

### UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO INSTITUTO DE FÍSICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

# SUPERCONDUTORES MESOSCÓPICOS VIA TEORIA DE GINZBURG-LANDAU

Thiago Nunes Jorge

2020 Cuiabá/MT



### UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO INSTITUTO DE FÍSICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

# SUPERCONDUTORES MESOSCÓPICOS VIA TEORIA DE GINZBURG-LANDAU

### Thiago Nunes Jorge

Tese apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda Co-orientador: Prof. Dr. José José Barba Ortega

> 2020 Cuiabá/MT



# MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

### FOLHA DE APROVAÇÃO

TÍTULO: "SUPERCONDUTORES MESOSCÓPICOS VIA TEORIA DE GINZBURG-LANDAU"

AUTOR : DOUTORANDO Thiago Nunes Jorge

Tese defendida e aprovada em 27 de outubro de 2020.

### COMPOSIÇÃO DA BANCA EXAMINADORA

- 1. Doutor Alberto Sebastião de Arruda (Presidente Banca / Orientador)
- 2. Doutor ANTONIO DOS ANJOS PINHEIRO DA SILVA (Examinador Externo)
- 3. Doutor Thiago Miranda Tunes (Examinador Externo)
- 4. Doutor Gilney Figueira Zebende(Examinador Externo)
- 5. Doutor José Ricardo de Sousa (Examinador Externo)
- 6. Doutor Maurício Godoy (Examinador Suplente)

### 7. Doutor Jorge Luiz Brito de Faria (Examinador Suplente)

### 27 de outubro de 2020.



Documento assinado eletronicamente por **José Ricardo de Sousa**, **Usuário Externo**, em 12/11/2020, às 19:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Gilney Figueira Zebende**, **Usuário Externo**, em 13/11/2020, às 09:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **MAURICIO GODOY**, **Docente da Universidade Federal de Mato Grosso**, em 13/11/2020, às 09:39, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **ALBERTO SEBASTIAO DE ARRUDA**, **Docente da Universidade Federal de Mato Grosso**, em 13/11/2020, às 12:14, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **JORGE LUIZ BRITO DE FARIA**, **Docente da Universidade Federal de Mato Grosso**, em 13/11/2020, às 14:28, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **THIAGO MIRANDA TUNES**, **Docente da Universidade Federal de Mato Grosso**, em 13/11/2020, às 15:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.



Documento assinado eletronicamente por **Antonio dos Anjos Pinheiro da Silva**, **Usuário Externo**, em 16/11/2020, às 09:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de</u> <u>outubro de 2015</u>.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <u>http://sei.ufmt.br/sei/controlador\_externo.php?</u> <u>acao=documento\_conferir&id\_orgao\_acesso\_externo=0</u>, informando o código verificador **3019087** e o código CRC **BC686E30**.

**Referência:** Processo nº 23108.075328/2020-39

SEI nº 3019087

#### Dados Internacionais de Catalogação na Fonte.

J82s Jorge, Thiago Nunes. Supercondutores Mesoscópicos Via Teoria de Ginzburg-Landau / Thiago Nunes Jorge. