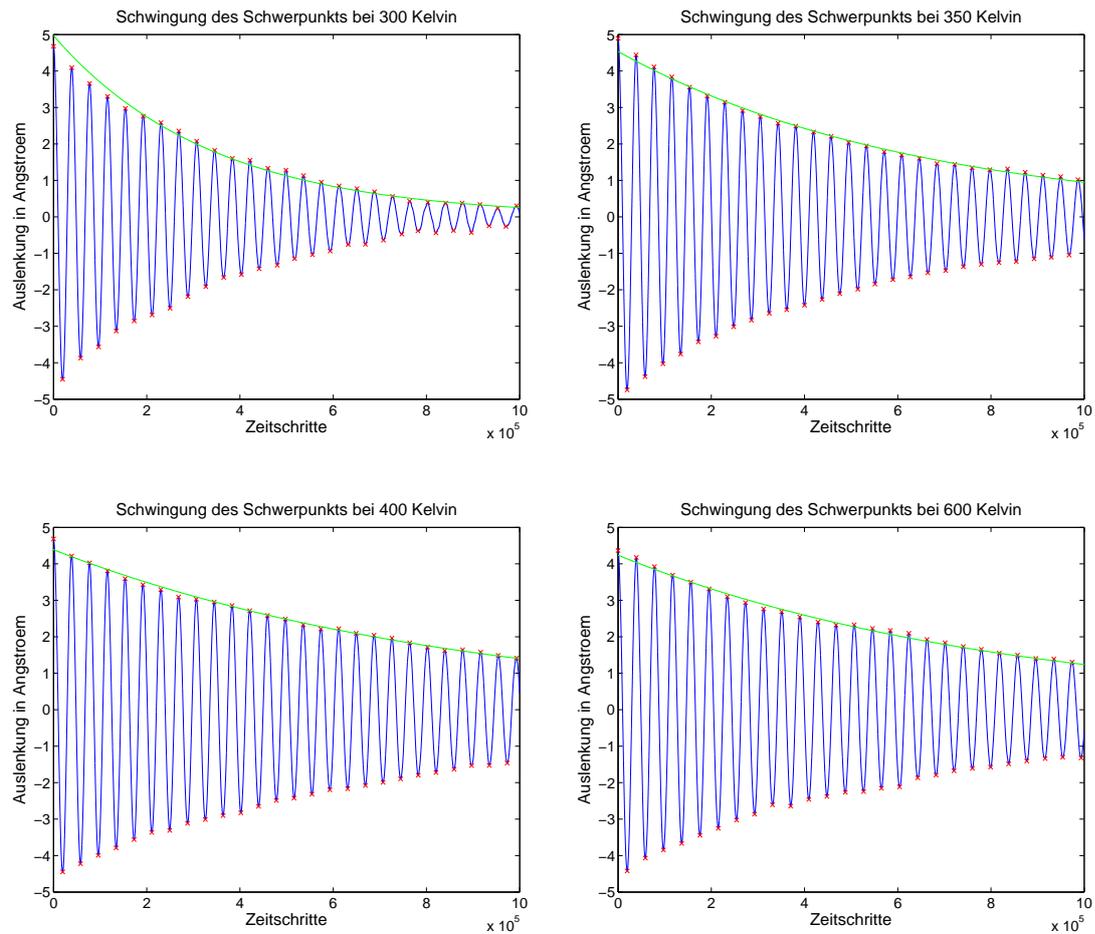


Abbildung 13: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström

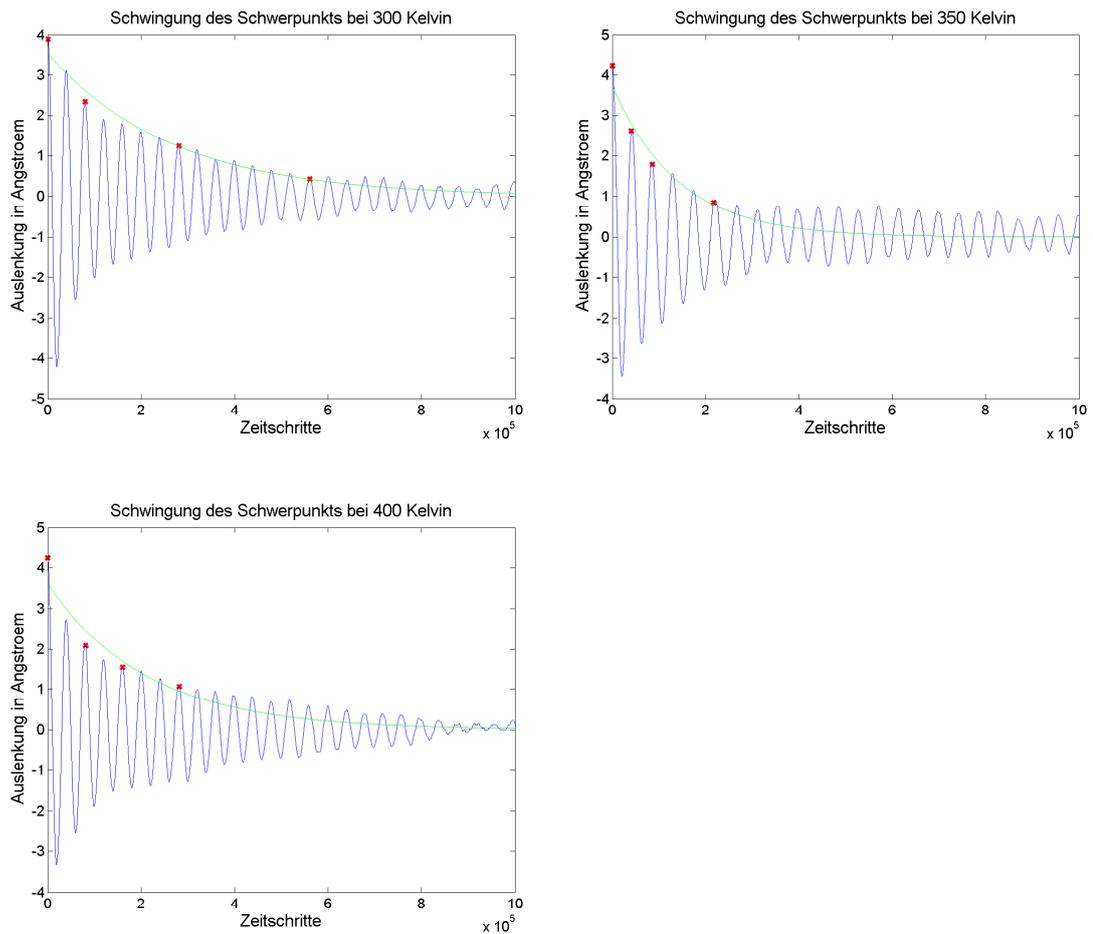


Abbildung 14: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström

Bei dieser Konfiguration (Abbildung 14) ergibt sich für alle Temperaturen ein Verlauf, der ein wenig anders ist, als der der Brücken mit kleineren Bohrungen. Die Ursache liegt an den sehr dünnen Stellen der Brücke um die Bohrung herum, in denen Teilchendurchmischungen stattfinden, wodurch Energie verloren geht. Bei 600 Kelvin ist die Bohrung verschwunden, weswegen diese Schwingung nicht dargestellt wird.

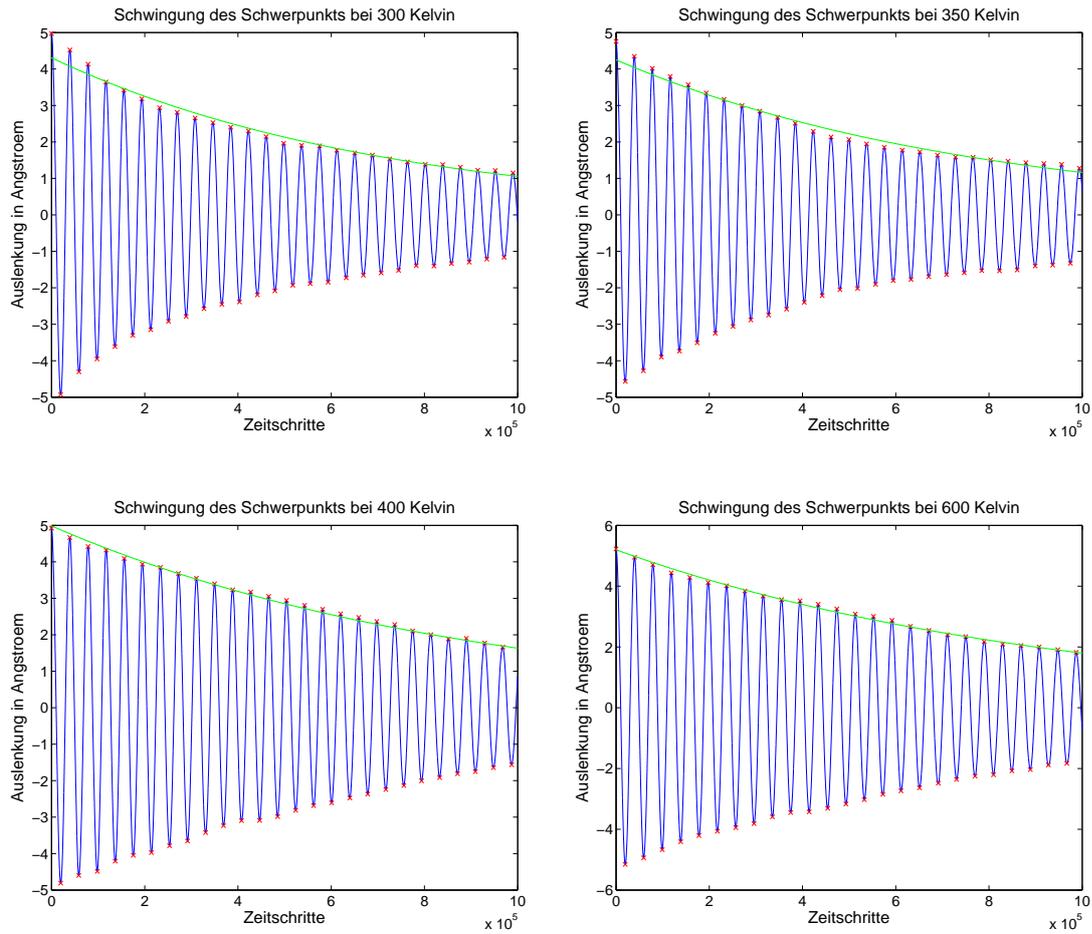


Abbildung 15: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen ohne Bohrung

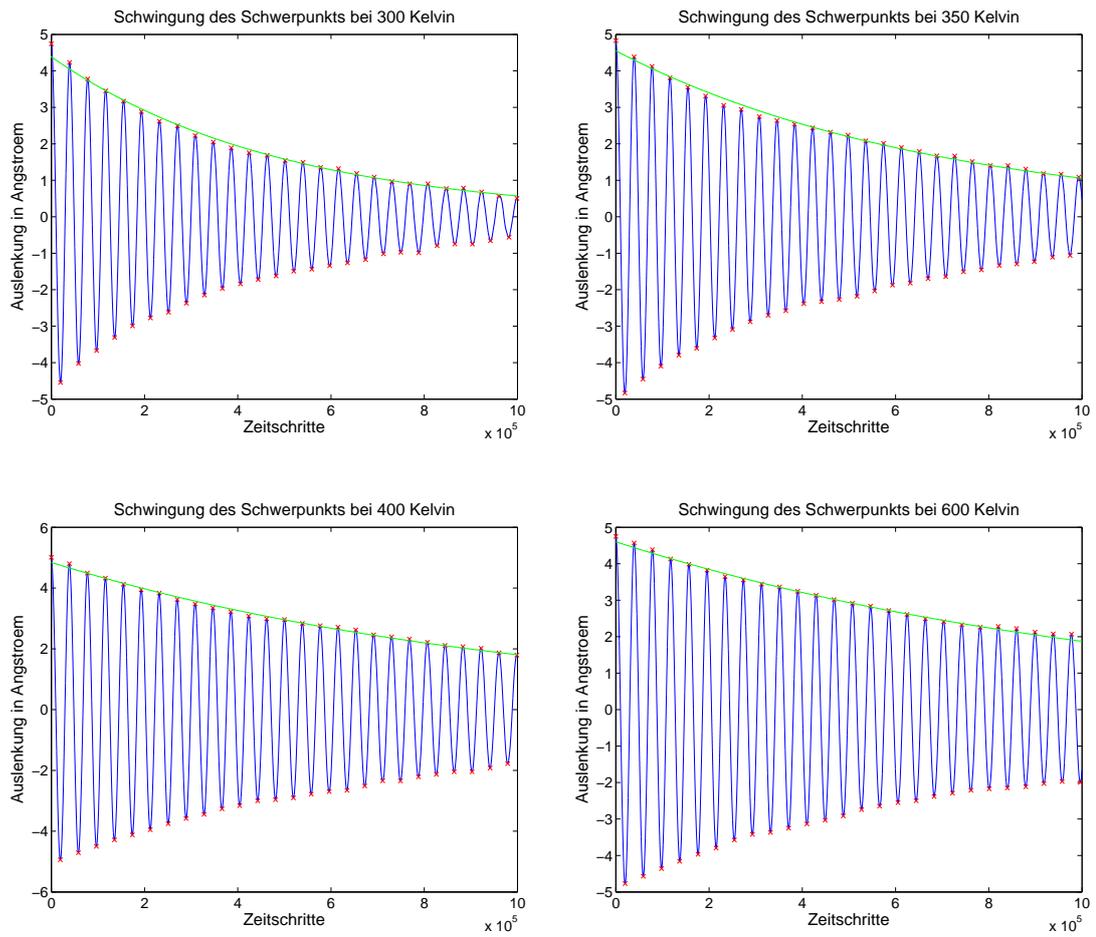


Abbildung 16: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström

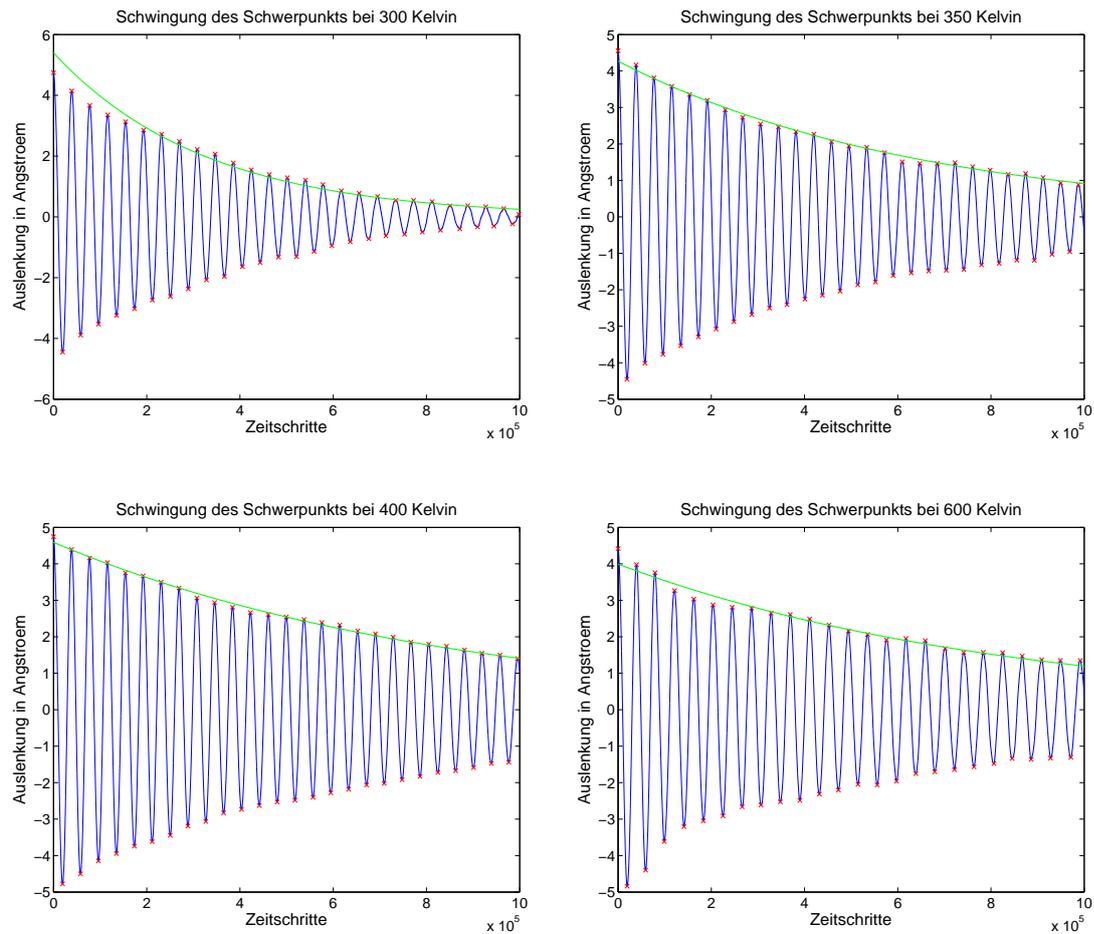


Abbildung 17: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström

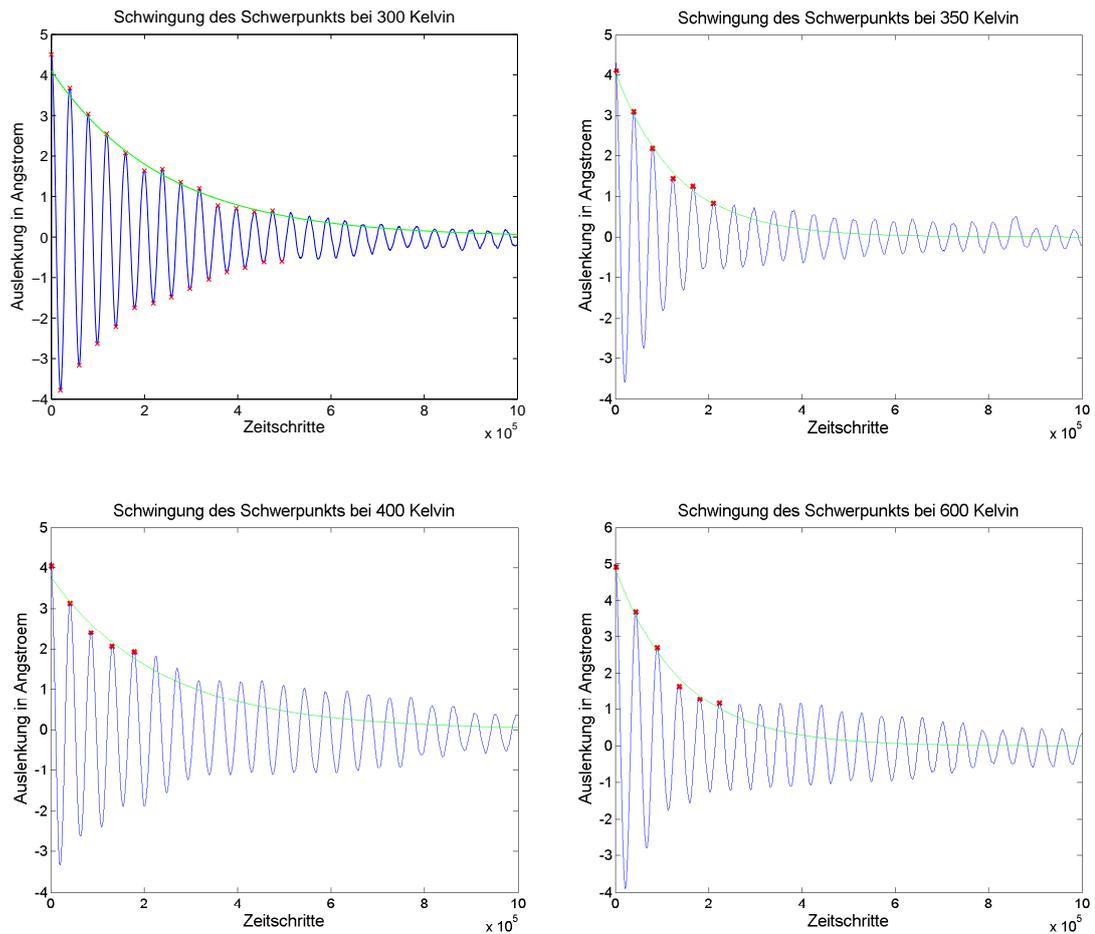


Abbildung 18: Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström

Hier ergaben sich ebenfalls Schwerpunktschwingungen, die ein wenig anders aussehen als bei kleineren Bohrungen, was ebenfalls durch geringfügige Teilchendurchmischungen an den besonders dünnen Stellen um die Bohrung herum bedingt ist.

4.1.1.7 Brücken mit mehreren Bohrungen

Es werden nun Nanobrücken mit mehreren Bohrungen untersucht. Dabei wurde nicht mehr jede einzelne Brückenkonfiguration bei verschiedenen Temperaturen simuliert. Hier ist von Interesse, wie sich das Schwingungsverhalten der zuvor untersuchten Brücken bei bestimmten Temperaturen durch das Anbringen mehrerer Bohrungen verändert. Die Schwingungen der Schwerpunkte sind in Abbildungen 19 bis 23 dargestellt. Wie im Simulationsprogramm werden die Orte der Zentren der Bohrungen entlang der langen Achse der Brücke und relativ zum Mittelpunkt der Brücken in Angström angegeben.

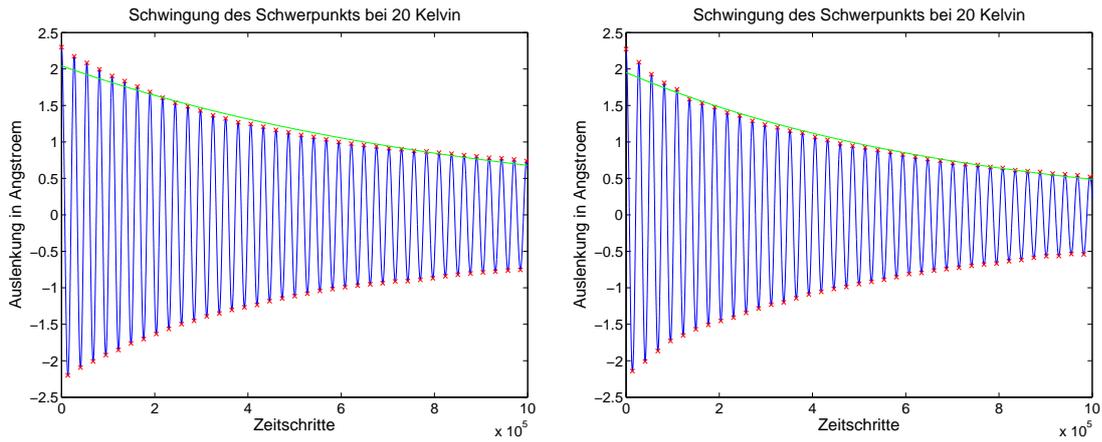


Abbildung 19: Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen bei 20 Kelvin mit zwei Bohrungen; Zentren der Bohrungen bei ± 20 Angström; Radien der Bohrungen links: 4 Angström, rechts: 6 Angström

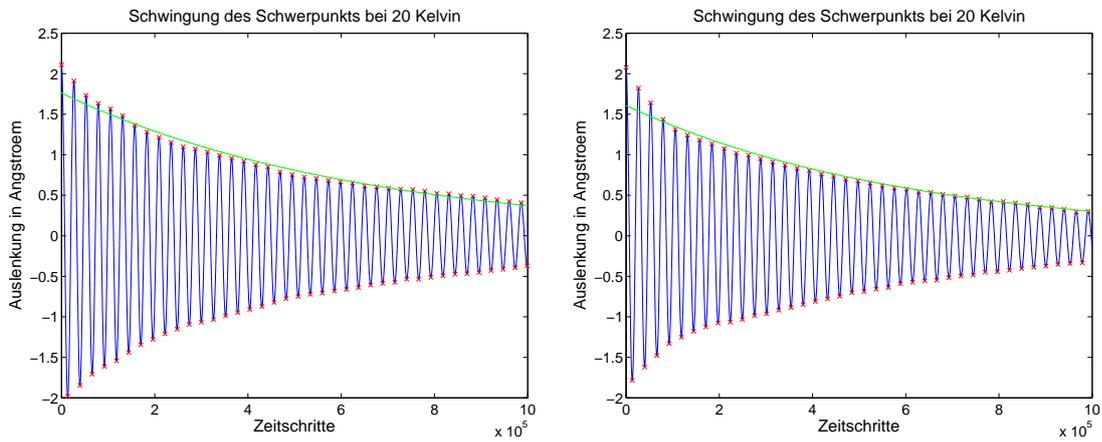


Abbildung 20: Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen bei 20 Kelvin mit drei (links) und vier (rechts) Bohrungen mit Radius von 6 Angström; Zentren der Bohrungen links: 0, ± 20 Angström, rechts: ± 10 , ± 30 Angström

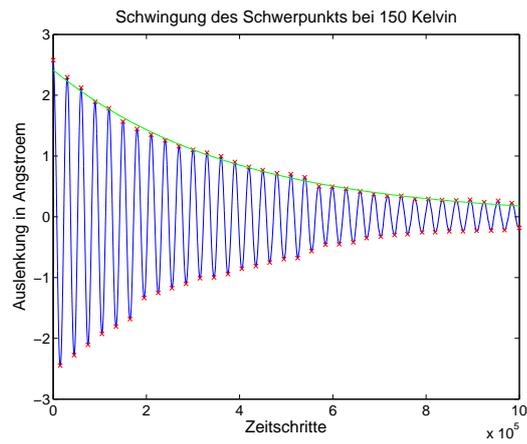


Abbildung 21: Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen und 4 Bohrungen bei 150 Kelvin mit Radien der Bohrungen von je 6 Angström; Zentren der Bohrungen: ± 10 , ± 30 Angström;

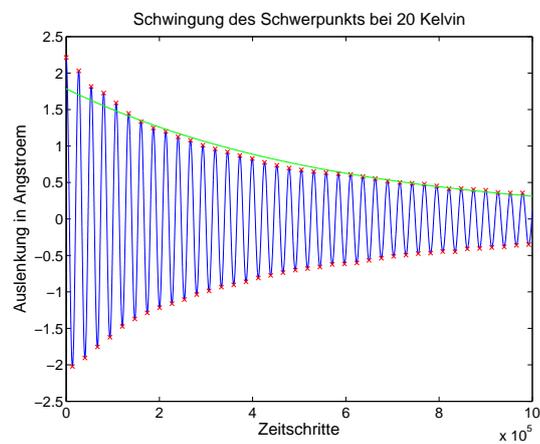


Abbildung 22: Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen und 4 Bohrungen bei 20 Kelvin; Bohrungen: zwei Zentren bei ± 30 Angström mit Radius 6 Angström, zwei Zentren bei ± 10 Angström mit Radius 4 Angström

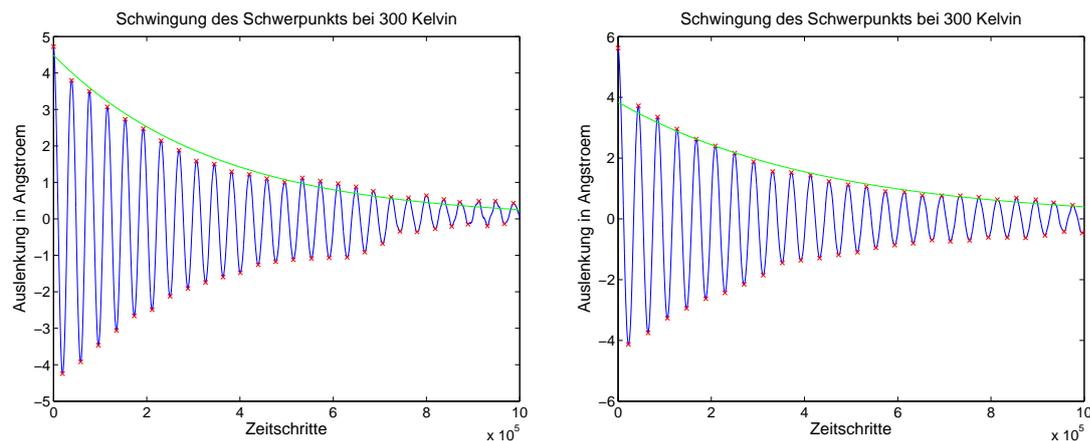


Abbildung 23: Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radien von je 6 Angström und Zentren bei ± 25 Angström; rechts: 10 Bohrungen mit Radien von je 4 Angström und Zentren bei ± 7.5 , ± 22.5 , ± 37.5 , ± 52.5 und ± 67.5 Angström

4.1.1.8 Besondere Konfigurationen

Die Schwingungen des Schwerpunkts der Nanobrücken mit asymmetrisch angebrachten Bohrungen sind in Abbildung 24 dargestellt.

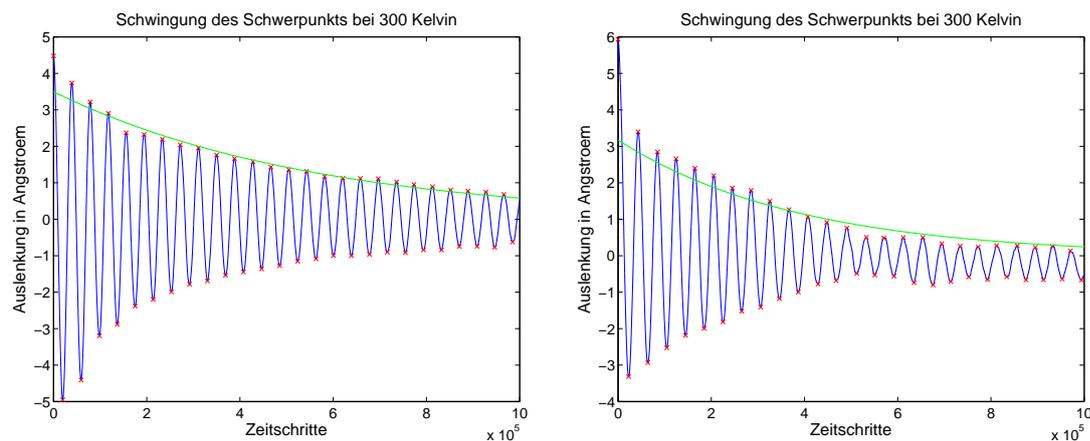


Abbildung 24: Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radius von je 6 Angström und Zentren bei ± 25 Angström in y -Richtung und ± 1.5 Angström in z -Richtung; rechts: 10 Bohrungen mit Radius von je 4 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(7.5, 2.0)$, $(22.5, 2.0)$, $(37.5, 2.0)$, $(52.5, 2.0)$, $(67.5, 2.0)$, $(-7.5, -2.0)$, $(-22.5, -2.0)$, $(-37.5, -2.0)$, $(-52.5, -2.0)$ und $(-67.5, -2.0)$ Angström

Aus den Überlegungen zur thermoelastischen Dämpfung wird klar, dass die durch hydrostatische Kompressionen erzeugten Temperaturunterschiede zur Dämpfung des Resonators führen. Durch die mittigen Bohrungen werden die Spannungen beim Verbiegen um die Bohrung herum durch eine Hebelwirkung verstärkt, wodurch die Brücke stärker gedämpft sein sollte.

Nun wurden die Zentren der Bohrungen in z -Richtung auf die äußerste Schicht von Atomen der Nanobrücke gesetzt, wodurch von der Brücke nur ein halber Zylinder von außen herausgeschnitten wurde. Dadurch fehlt an den Stellen an denen sich die Brücke am meisten biegt die Hebelwirkung, weswegen die erhöhten Spannungen fehlen, die die Temperaturdifferenzen verur-

sachen.

Es wird erwartet, dass die Schwingung einer solchen Brücke nun schwächer gedämpft ist. Die Schwerpunktsbewegungen der entsprechenden Geometrien sind in Abbildung 25 zu finden.

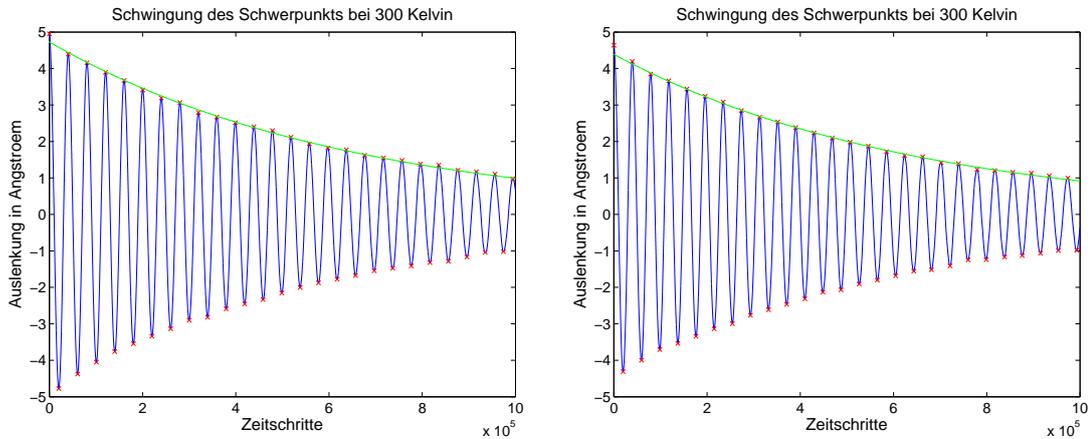


Abbildung 25: Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radius 6 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(0, -12.0)$ und $(0, 12.0)$ Angström; rechts: 10 Bohrungen mit Radius 4 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(-24, \pm 12)$, $(-12, \pm 12)$, $(0, \pm 12)$, $(12, \pm 12)$ und $(24, \pm 12)$ Angström

Als letzte Simulation wurde schließlich eine Brückenkonfiguration angesetzt, bei der die Bohrungen sowohl mittig als auch von außen angebracht wurden. Die Bewegung des Schwerpunkts wird in Abbildung 26 dargestellt. Diese Simulation wurde über $3 \cdot 10^6$ Zeitschritte integriert, um das Langzeitverhalten zu untersuchen.

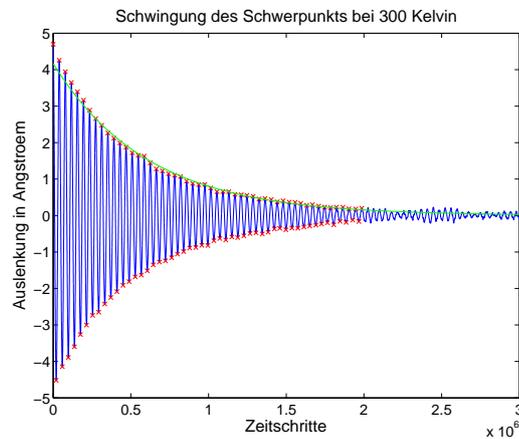


Abbildung 26: Austenit-Brücke mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin und 5 Bohrungen mit Radien von je 6 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(0, 0)$, $(27, \pm 12)$ und $(-27, \pm 12)$ Angström

4.1.2 Vergleich der Frequenzen

Zunächst werden die Frequenzen der Brückenkonfigurationen in Abhängigkeit von den Temperaturen in Abbildung 27 und 29 gegenübergestellt. Da der Verlauf der Martensit-Brücken mit

40-8-8 Einheitszellen in Abbildung 27 etwas untergeht, werden speziell diese Frequenzen nochmals in Abbildung 28 gezeigt, wobei hier die Versuchsreihe der Martensit-Brücken mit mehreren Bohrungen ebenfalls eingezeichnet sind.

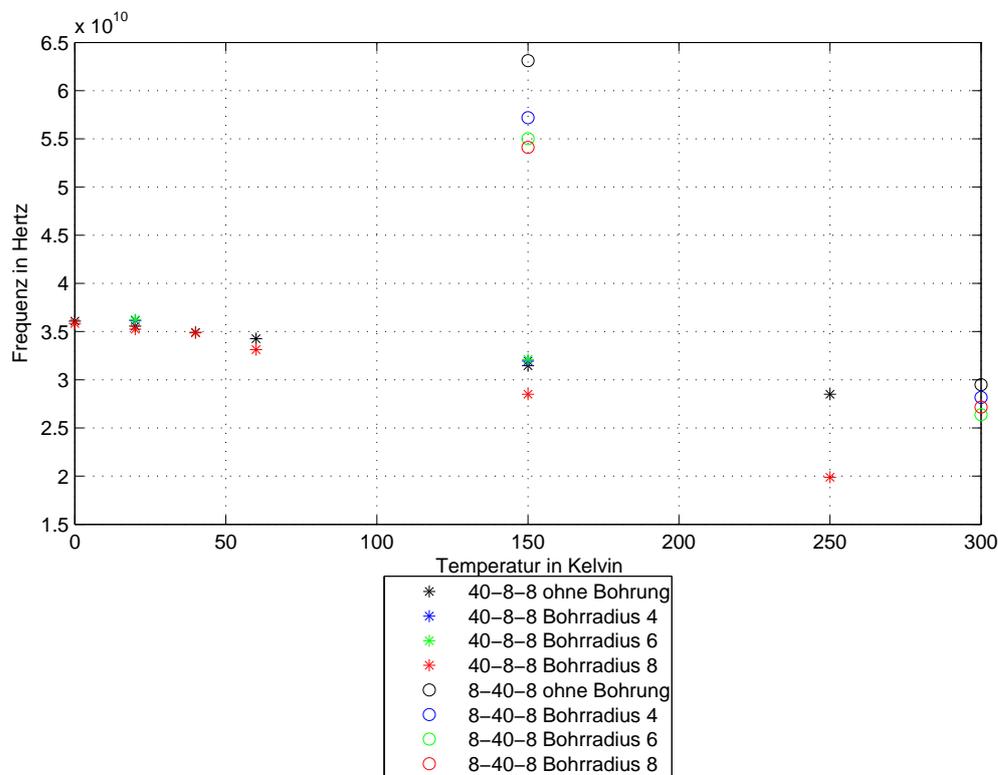


Abbildung 27: Frequenzen der Martensit-Brücken mit x-y-z Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström

Bei den Martensit-Brücken sind wie erwartet die Frequenzen der Konfigurationen mit 8-40-8 Einheitszellen stets höher (Abbildung 27). Als erstes Ergebnis ist also für die Frequenzen festzuhalten, dass bei Martensit-Brücken die Richtungen der Gitterkonfiguration und der langen Achse der Brücke ausschlaggebend sind. Des Weiteren sinkt in den meisten Fällen die Frequenz bei steigender Temperatur.

Als Einfluss der Bohrungen ist kein einfacher Zusammenhang zwischen Radius der Bohrung und Frequenz zu erkennen. Man könnte zwar bei der Brückengeometrie mit 8-40-8 Einheitszellen bei 150 Kelvin erkennen, dass mit steigendem Radius der Bohrung die Frequenz sinkt, aber bei 300 Kelvin ist die Frequenz der Brücke mit dem größten Bohrungsradius nicht die niedrigste Frequenz.

Diesen Sachverhalt kann man auf folgende Weise interpretieren. Durch die mittigen Bohrungen fehlt der Brücke gerade an der Stelle, an der bei der Schwingung die größten Geschwindigkeiten erreicht werden, ein Teil der schwingenden Masse. Oszillatoren mit geringerer Masse und gleichen rückstellenden Kräften haben höhere Frequenzen, weswegen man eine *höhere Frequenz* bei größerem Radius der Bohrung erwarten würde.

Andererseits setzt sich die Rückstellkraft der Nanobrücke aus zwei Teilkräften zusammen. Eine Kraft, auf die eine mittige Bohrung wenig Einfluss haben sollte, ist die durch das Schubmodul bedingte Rückstellkraft gegen Scherung.

Die Brücke wird beim Auslenken jedoch nicht nur geschert, sondern auch in die Länge gezogen.

Eine weitere rückstellende Kraft ist daher die Elastizität des Materials, die bei reinen Streckungen auftritt. Diese ist jedoch vom Querschnitt des gestreckten Objekts abhängig, also auch vom Radius der Bohrung, da mit steigendem Bohrungsradius die dünnsten Stellen, an denen die Brücke noch zusammenhält, dünner werden. Weil man ein dünneres Metallstück leichter in die Länge ziehen kann, ist durch das Anbringen der Bohrung auch die Rückstellkraft geringer.

Oszillatoren mit geringerer Rückstellkraft haben im Allgemeinen eine *niedrigere Frequenz*, wobei die Elastizität selbst auch von der Temperatur abhängig ist. Damit wäre erklärt, warum sich der Bohrungsradius der mittigen Bohrungen bei unterschiedlichen Temperaturen unterschiedlich auf die Frequenz auswirkt.

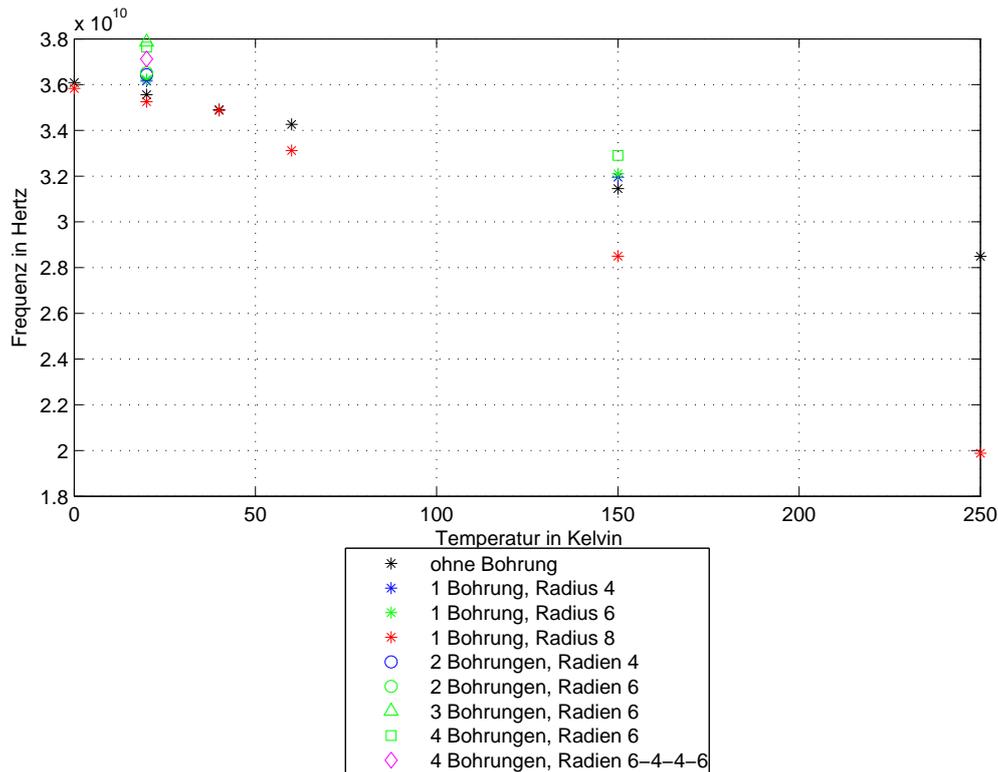


Abbildung 28: Frequenzen der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen, Radien der Bohrungen in Angström

Folgt man dem obigen Interpretationsversuch und betrachtet nun Abbildung 28, so kann man auch nachvollziehen, weshalb z.B. die Frequenz der Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen bei 20 Kelvin mit 4 Bohrungen, bei der die mittleren Bohrungen den Radius 4 Angström und die äußeren Bohrungen den Radius 6 Angström haben (in Magenta), niedriger ist als die Frequenz der Brücke, bei der alle vier Bohrungen den Radius 6 Angström haben (grünes Quadrat). Da die erstere Brücke (in Magenta) ausgerechnet mittig mehr Masse hat, schwingt sie langsamer, wobei die rückstellende Kraft (bzgl. Streckungen!) - nach dem Prinzip des Schwächsten Glieds in einer Kette - durch die beiden Stellen mit 6 Angström Bohrungsradius nahe zu gleich ist wie bei der zweiten Brücke.

Es wurde folglich festgestellt, dass durch das Anbringen von mehreren Bohrungen und je nach Kombination der Radien ebenfalls Einfluss auf die Frequenz genommen werden kann. Siehe dazu Abbildungen 29 und 30.

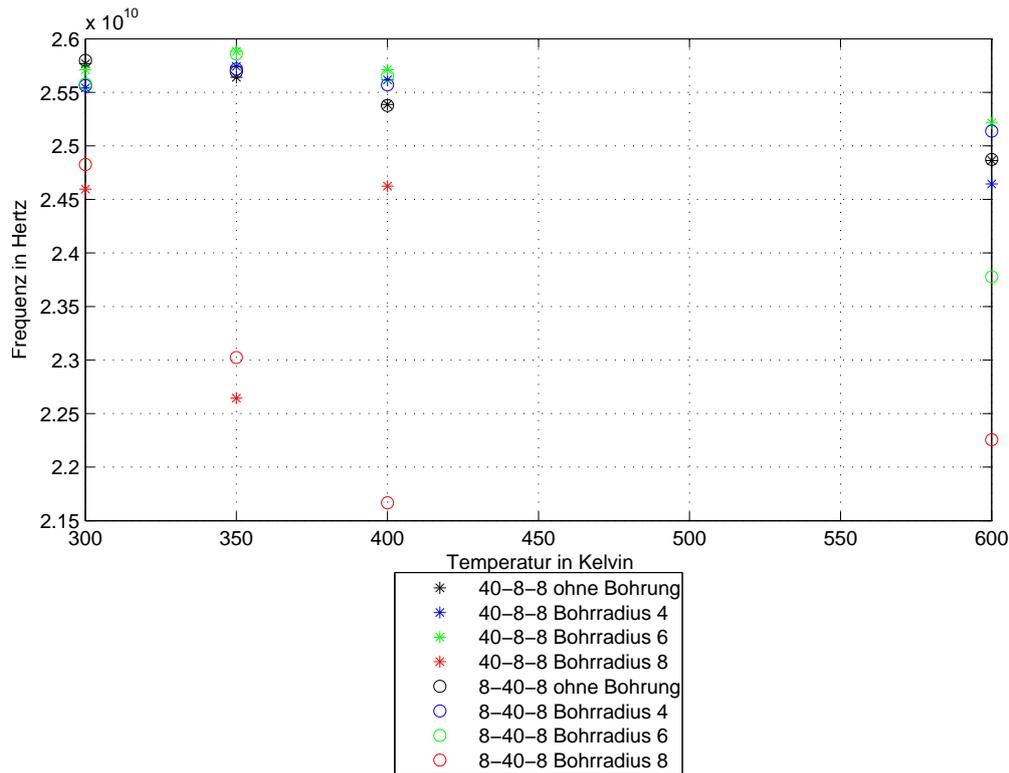
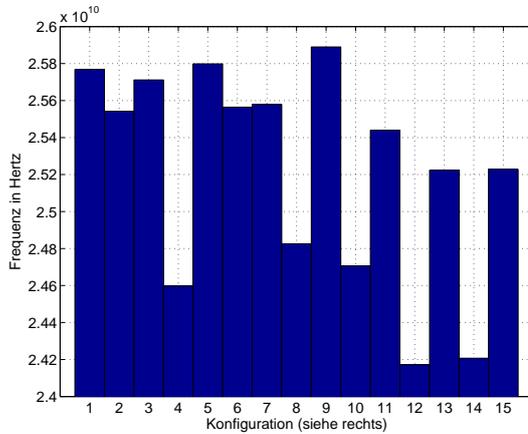


Abbildung 29: Frequenzen der Austenit-Brücken

Bei den Austenit-Brücken in Abbildung 29 weisen die Frequenzen der Brücken mit Radien von 0 bis 6 Å einen ähnlichen Verlauf auf. Die Brücken mit Bohrungsradius von 8 Å passen nicht dazu, wie schon im vorigen Abschnitt besprochen. Da die Teilchendurchmischungen bei steigenden Temperaturen stärker auftreten, kann hier teilweise ein Sinken der Frequenz bei steigender Temperatur beobachtet werden.



1. 40-8-8 EZ, ohne Bohrung
2. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 4
3. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 6
4. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 8
5. 8-40-8 EZ, ohne Bohrung
6. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 4
7. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 6
8. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 8
9. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen, Radius 6
10. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen von außen, Radius 6
11. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen asymmetrisch, Radius 6
12. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen entlang der langen Achse, Radius 4
13. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen von außen, Radius 4
14. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen asymmetrisch, Radius 4
15. 8-40-8 EZ, 5 Bohrungen an ausgezeichneten Stellen, Radius 6

Abbildung 30: Frequenzen der Austenit-Brücken bei 300 Kelvin; Abkürzung EZ steht für Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström; die Ausgezeichneten Stellen der Konfiguration 15 sind in Tabelle 5 in der letzten Zeile zu finden.

4.1.3 Vergleich der Dämpfungen

Zunächst werden in Abbildung 31 die Dämpfungskoeffizienten aller Martensit-Brücken gezeigt. Hier fällt die Simulationsreihe der Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen und Bohrungsradius von 8 Angström durch die viel höhere Dämpfung als bei kleineren Bohrungsradien auf. Zudem hat diese Brücke bei 0 Kelvin jedoch eine noch geringere Dämpfung als die gleiche Brückengeometrie ohne Bohrung. Es handelt sich bei 0 Kelvin um den in Abbildung 6 gezeigten Fall, wo auch sichtbar wird, dass die Dämpfung (außer in den ersten 50000 Zeitschritten) sehr gering ist.

Es ist wie schon bei den Frequenzen keine einfache Temperaturabhängigkeit der Dämpfungen zu ersehen. Für die Abhängigkeit der Dämpfung von den Bohrungen ergibt sich jedoch ein einfacher Zusammenhang. Die Dämpfung steigt mit dem Bohrungsradius, wie man in Abbildung 33 noch besser erkennen kann.

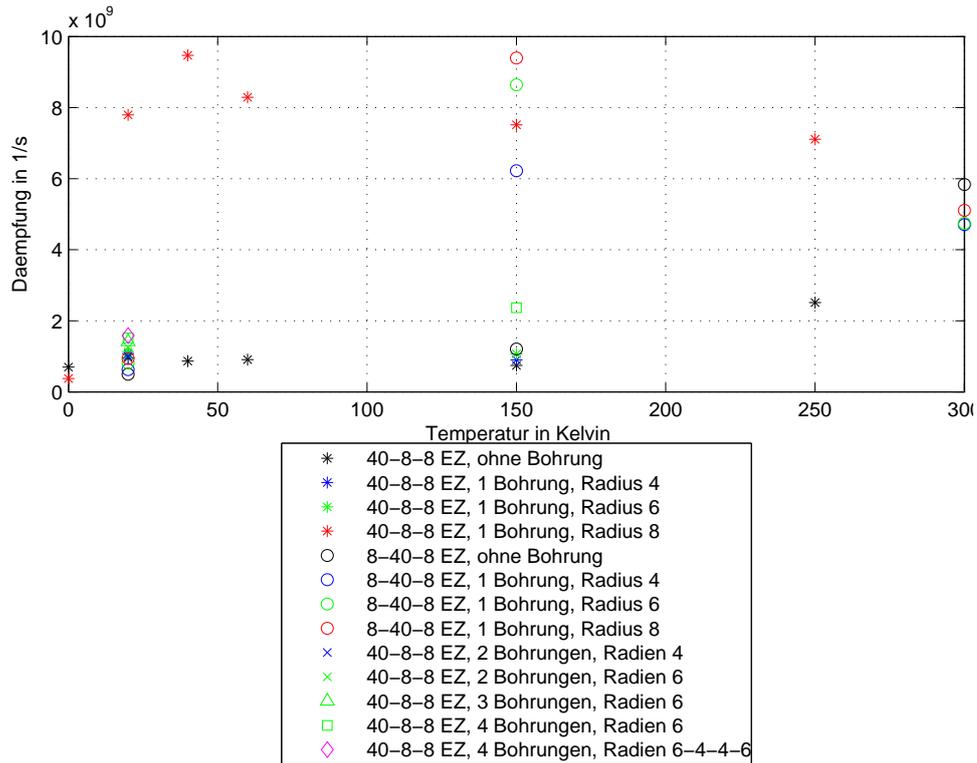


Abbildung 31: Dämpfungskoeffizienten der Martensit-Brücken; Radien der Bohrungen in Angström

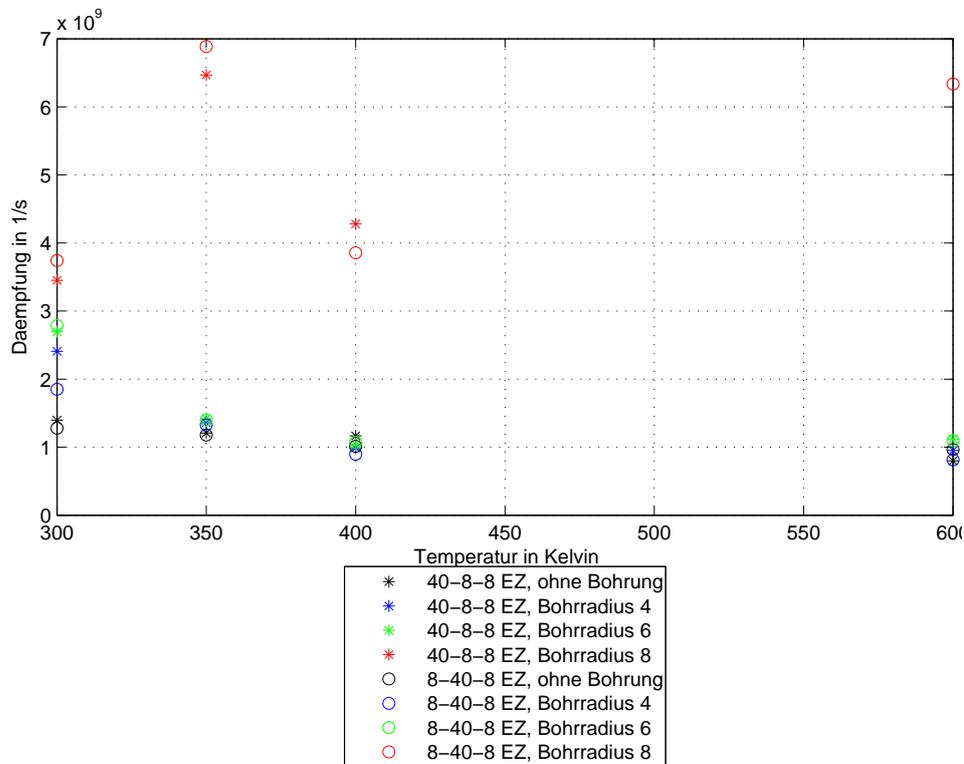
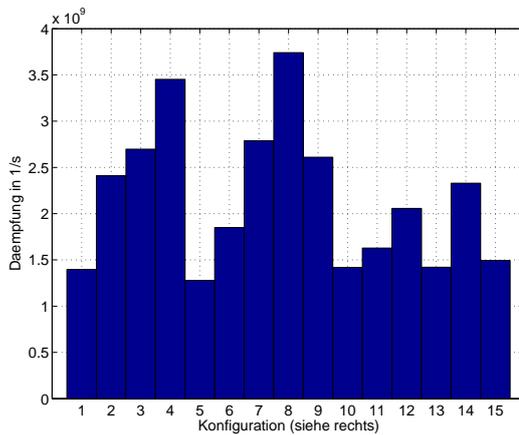


Abbildung 32: Dämpfungskoeffizienten der Austenit-Brücken ohne Bohrung und mit einer Bohrung; Bohrungsradius in Angström

Auch bei den Austenit-Brücken in Abbildung 32 sind die Dämpfungen der Konfigurationen mit 8 Angström als Bohrungsradius mit Abstand am größten. Für die Simulationen mit mehreren Bohrungen bei 300 Kelvin wurde eine eigene Abbildung erstellt (Abbildung 33).



1. 40-8-8 EZ, ohne Bohrung
2. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 4
3. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 6
4. 40-8-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 8
5. 8-40-8 EZ, ohne Bohrung
6. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 4
7. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 6
8. 8-40-8 EZ, 1 mittige Bohrung, Radius 8
9. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen, Radius 6
10. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen von außen, Radius 6
11. 8-40-8 EZ, 2 Bohrungen asymmetrisch, Radius 6
12. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen entlang der langen Achse, Radius 4
13. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen von außen, Radius 4
14. 8-40-8 EZ, 10 Bohrungen asymmetrisch, Radius 4
15. 8-40-8 EZ, 5 Bohrungen an ausgezeichneten Stellen, Radius 6

Abbildung 33: Dämpfungskoeffizienten der Austenit-Brücken bei 300 Kelvin; Abkürzung EZ steht für Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström

Die einzelnen Werte der Frequenzen und Dämpfungen werden in den Tabellen 4 und 5 nochmals numerisch angegeben, um auch den Vergleich zwischen den Werten zu ermöglichen, die in den Schaubildern nicht klar unterscheidbar waren.

Tabelle 4: Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Martensit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene

Abmessungen in EZ	Bohrungen	T [K]	Frequenz in GHz	Dämpfung in 1/s
40-8-8	keine	0	36.089967	6.9830184e+008
		20	35.563723	9.5736689e+008
		40	34.909685	8.6710060e+008
		60	34.261250	9.0844359e+008
		150	31.456076	7.4459205e+008
		250	28.489962	2.5127572e+009
40-8-8	1×4 Å, mittig	20	36.157300	1.0736197e+009
		150	31.949975	8.9855281e+008

Tabelle 4: Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Martensit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene

Abmessungen in EZ	Bohrungen	T [K]	Frequenz in GHz	Dämpfung in 1/s
40-8-8	1×6 Å, mittig	20	36.225618	1.1337907e+009
		150	32.101457	1.0678568e+009
40-8-8	1×8 Å, mittig	0	35.832198	3.7380140e+008
		20	35.250587	7.7941111e+009
		40	34.872726	9.4722488e+009
		60	33.121335	8.2874980e+009
		150	28.495234	7.5153342e+009
		250	19.880286	7.1071227e+009
8-40-8	keine	150	63.110466	1.2048538e+009
		300	29.490218	5.8366135e+009
8-40-8	1×4 Å, mittig	150	57.200463	6.2236411e+009
		300	28.161700	4.7080604e+009
8-40-8	1×6 Å, mittig	150	55.019326	8.6390634e+009
		300	26.373037	4.7446346e+009
8-40-8	1×8 Å, mittig	150	54.116850	9.3967054e+009
		300	27.154534	5.1052641e+009
40-8-8	2×4 Å, bei (±20, 0) Å	20	36.431974	9.9953513e+008
40-8-8	2×6 Å, bei (±20, 0) Å	20	36.511579	1.2598863e+009
40-8-8	3×6 Å bei (±20, 0) Å, (0, 0) Å	20	37.865675	1.4126377e+009
40-8-8	4×6 Å, bei (±10, 0) Å, (±30, 0) Å	20	37.647583	1.5190611e+009
		150	32.908843	2.3694410e+009
40-8-8	2×4 Å bei (±10, 0) Å, und 2×6 Å bei (±30, 0) Å	20	37.123202	1.5839708e+009

Tabelle 5: Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Austenit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene

Abmessungen in EZ	Bohrungen	T [K]	Frequenz in GHz	Dämpfung in 1/s
40-8-8	keine	300	25.767709	1.3965531e+009
		350	25.641201	1.2070944e+009
		400	25.386413	1.1670671e+009
		600	24.863567	7.9761398e+008
40-8-8	1×4 Å, mittig	300	25.541703	2.4081681e+009
		350	25.742645	1.3586845e+009
		400	25.616768	9.8881338e+008
		600	24.644114	9.5211690e+008
40-8-8	1×6 Å, mittig	300	25.711675	2.6970346e+009
		350	25.883924	1.4199332e+009
		400	25.710898	1.0364333e+009
		600	25.213792	1.1158982e+009
40-8-8	1×8 Å, mittig	300	24.596412	3.4521594e+009
		350	22.643725	6.4673621e+009
		400	24.623727	4.2801222e+009
8-40-8	keine	300	25.798815	1.2770342e+009
		350	25.692404	1.1774530e+009
		400	25.376769	1.0128866e+009
		600	24.873011	9.6381774e+008
8-40-8	1×4 Å, mittig	300	25.564457	1.8502247e+009
		350	25.717889	1.3258223e+009
		400	25.569832	8.9570755e+008
		600	25.137501	8.1596243e+008
8-40-8	1×6 Å, mittig	300	25.578155	2.7867980e+009
		350	25.859026	1.3996434e+009
		400	25.654079	1.0714326e+009
		600	23.776582	1.0941423e+009
8-40-8	1×8 Å, mittig	300	24.825863	3.7412764e+009
		350	23.023440	6.8876667e+009
		400	21.667142	3.8558038e+009
		600	22.255575	6.3358278e+009
8-40-8	2×6 Å, bei (±25,0) Å	300	25.890090	2.6099507e+009
8-40-8	10×4 Å, bei (±7.5, 0) Å, (±22.5, 0) Å, (±37.5, 0) Å, (±52.5, 0) Å und (±67.5, 0) Å	300	24.170880	2.0571305e+009

Tabelle 5: Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Austenit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene

Abmessungen in EZ	Bohrungen	T [K]	Frequenz in GHz	Dämpfung in 1/s
8-40-8	2×6 Å, bei (25.0, 1.5) Å und (-25.0, -1.5) Å	300	25.439786	1.6280372e+009
8-40-8	10×4 Å, bei (7.5, 2.0) Å, (22.5, 2.0) Å, (37.5, 2.0) Å, (52.5, 2.0) Å, (67.5, 2.0) Å, (-7.5, -2.0) Å, (-22.5, -2.0) Å, (-37.5, -2.0) Å, (-52.5, -2.0) Å und (-67.5, -2.0) Å	300	24.206984	2.3296269e+009
8-40-8	2×6 Å, bei (0, ±12.0) Å	300	24.705850	1.4192560e+009
8-40-8	10×4 Å bei (-24.0, ±12.0) Å, (-12.0, ±12.0) Å, (0.0, ±12.0) Å, (12.0, ±12.0) Å und (24.0, ±12.0) Å	300	25.222679	1.4206598e+009
8-40-8	5×6 Å bei (0.0, 0.0) Å, (27.0, ±12.0) Å (-27.0, ±12.0) Å	300	25.227696	1.4940457e+009

4.2 Genaueres Schwingungsverhalten

Um das Schwingungsverhalten der Nanobrücke genauer zu untersuchen, wird nun die in der Simulation berechnete Kette von Schwerpunkten einzelner Scheiben verwendet. Es wird die Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung bei 150 Kelvin ausgewählt. Nun kann man aus den zeitlichen Verläufen der Koordinaten der 35 Schwerpunkte ein dreidimensionales Bild der Schwingung der Nanobrücke in der x-z-Ebene erstellen, wobei die dritte Richtung im Bild für die Zeit steht. Das so entstandene Bild ist in Abbildung 34 zu finden. Dabei wurden nur die ersten 500.000 von 1.000.000 Zeitschritten eingezeichnet, damit die Schwingungen besser zu erkennen sind.

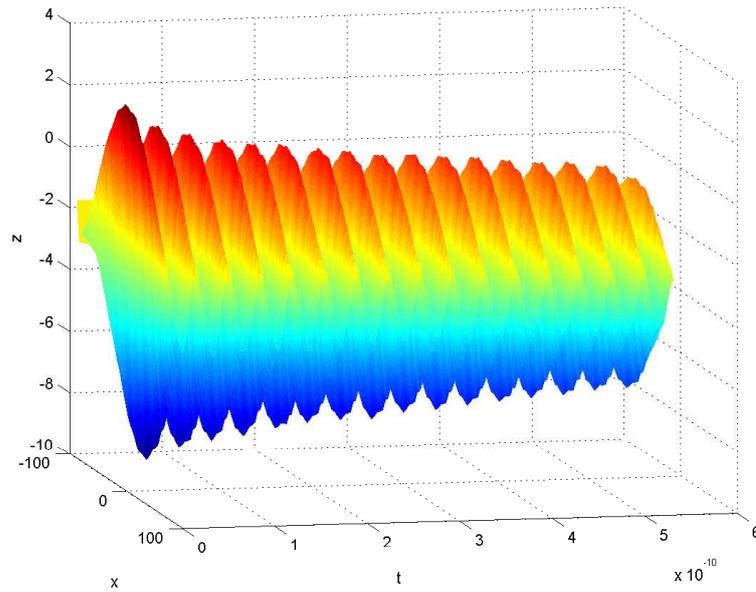


Abbildung 34: 40-8-8 Einheitszellen, Martensit-Brücke; Schwingung der von 35 entlang der langen Achse der Brücke liegenden Schwerpunkte; t ist Zeit in Sekunden, x und z Ortskoordinaten in Angström

Es wird nun eine eindimensionale Fourier-Transformation entlang der Zeitachse für jeden der 35 Schwerpunkte durchgeführt, um herauszufinden, ob weitere Schwingungsmoden vorhanden sind. Dazu wurde die in Matlab implementierte Funktion *fft* (Fast-Fourier-Transform) verwendet. Man erhält zunächst die in Abbildung 35 (links) dargestellte Fläche.

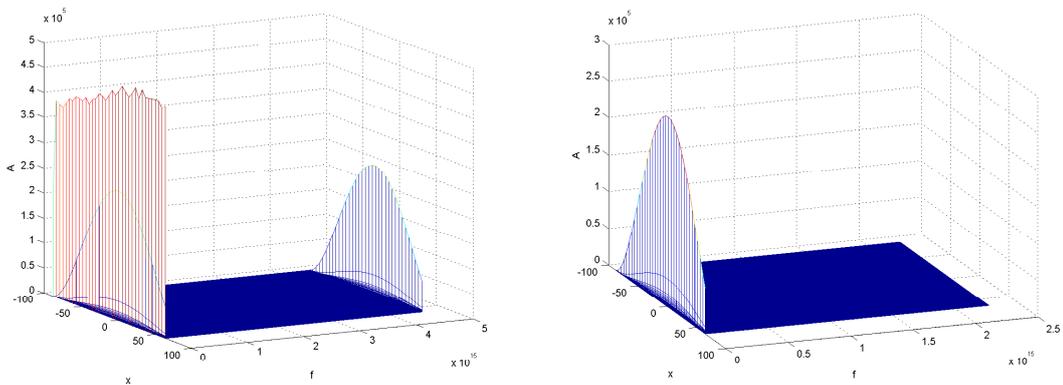


Abbildung 35: 40-8-8 Einheitszellen, Martensit-Brücke; Betrag der Fouriertransformation über die Zeit von den Schwingungen der einzelnen Schwerpunkte; f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)

Der Wert $A(f, j)$ ist gegeben durch die Fourier-Transformation der Bewegung eines Schwer-

punkts $S_j(t)$ der j -ten Scheibe im Resonator:

$$A(f, j) = \frac{1}{2\pi T} \int_0^T \exp(2\pi i f t) S_j(t) dt \quad (24)$$

Der Koordinatenschwerpunkt $S_j(t)$ wurde dabei berechnet mit:

$$S_j(t) = \frac{1}{N_j} \sum_{k=1}^{N_j} x_k(t) \quad j = 1, \dots, 35$$

x_k sind die Orte der einzelnen Teilchen, N_j die Anzahl der Teilchen in der j -ten Scheibe und T die Zeit, über die die Simulation durchgeführt wird.

Die rötliche Wand in Abbildung 35 ist dadurch bedingt, dass die Bewegungen der Schwerpunkte in Abbildung 34 nicht genau um die 0 herum schwingen, sondern in z -Richtung versetzt sind. Außerdem ist das restliche Bild der hier angewandten Fourier-Transformation symmetrisch um die Mitte in f -Richtung, sodass nur die erste Hälfte in f -Richtung gezeigt werden muss. Was übrig bleibt ist in Abbildung 35 (rechts) zu sehen.

Hier steckt noch keine neue Information. Es ist zu sehen dass die Brücke im Wesentlichen mit nur einer Frequenz schwingt und dass sie dabei in der Mitte, also bei ca. 0 \AA , am weitesten ausgelenkt wird. Die anderen Schwingungen sind im Vergleich dazu so klein, dass sie in der dunkelblauen Fläche nicht auszumachen sind. Um die höheren Schwingungsmoden trotzdem sichtbar zu machen werden im Folgenden kleinere Frequenzintervalle aus Abbildung 35 (rechts) herausgeschnitten und mit anderem Maßstab in A -Richtung dargestellt. Dadurch werden auch kleinere Unebenheiten in der sonst blauen Fläche sichtbar gemacht und vergrößert dargestellt. Man erwartet, dass die höheren Schwingungsmoden bei ganzzahligen Vielfachen der Frequenz der ersten Schwingungsmoden angesiedelt sind.

Zunächst werden in Abbildung 35 (rechts) nur die ersten 40 Einträge in Richtung Frequenz f betrachtet (siehe Abbildung 36).

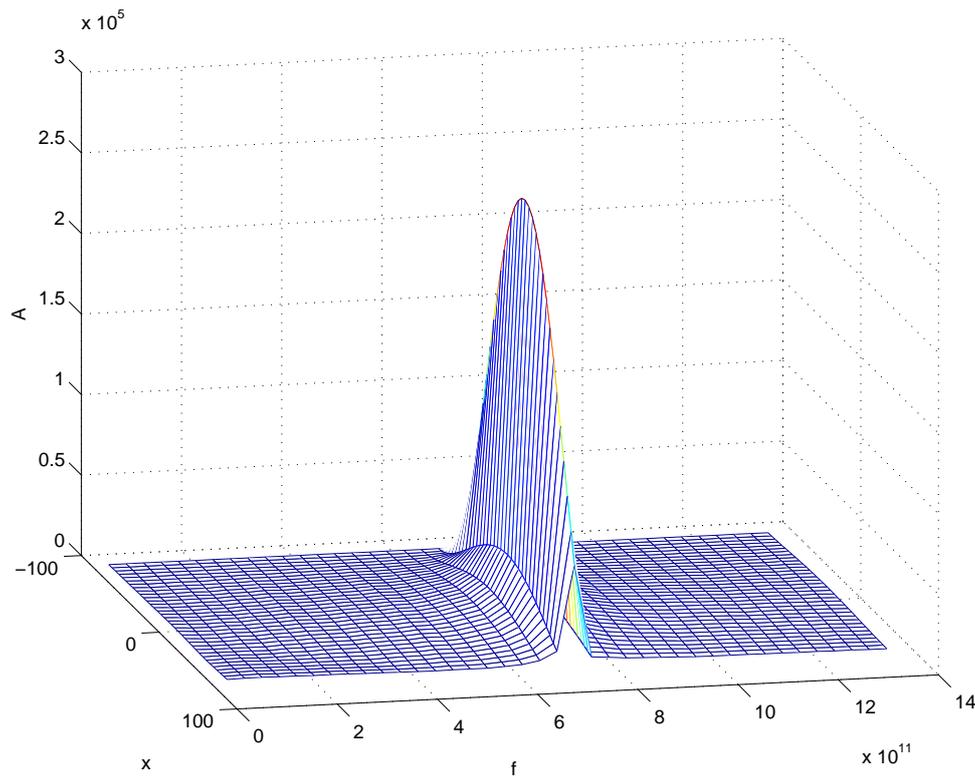


Abbildung 36: Vergrößerung von Abbildung 35, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)

Hier sieht man nur genau die erste Schwingungsmode. Betrachtet man jedoch auf die gleiche Weise in f -Richtung die Einträge 40 bis 80, sodass eine andere Skala in A -Richtung verwendet werden kann, so erhält man Abbildung 37. Wie erwartet ist bei ungefähr der doppelten Frequenz von der ersten Schwingungsmode die zweite Schwingungsmode angesiedelt. Diese zeichnet sich mit zwei Wellenbäuchen aus und einem Knotenpunkt in der Mitte. Sie ist jedoch um zwei Größenordnungen kleiner vertreten als die erste Schwingungsmode.

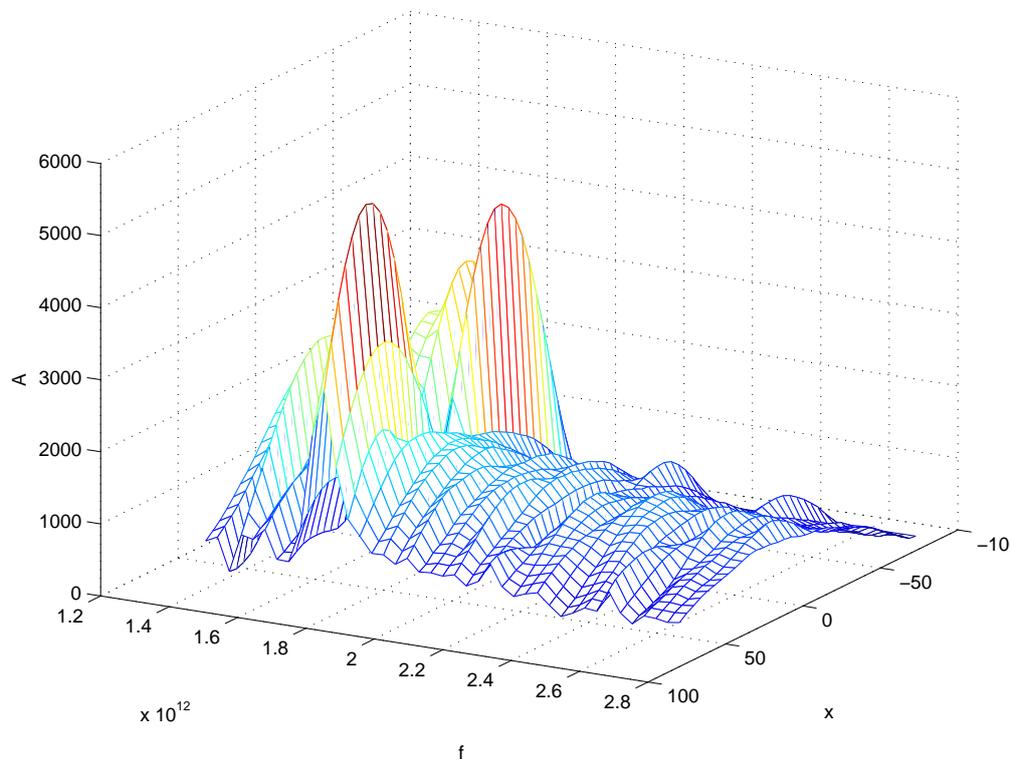


Abbildung 37: Vergrößerung von Abbildung 35 an einer anderen Stelle, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)

Betrachtet man die Fourier-Transformierten im nächsten Frequenzintervall (Einträge 80 bis 120), so findet man wie erwartet drei Wellenbäuche, die für die dritte Schwingungsmode charakteristisch sind (Abbildung 38). Dieses Vorgehen kann fortgesetzt werden, um weitere Schwingungsmoden zu finden. Damit ist gezeigt, dass außer der ersten Schwingungsmode noch weitere vorhanden sind, die jedoch in viel kleineren Größenordnungen vertreten sind.

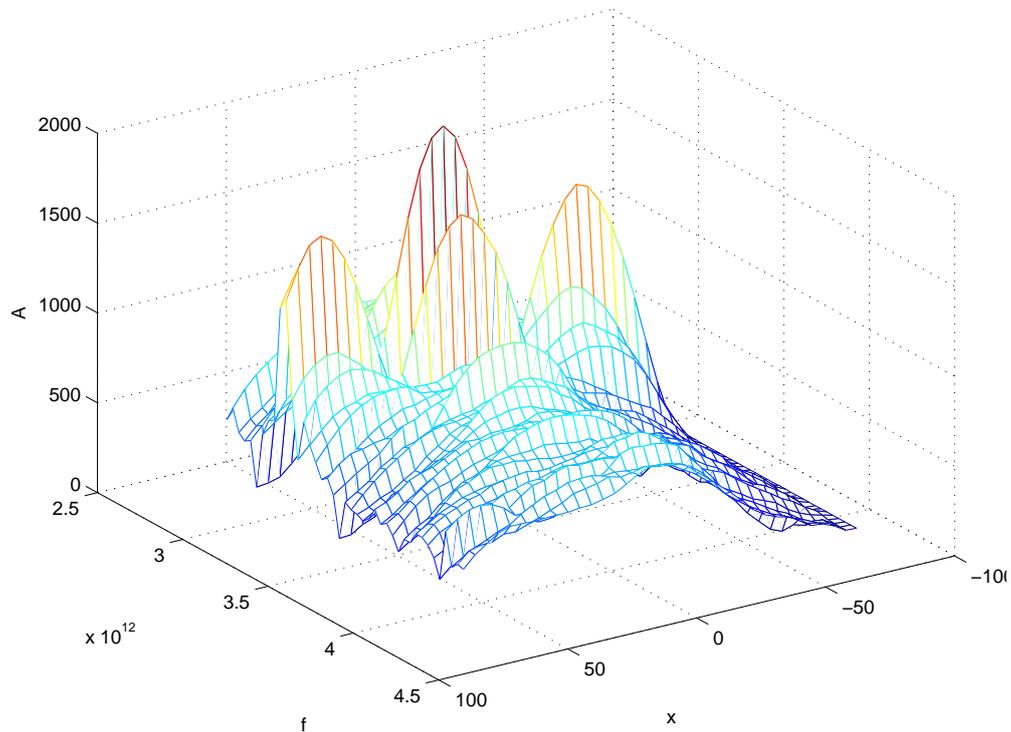


Abbildung 38: Vergrößerung von Abbildung 35 an einer weiteren Stelle, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)

Geht man in den Hochfrequenzbereich, so verschwinden die Wellenbäuche und man erhält die Schwingungen der Schwerpunkte, die durch die einzelnen Teilchenbewegungen verursacht werden. Man betrachte dazu Abbildung 39.

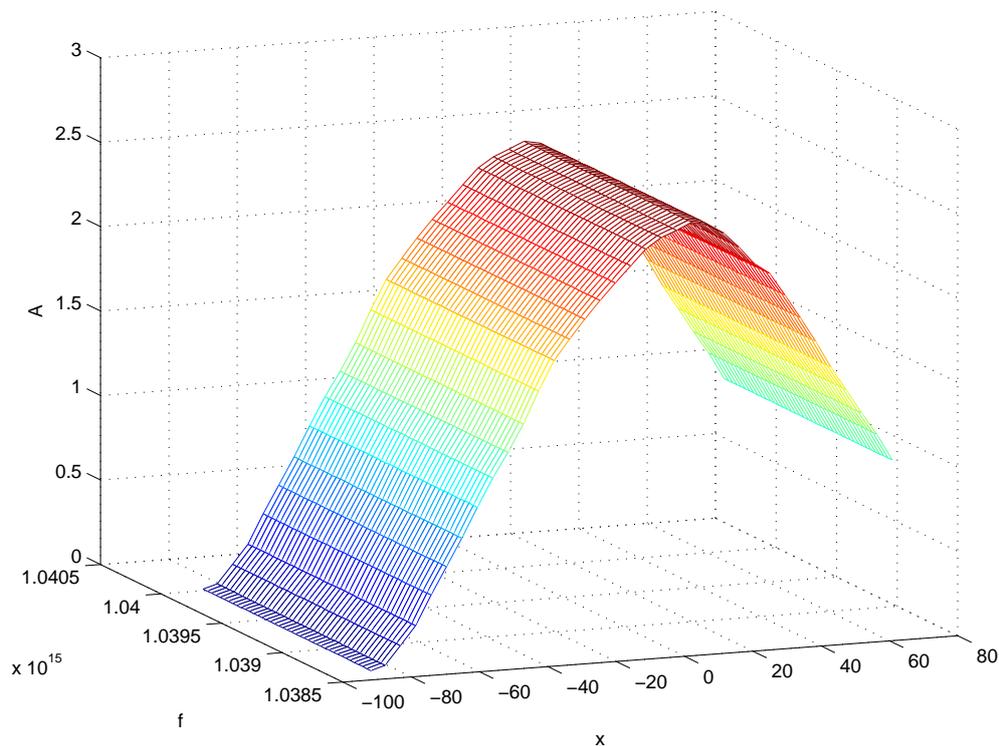


Abbildung 39: Vergrößerung von Abbildung 35 im Hochfrequenzbereich, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)

Natürlich ist die Amplitude hier im Vergleich zu den Schwingungsmoden des gesamten Resonators verschwindend klein. Interessant ist jedoch die Verteilung entlang des Resonators, also entlang der x -Achse. Mittig scheint es mehr Fluktuationen zu geben als weiter außen.

Zunächst muss jedoch geklärt werden, wie die Werte in Abbildung 39 zu verstehen sind. Da die Fourier-Transformation selbst eine lineare Abbildung ist, lässt sich Gleichung (24) auch als Summe von den Fourier-Transformationen der Bewegungen der einzelnen Teilchen geteilt durch ihre Anzahl darstellen:

$$A(x, j) = \frac{1}{N_j} \sum_{k=1}^{N_j} \left[\frac{1}{2\pi T} \int_0^T \exp(2\pi i f t) x_k(t) dt \right] \quad j = 1, \dots, 35 \quad (25)$$

Sieht man diese Gleichung als durchschnittliche Fourier-Transformation der einzelnen zur j -ten Scheibe gehörenden Teilchen an, so kann man daraus folgern, dass die Teilchen in der Mitte des Resonators (bzgl. x -Richtung) bei der Frequenz f mit größerer Amplitude zittern als weiter außen. In harmonischer Näherung würde dies eine Erhöhung der Maximalgeschwindigkeiten bedeuten und somit eine Erhöhung der Temperatur. Es bietet sich deshalb eine Untersuchung der Temperaturverteilung in der x - z -Ebene an.

4.3 Temperaturverteilung im Nanoresonator

Es wird nun versucht, die in den Grundlagen angesprochenen Temperaturunterschiede durch Verformungen des Resonators während der Schwingung sichtbar zu machen. Da eventuell sehr kleine Temperaturdifferenzen zu erwarten sind, die auch kleiner als Temperaturfluktuationen sein können, werden als Simulationsobjekte zwei Martensit-Nanobrücken mit 40-8-8 Einheitszellen bei 0 Kelvin ausgewählt. Um den Einfluss der Bohrung zu untersuchen wird in einer der beiden Nanobrücken eine mittige Bohrung mit 8 Å Bohrungsradius gesetzt und die andere Brücke wird ohne Bohrung simuliert.

Es wird dem üblichen Ablauf mit allen vorbereitenden Schritten und gleicher auslenkender Kraft (etc.) gefolgt. Zusätzlich wird nun jedoch die Nanobrücke im unausgelenkten Zustand in x-z-Richtung in $20 \times 8 = 160$ Gitterzellen aufgeteilt und der Index jedes Teilchens, das in die jeweilige Gitterzelle gehört, gespeichert. Während der Schwingung können die Teilchen wieder zur Gitterzelle des Resonators im unausgelenkten Zustand zugeordnet werden.

Zu jedem Zeitschritt der Schwingung wird für jede Gitterzelle der Schwerpunkt und die Schwerpunktgeschwindigkeit der enthaltenen Teilchen berechnet. Nun wird die Schwerpunktgeschwindigkeit einer jeden Zelle von den Geschwindigkeiten der in der Zelle enthaltenen Teilchen abgezogen. Die so erhaltenen Geschwindigkeiten der einzelnen Teilchen können nun in Gleichungen (12) und (13) eingesetzt werden, um einen Wert für die Temperatur in der jeweiligen Zelle zu erhalten, der unabhängig vom Schwingungszustand des Resonators ist.

Als Resultat erhält man ein Temperaturfeld mit einer Auflösung, die durch die Anzahl der (hier 160) Gitterzellen bestimmt ist. Die Abbildungen 40 bis 47 zeigen die so erhaltenen Temperaturverteilungen der beiden Martensit-Brücken zu verschiedenen Zeitpunkten während der Schwingung. Als Zeitintervall, über das die Temperaturen durch Mittelung berechnet wurden, wurden hier jeweils 200 Zeitschritte verwendet.

4.3.1 Temperaturverteilung bei Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung

Die Brücke hatte vor dem Auslenken eine Temperatur von nahezu 0 Kelvin. Beim Auslenken wurde Energie zugeführt. Die Stellen, an denen die zugeführte Energie zu Temperaturerhöhungen führte sind in Abbildung 40 deutlich zu erkennen.

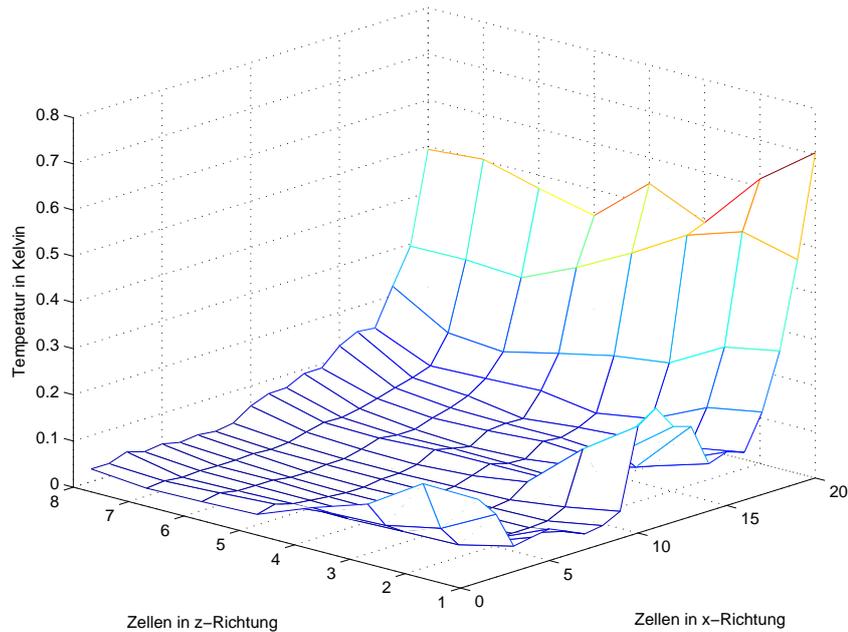


Abbildung 40: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Beginn der Schwingungssimulation; Auffällig ist, dass die Temperatur am rechten Ende des ausgelenkten Resonators angestiegen ist.

Die Temperaturverteilung, bei Erreichen des nächsten Umkehrpunkts, d.h. wenn die Brücke eine halbe Periode Schwingung hinter sich hat, ist in Abbildung 41 zu sehen. Dort gibt es bereits keine Stelle mehr im Resonator, bei der die Temperatur unter 0.1 Kelvin liegt.

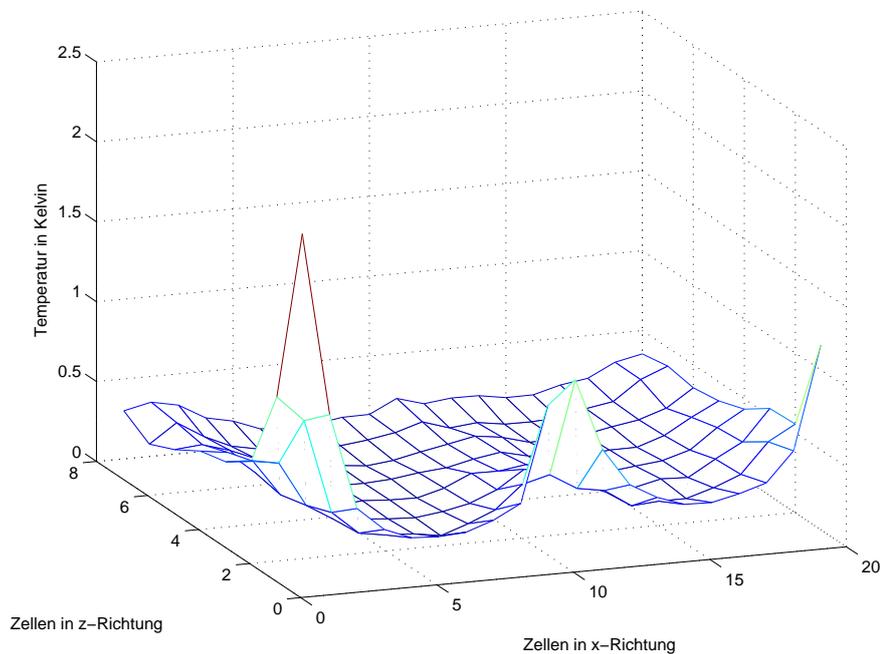


Abbildung 41: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Halbe Periode nach Beginn der Schwingung; Die Temperaturerhöhung am rechten Ende des Resonators ist zurückgegangen, jedoch zeigt sich nun am linken unteren Ende eine einzelne Stelle mit sehr hoher Temperatur. In der Mitte des Resonators hätte man genau an der gegenüber liegenden Stelle eine erhöhte Temperatur erwartet als in dieser Abbildung zu sehen.

Nach der ersten Periode ist die Temperatur an den Enden des Resonators bereits so weit angestiegen, dass die Inhomogenitäten im restlichen Resonator nahezu untergehen (Abbildung 42). Die in z-Richtung unterste Schicht von Atomen scheint insgesamt eine stärkere Erwärmung zu erfahren als die anderen Atomschichten. Die Minimaltemperaturen befinden sich bei rund 0.2 Kelvin, womit deutlich wird, dass entweder überall Wärme produziert wird, oder dass sich die Temperatur mit der Zeit gleichmäßig verteilen kann.

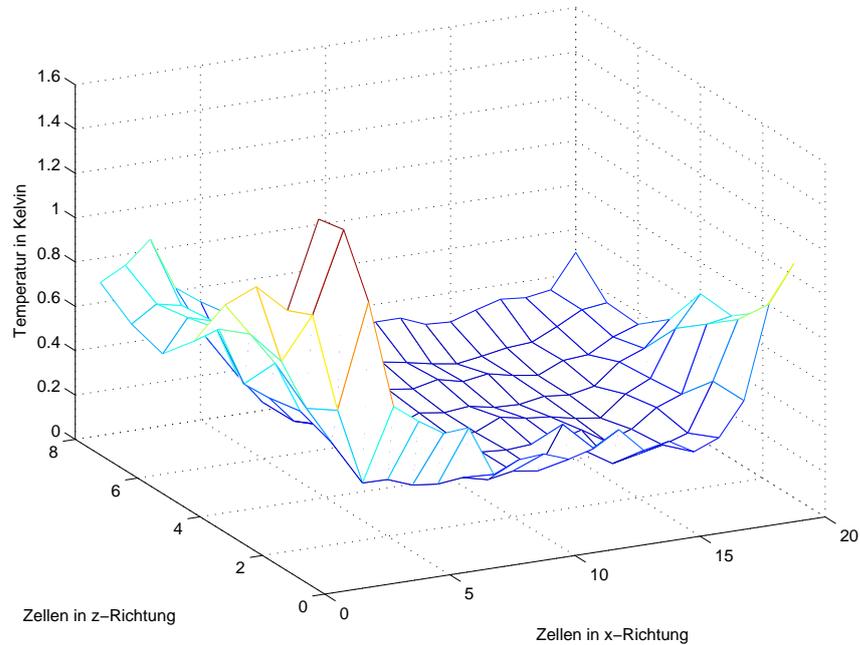


Abbildung 42: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Eine Periode nach Beginn der Schwingung

Macht man nun einen größeren Zeitschritt hin zu einem anderen Zeitpunkt mit maximaler Auslenkung der Nanobrücke in positive z-Richtung, so erhält man die in Abbildung 43 gezeigte Temperaturverteilung.

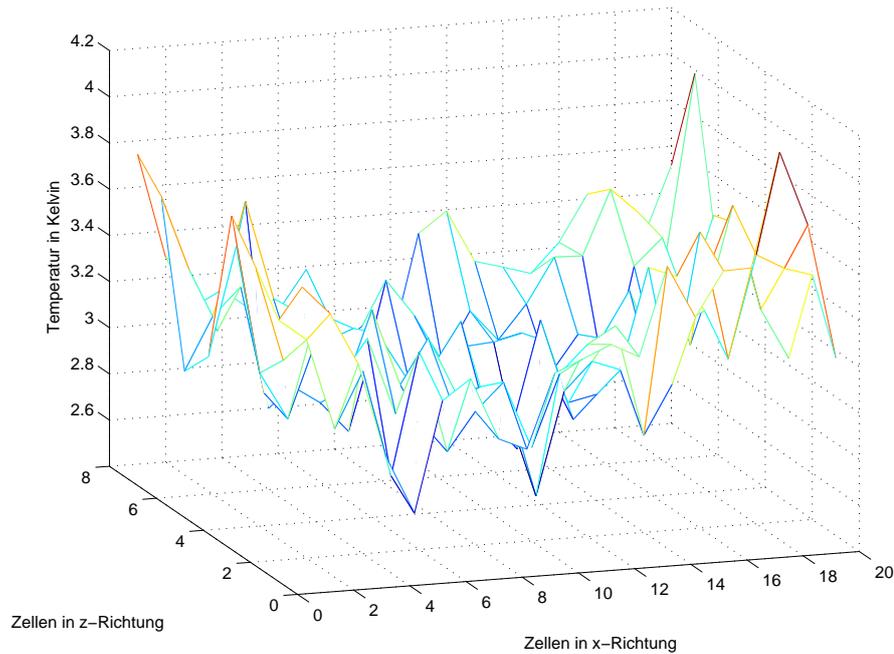


Abbildung 43: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: ca. 410000. Zeitschritt

Die Gesamttemperatur ist bereits auf 3.1 Kelvin angestiegen, wobei die Verteilung im Resonator nun das übliche fluktuierende Verhalten der Temperatur aufweist. Da mit jeder Schwingungsperiode nur ein geringer Betrag an Wärme entsteht, verschwindet der dadurch entstehende Temperaturunterschied zwischen den nun größeren Fluktuationen zwischen den einzelnen Zellen.

4.3.2 Temperaturverteilung bei Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung

Bei einem Bohrungsradius von 8 \AA in der nur 24 \AA hohen Nanobrücke ergeben sich um die Bohrung herum sehr dünne und empfindliche Stellen. Wie im Grundlagenteil beschrieben ergeben sich dort stärkere Temperaturunterschiede. Man betrachte dazu Abbildung 44.

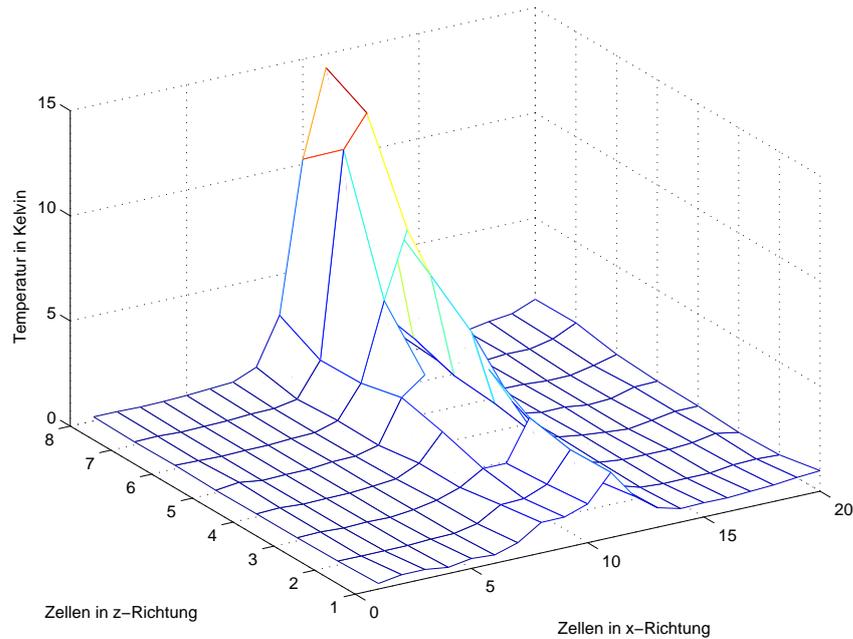


Abbildung 44: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Beginn der Simulation; Sehr starke Wärmeerzeugung!

Die Stelle, an der die Temperatur sogar auf rund 14 Kelvin ansteigt, befindet sich zwar mittig in x-Richtung, jedoch in z-Richtung auf oberen Seite des Resonators, die bei der momentanen Auslenkung gestreckt wird. Auf der anderen Seite, an der die Atome sitzen, die aufgrund der Verbiegung des Resonators ein geringeres Volumen zur Verfügung haben, nehmen die Teilchen, wie man in Abbildung 44 sieht, zwar auch eine höhere Temperatur an, jedoch ist diese viel geringer als bei ihren Nachbarn auf der gestreckten Seite.

Eine mögliche Ursache für diese Temperaturerhöhung bei Streckung kann eine sehr große relative Längenänderung sein, die die Teilstücke über und unter der Bohrung erfahren. Wird diese Längenänderung zu groß, so wird der Bereich, in dem der lineare relative Wärmeausdehnungskoeffizient α gilt, verlassen. Dadurch kann es nun auch sein, dass durch eine starke Verlängerung eines Teilstücks der Brücke eine Temperaturerhöhung induziert wird und keine Verringerung der Temperatur, wie es der lineare relative Wärmeausdehnungskoeffizient vorhersagen würde.

Nach einer halben Schwingungsperiode Simulationszeit wird ein weiterer Schnappschuss der Temperaturverteilung (wie alle anderen auch gemittelt über 200 Zeitschritte) untersucht, um zu sehen, ob nun auch auf der anderen Seite ein so starker Temperaturanstieg zu sehen ist (Abbildung 45).

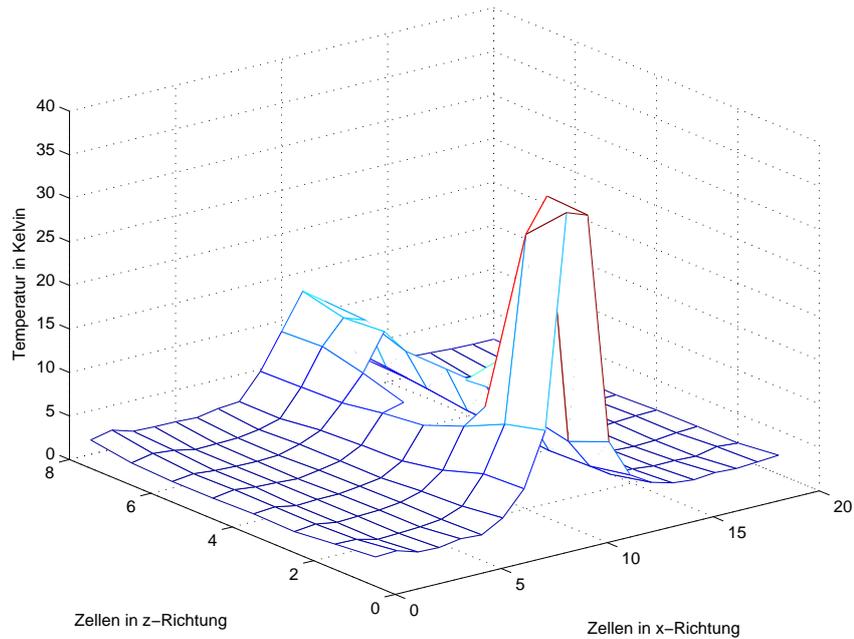


Abbildung 45: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Halbe Periode nach Beginn der Schwingung; Sehr starke Wärmeerzeugung!

Zum Zeitpunkt des ersten unteren Umkehrpunktes hat die Unterseite des Resonators mittig sogar eine Temperatur von rund 35 Kelvin. Insgesamt kann man bis zu diesem Zeitpunkt der Simulation sagen, dass trotz des großen Temperaturgefälles relativ wenig Wärmeenergie in die restlichen Bereiche des Resonators diffundieren konnte. Es wird viel schneller Wärme erzeugt als sie abtransportiert werden kann.

Beim Erreichen des nächsten Umkehrpunktes, also nach einer Schwingungsperiode Simulationszeit, sind die tiefsten Temperaturen im Resonator bei rund 2 Kelvin angekommen (Abbildung 46). Die Maximaltemperaturen befinden sich beide zwischen 15 und 20 Kelvin.

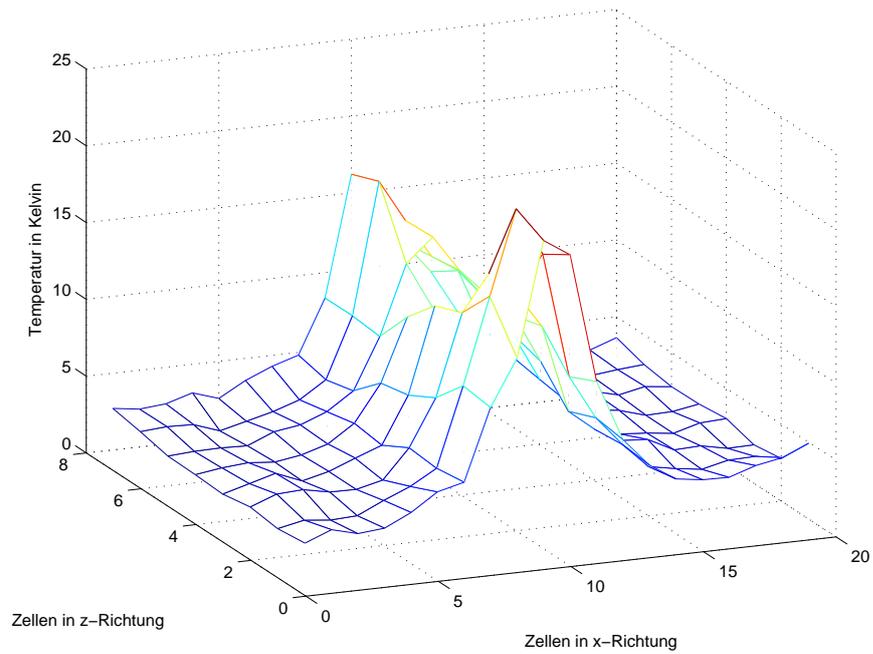


Abbildung 46: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Ganze Periode nach Beginn der Schwingung; Sehr starke Wärmeerzeugung!

Da die Maximaltemperatur etwas gesunken ist, kann man annehmen, dass sich mit langsamem Ansteigen der Temperatur in den kalten Bereichen auch die Wärmeleitfähigkeit des Materials langsam erhöht. Betrachtet man die Temperaturverteilung zu einem viel späteren Zeitpunkt der Simulation (Abbildung 47), so erkennt man, dass die um die Bohrung herum erzeugte Wärme schon bei einer Temperatur von rund 7.5 Kelvin schneller abtransportiert werden kann als sie erzeugt wird.

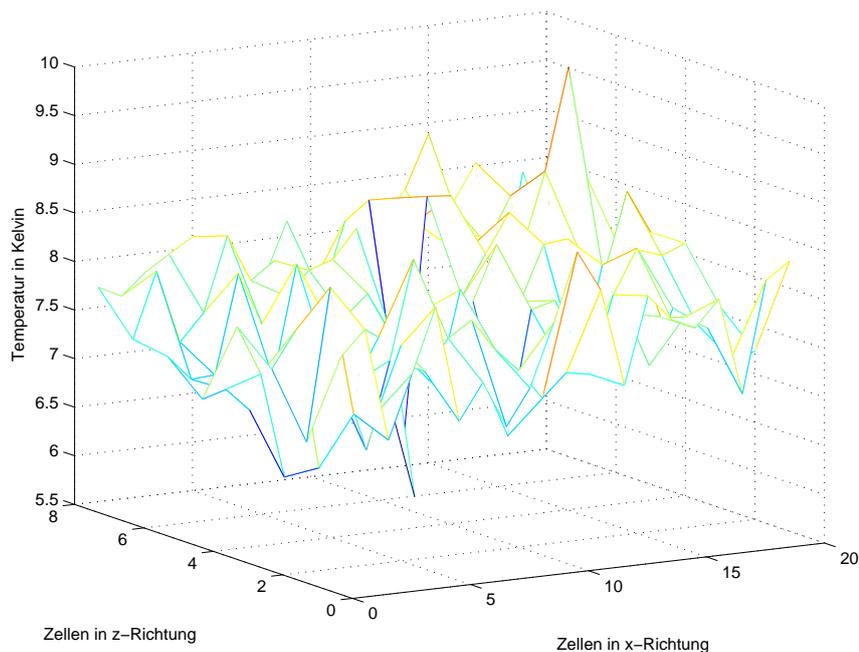


Abbildung 47: Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: ca 357800. Zeitschritt ; Sehr starke Wärmeerzeugung!

Folglich stellt sich wie schon im Fall ohne Bohrung eine bis auf Fluktuationen homogene Temperaturverteilung im Nanoresonator ein, sobald sich die sonst kalten Zonen langsam erwärmt haben. Wie erwartet ist die Wärmeleitfähigkeit selbst temperaturabhängig.

Damit konnte gezeigt werden, dass sich in der Nanostruktur während der Schwingung ein durch Materialverformung induzierter Temperaturgradient einstellt, der mit steigender Gesamttemperatur weniger stark ausfällt, da sich die Wärme dann schneller verteilen kann.

4.4 Phasenübergang bei 250 Kelvin

Schon bevor die erste Schwingungsperiode der Martensit-Brücke ohne Bohrung bei 250 Kelvin Anfangstemperatur endet, hat sich die Schwingungsamplitude auf unter ein Drittel der Anfangsauslenkung verringert (Abbildung 2). Da sich die Gesamttemperatur während dieser ersten Schwingung kurzzeitig relativ stark verringert, wird nun die Konfiguration der Teilchen auf einen eventuellen Phasenübergang untersucht (Programm von Daniel Mutter [7]).

Es gibt bereits Arbeiten, in denen gezeigt wurde, dass ein Phasenübergang in Formgedächtnislegierungen zu sehr hohen Dämpfungen führen kann [12] und [13].

Während der Simulation der Schwingung wurden die Teilchenkoordinaten alle 5000 Zeitschritte gespeichert. Aus den Teilchenkoordinaten kann man mit dem von Daniel Mutter geschriebenen Programm ([7] und [14]) einen Ortsabhängigen Strukturparameter berechnen und diesen farblich in einer Abbildung der momentanen Brückengeometrie hervorheben. Dazu wird die Farbskala in Abbildung 48 verwendet, um die Martensit-Phase (B19') in grün und die Austenit-Phase (B2) in rot hervorzuheben.

Da hier jeweils nur ein Schnappschuss untersucht wird, kann es sein, dass die Phase auf Grund der Brownschen Molekularbewegung nicht exakt einzuordnen ist, weswegen auch gelbe oder orangene Farbtöne auftreten. Man kann sich jedoch an den umgebenden Teilchen orientieren, da

der Strukturübergang meist an der Grenzfläche zwischen zwei bestehenden Strukturen vollzogen wird.

Auf Abbildungen 49 bis 69 ist zu erkennen, dass sich zu Beginn der Simulation, wenn die Auslenkung noch groß ist, ein großes Gebiet der Austenit-Struktur am linken Ende des Resonators ausbildet, das durch die Scherung des Materials induziert wurde. Gleichzeitig ergibt sich mittig auf der Unterseite ebenfalls ein Strukturübergang. Dass es ausgerechnet an dieser Stelle, wo auch eine sehr starke Verbiegung des Resonators vorherrscht, zur Strukturänderung kommt, lässt auf eine durch Stress induzierte Temperaturerhöhung schließen. An solchen Stellen ist das Ausbilden des Ansatzes eines Strukturübergangs also wahrscheinlicher.

Bei Zeitschritt 10000 (Abbildung 51) hat sich das Gebiet der Austenit Phase in der Mitte des Resonators in einer zur y-z-Ebene parallelen Scheibe angeordnet. Dies wird sich im weiteren Verlauf als günstigste Konfiguration für kleinere Austenit-Gebiete im Resonator herausstellen.

Nach ungefähr einer halben Schwingungsperiode (Abbildung 53) erhält man am rechten Ende des Resonators ein anderes größeres durch Spannungen induziertes Gebiet in der Austenit-Struktur, wohingegen das linke Ende des Resonators nahezu vollständig in die Martensit-Struktur zurücktransformiert wurde.

Im weiteren Verlauf stellen sich drei bleibende, parallel zur y-z-Ebene liegende Scheiben in der Austenit-Struktur ein. Weil nun keine größeren Strukturumwandlungen mehr stattfinden, wird die Schwingung, wie Abbildung 2 zeigt, viel schwächer gedämpft als zu Beginn der Simulation, wenn die ständigen Strukturänderungen für Energieumwandlungen sorgen.

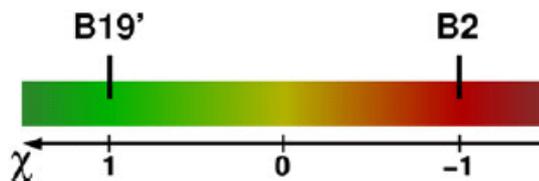


Abbildung 48: Farbskala für den Strukturparameter χ aus [14]

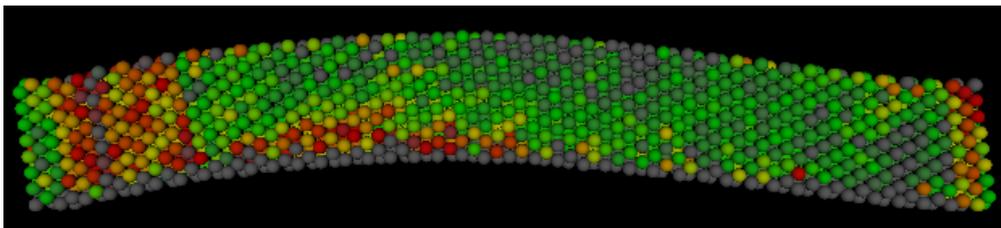


Abbildung 49: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 0

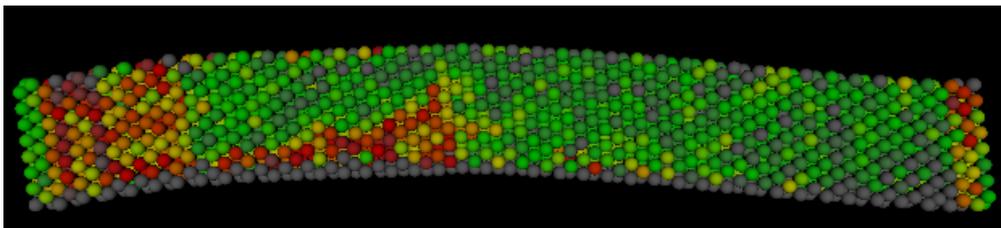


Abbildung 50: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 5000

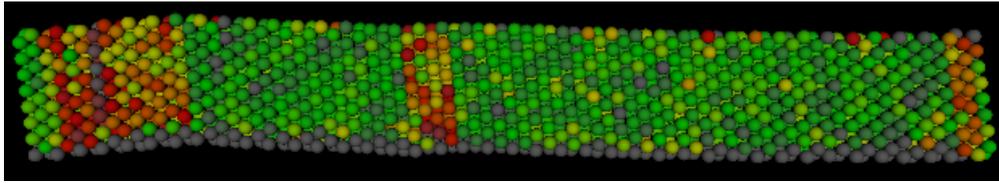


Abbildung 51: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 10000

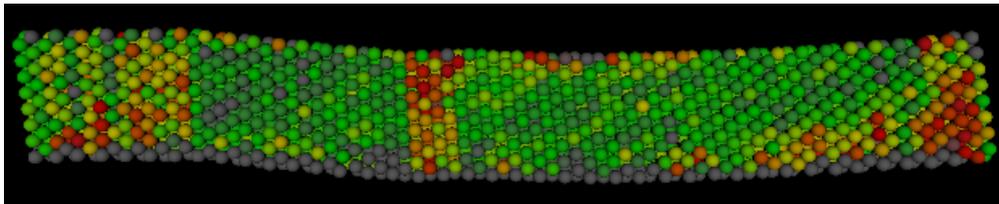


Abbildung 52: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 15000

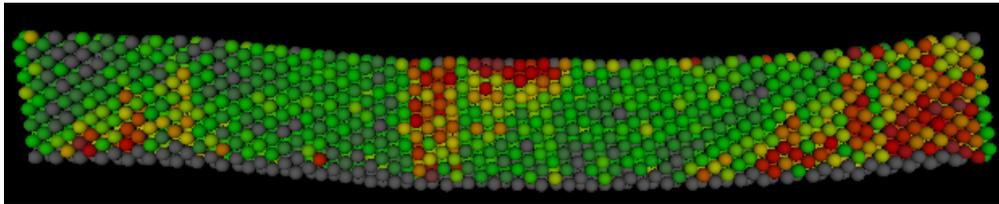


Abbildung 53: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 20000

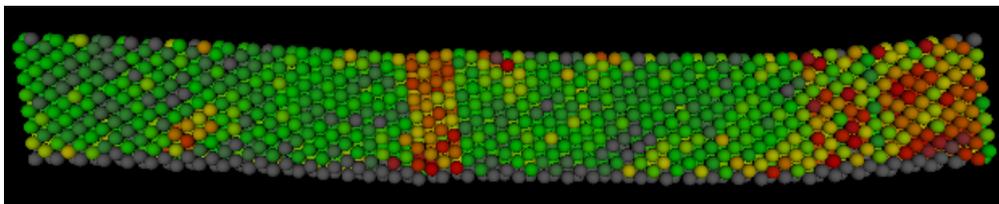


Abbildung 54: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 25000

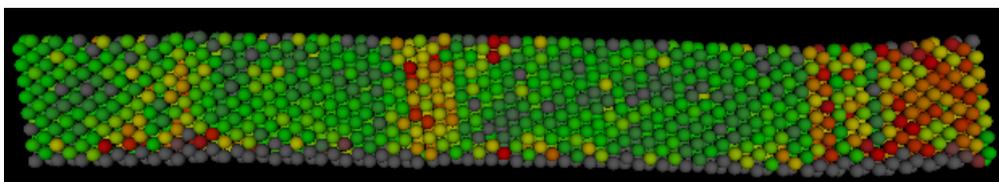


Abbildung 55: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 30000

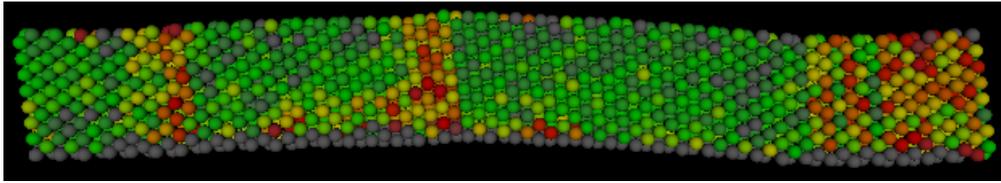


Abbildung 56: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 35000

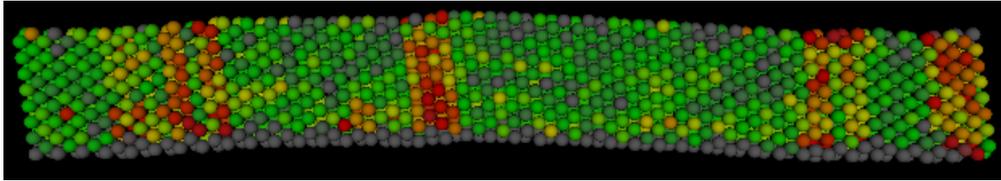


Abbildung 57: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 40000

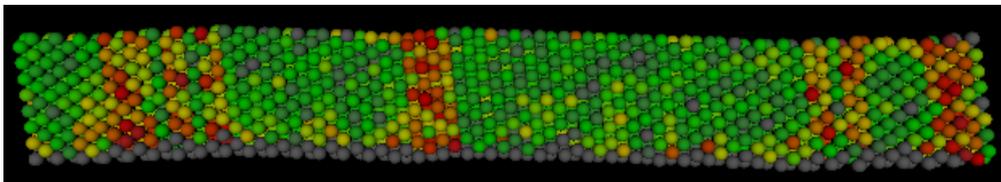


Abbildung 58: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 45000

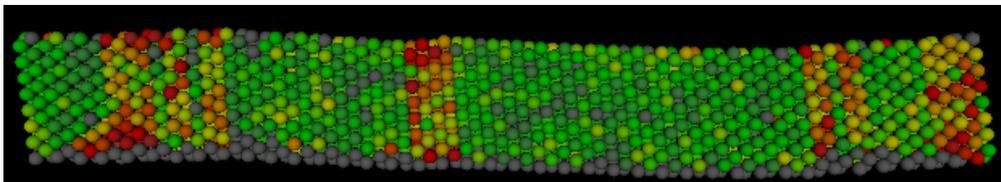


Abbildung 59: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 50000

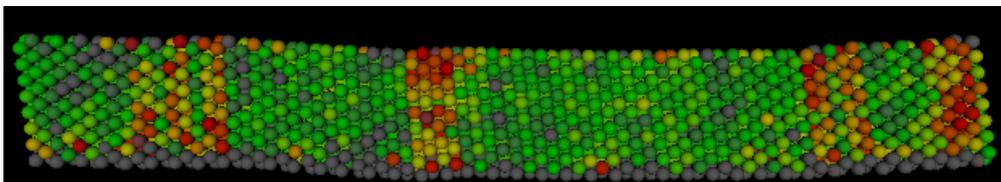


Abbildung 60: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 55000

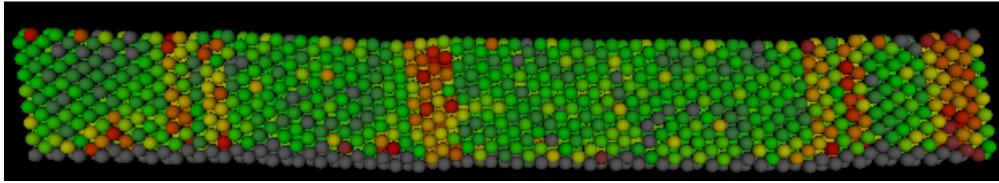


Abbildung 61: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 60000

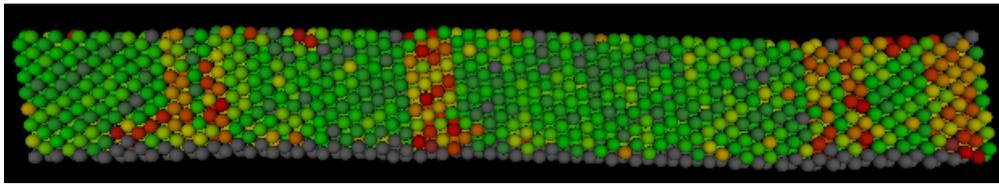


Abbildung 62: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 65000

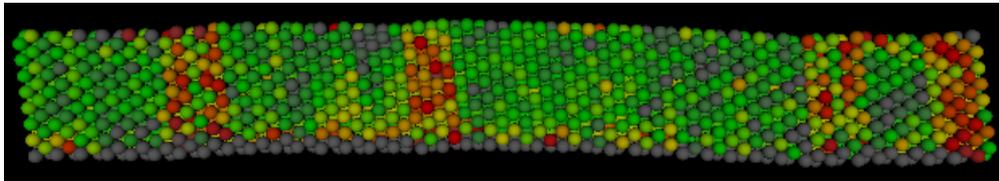


Abbildung 63: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 70000

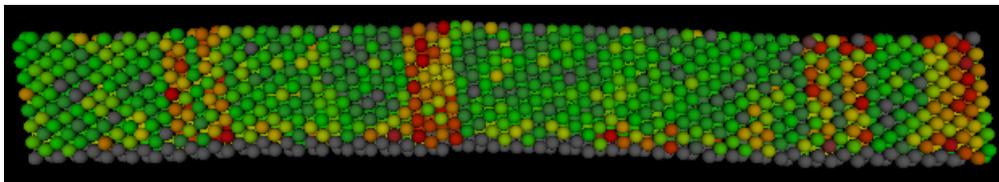


Abbildung 64: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 75000

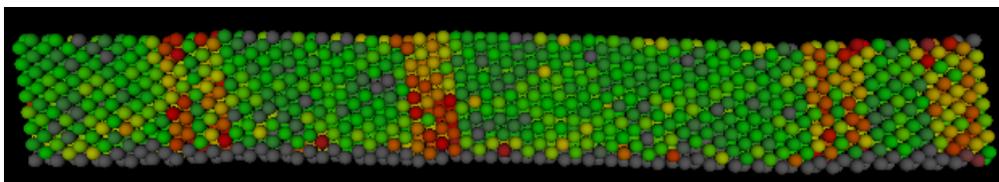


Abbildung 65: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 80000

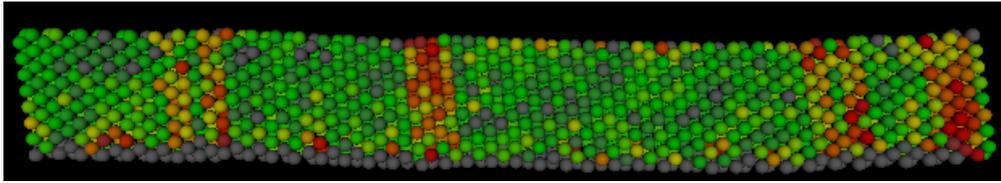


Abbildung 66: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 85000

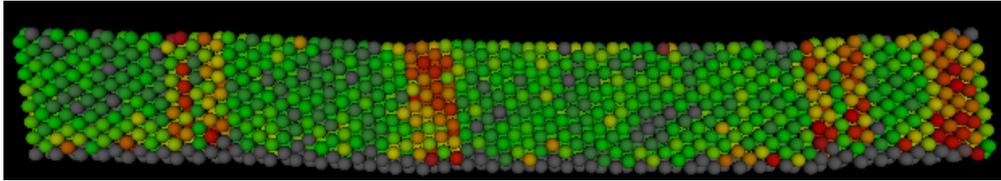


Abbildung 67: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 90000

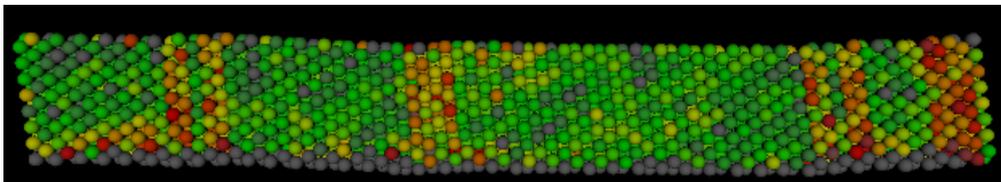


Abbildung 68: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 95000

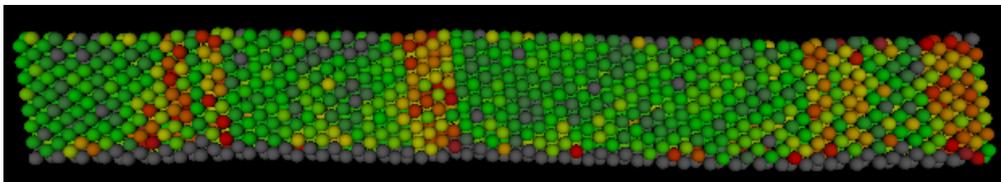


Abbildung 69: Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 100000

5 Zusammenfassung

Die ersten Untersuchungen der Schwingungen der Schwerpunkte von den einzelnen Nanobrücken zeigten, dass die Kurven meist exponentiell gedämpft werden. Ausnahmen traten bei besonders kleinen Temperaturen auf, bei denen der Verlauf der Einhüllenden der Schwingung nicht mit einer einfach abfallenden Exponentialfunktion angenähert werden konnte.

Bis auf wenige Ausnahmen verringern sich die Frequenzen der Nanobrücken bei steigender Temperatur, wobei der Einfluss der Radien der Bohrungen auf die Frequenz je nach Temperatur unterschiedlich ausfällt.

Die Dämpfungskoeffizienten der verschiedenen Konfigurationen schwanken bei steigender Temperatur, sodass kein einfacher Zusammenhang zwischen Dämpfung und Temperatur ersichtlich ist. Der Einfluss der Bohrungen auf die Dämpfung ist jedoch bei nahezu allen Temperaturen gleich. Ein größerer Bohrungsradius sorgt für eine stärkere Dämpfung der Schwingung der Nanobrücke.

Im Falle mehrerer Bohrungen kann außerdem durch verschiedene Radien und je nach Anordnung der Bohrungen Einfluss auf Frequenz und Dämpfung genommen werden, wodurch sich viele Einstellungsmöglichkeiten ergeben.

Es gelang außerdem, die verschiedenen Hauptschwingungsmoden der Nanobrücke sichtbar zu machen, die zwar unbeabsichtigt angeregt wurden, aber dennoch zu einem geringen Anteil in der Gesamtschwingung vorhanden sind.

Die Temperaturdifferenzen innerhalb der Nanobrücke ergaben sich wie erwartet zwischen Stellen mit unterschiedlich starken Spannungen des Materials. Bei großen Verformungen trat auch an Stellen, an denen die Nanobrücke gedehnt wird, eine Temperaturerhöhung auf. Das geschieht dann, wenn der Gültigkeitsbereich des linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten verlassen wird.

Die äußerst starke Dämpfung eines Resonators aus Nickel-Titan in der Tieftemperaturphase, konnte auf den Strukturübergang im Material selbst zurückgeführt werden, der bei großen Auslenkungen und Temperaturen nahe des Phasenübergangs auftritt.

Abbildungsverzeichnis

1	Einheitszellen der Nickel-Titan-Legierung bei einem Mischungsverhältnis 1:1. a) Tieftemperaturphase (Martensit) b) Hochtemperaturphase (Austenit), aus [7] . .	11
2	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung	19
3	Temperaturverlauf der Brücke 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung während der Schwingung; links: 250 Kelvin, rechts: 150 Kelvin	20
4	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström	21
5	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström	21
6	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström	23
7	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen ohne Bohrung	24
8	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström	25
9	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström	26
10	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Martensit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström	27
11	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen ohne Bohrung	28
12	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström	29
13	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström	30
14	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström	31
15	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen ohne Bohrung	32
16	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 4 Angström	33
17	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 6 Angström	34
18	Verlauf der Schwingung des Schwerpunkts der Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen mit mittiger Bohrung mit Radius von 8 Angström	35
19	Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen bei 20 Kelvin mit zwei Bohrungen; Zentren der Bohrungen bei ± 20 Angström; Radien der Bohrungen links: 4 Angström, rechts: 6 Angström	36
20	Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen bei 20 Kelvin mit drei (links) und vier (rechts) Bohrungen mit Radius von 6 Angström; Zentren der Bohrungen links: 0, ± 20 Angström, rechts: ± 10 , ± 30 Angström	36

21	Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen und 4 Bohrungen bei 150 Kelvin mit Radien der Bohrungen von je 6 Angström; Zentren der Bohrungen: $\pm 10, \pm 30$ Angström;	37
22	Martensit-Brücke mit 40-8-8 Einheitszellen und 4 Bohrungen bei 20 Kelvin; Bohrungen: zwei Zentren bei ± 30 Angström mit Radius 6 Angström, zwei Zentren bei ± 10 Angström mit Radius 4 Angström	37
23	Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radien von je 6 Angström und Zentren bei ± 25 Angström; rechts: 10 Bohrungen mit Radien von je 4 Angström und Zentren bei $\pm 7.5, \pm 22.5, \pm 37.5, \pm 52.5$ und ± 67.5 Angström	38
24	Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radius von je 6 Angström und Zentren bei ± 25 Angström in y -Richtung und ± 1.5 Angström in z -Richtung; rechts: 10 Bohrungen mit Radius von je 4 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(7.5, 2.0), (22.5, 2.0), (37.5, 2.0), (52.5, 2.0), (67.5, 2.0), (-7.5, -2.0), (-22.5, -2.0), (-37.5, -2.0), (-52.5, -2.0)$ und $(-67.5, -2.0)$ Angström	38
25	Austenit-Brücken mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin; links: 2 Bohrungen mit Radius 6 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(0, -12.0)$ und $(0, 12.0)$ Angström; rechts: 10 Bohrungen mit Radius 4 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(-24, \pm 12), (-12, \pm 12), (0, \pm 12), (12, \pm 12)$ und $(24, \pm 12)$ Angström	39
26	Austenit-Brücke mit 8-40-8 Einheitszellen bei 300 Kelvin und 5 Bohrungen mit Radien von je 6 Angström und Zentren in (y, z) -Richtung bei $(0, 0), (27, \pm 12)$ und $(-27, \pm 12)$ Angström	39
27	Frequenzen der Martensit-Brücken mit x - y - z Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström	40
28	Frequenzen der Martensit-Brücken mit 40-8-8 Einheitszellen, Radien der Bohrungen in Angström	41
29	Frequenzen der Austenit-Brücken	42
30	Frequenzen der Austenit-Brücken bei 300 Kelvin; Abkürzung EZ steht für Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström; die Ausgezeichneten Stellen der Konfiguration 15 sind in Tabelle 5 in der letzten Zeile zu finden.	43
31	Dämpfungskoeffizienten der Martensit-Brücken; Radien der Bohrungen in Angström	44
32	Dämpfungskoeffizienten der Austenit-Brücken ohne Bohrung und mit einer Bohrung; Bohrungsradius in Angström	44
33	Dämpfungskoeffizienten der Austenit-Brücken bei 300 Kelvin; Abkürzung EZ steht für Einheitszellen; Radien der Bohrungen in Angström	45
34	40-8-8 Einheitszellen, Martensit-Brücke; Schwingung der von 35 entlang der langen Achse der Brücke liegenden Schwerpunkte; t ist Zeit in Sekunden, x und z Ortskoordinaten in Angström	49
35	40-8-8 Einheitszellen, Martensit-Brücke; Betrag der Fouriertransformation über die Zeit von den Schwingungen der einzelnen Schwerpunkte; f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)	49

36	Vergrößerung von Abbildung 35, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)	51
37	Vergrößerung von Abbildung 35 an einer anderen Stelle, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)	52
38	Vergrößerung von Abbildung 35 an einer weiteren Stelle, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)	53
39	Vergrößerung von Abbildung 35 im Hochfrequenzbereich, f ist Frequenz in Hertz, x ist Ortskoordinate entlang der langen Achse des Resonators in Angström; $A(f, j)$ ist Maß für die Auslenkung der Schwingungsmode mit der entsprechenden Frequenz f des Schwerpunkts der Scheibe j ($j = 1, \dots, 35$)	54
40	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Beginn der Schwingungssimulation; Auffällig ist, dass die Temperatur am rechten Ende des ausgelenkten Resonators angestiegen ist.	56
41	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Halbe Periode nach Beginn der Schwingung; Die Temperaturerhöhung am rechten Ende des Resonators ist zurückgegangen, jedoch zeigt sich nun am linken unteren Ende eine einzelne Stelle mit sehr hoher Temperatur. In der Mitte des Resonators hätte man genau an der gegenüber liegenden Stelle eine erhöhte Temperatur erwartet als in dieser Abbildung zu sehen.	56
42	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Eine Periode nach Beginn der Schwingung	57
43	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke ohne Bohrung mit 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: ca. 410000. Zeitschritt	58
44	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Beginn der Simulation; Sehr starke Wärmeerzeugung!	59
45	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Halbe Periode nach Beginn der Schwingung; Sehr starke Wärmeerzeugung!	60
46	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: Ganze Periode nach Beginn der Schwingung; Sehr starke Wärmeerzeugung!	61
47	Temperaturverteilung der Martensit-Brücke mit Bohrung, 40-8-8 Einheitszellen und 0 Kelvin Anfangstemperatur; Zeitpunkt: ca 357800. Zeitschritt ; Sehr starke Wärmeerzeugung!	62
48	Farbskala für den Strukturparameter χ aus [14]	63

49	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 0	63
50	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 5000	63
51	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 10000	64
52	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 15000	64
53	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 20000	64
54	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 25000	64
55	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 30000	64
56	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 35000	65
57	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 40000	65
58	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 45000	65
59	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 50000	65
60	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 55000	65
61	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 60000	66
62	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 65000	66
63	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 70000	66
64	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 75000	66
65	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 80000	66
66	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 85000	67
67	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 90000	67
68	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 95000	67
69	Phasen der Martensit-Brücke mit 40-8-8 EZ und 250 Kelvin Anfangstemperatur ohne Bohrung; Zeitschritt: 100000	67

Tabellenverzeichnis

1	Im Potential verwendete Parameter aus [3]	11
---	---	----

2	Gitterkonstanten für die Einheitszellen von Nickel-Titan in Angström [7]	11
3	Verwendete Einheiten in den Simulationen	15
4	Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Martensit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene	45
4	Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Martensit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene	46
5	Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Austenit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene	47
5	Frequenzen und Dämpfungskoeffizienten der Schwerpunkte der Austenit-Nanobrücken; Angabe der Zentren der Bohrungen bei 40-8-8 EZ in (x, z)-Ebene und bei 8-40-8 EZ in (y, z)-Ebene	48

Literatur

- [1] Frenkel, Daan; Smit, Berend; *Understanding Molecular Simulation - From Algorithms to Applications*. Academic Press (2002)
- [2] Cleland, Andrew N.; *Foundations of Nanomechanics - From Solid-State Theory to Device Applications*. Springer (2003)
- [3] Landau, L.D.; Lifshitz, E.M.: *Theory of elasticity*. Pergamon Press (1970)
- [4] Lai, W S. ; Liu, B X.: *Lattice stability of some Ni-Ti alloy phases versus their chemical composition and disordering*. In: J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000), S. L53-L60
- [5] Cleri, Fabrizio ; Rosato, Vittorio: *Tight-binding potentials for transition metals and alloys*. In: Physical Review B 48 (1993), Nr. 1, S. 22-33
- [6] Ercolessi, Furio: *Lecture notes on Tight-Binding Molecular Dynamics, and Tight-Binding justification of classical potentials*. Dipartimento di Fisica, Università di Udine, 2005
- [7] Abell, G.C. : *Empirical chemical pseudopotential theory of molecular and metallic bonding*. In: Physical Review B 31 (1985) Nr. 10, S. 6184-6196
- [8] Mutter, Daniel ; Nielaba, Peter: *Simulation of structural phase transitions in NiTi*. In: *Physical Review B* 82 (2010), Nr. 22, S. 224201
- [9] Vögele, Martin: *Computersimulation von Nanobrücken aus binären Legierungen*, Universität Konstanz, Bachelorarbeit (2011)
- [10] Kohl, M.: *Entwicklung von Mikroaktoren aus Formgedächtnislegierungen*, Institut für Mikrostrukturtechnik - Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte FZKA 6718 (2002), Kap. 3
- [11] Scholz, Kristian: *Simulation elastischer Eigenschaften von Nanobrücken*, Universität Konstanz, Diplomarbeit, 2011

-
- [12] Lifshitz, Ron; Roukes, M.L.: *Thermoelastic damping in micro- and nanomechanical systems*. In: Physical Review B 61 Nr. 8 (2000), S. 5600-5609
- [13] Juan, Jose San; No, Maria L.; Schuh, Christopher A.: *Nanoscale shape-memory alloys for ultrahigh mechanical damping*. In: Nature Nanotechnology - Letters, S. 415-419
- [14] Van Humbeek, J.: *Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys*. In: Journal of Alloys and Compounds 355 (2003) S. 58-64
- [15] Mutter, Daniel; Nielaba, Peter: *Simulation of the thermally induced austenitic phase transition in NiTi nanoparticles*. In: Physical Journal B 84 (2011), S. 109-113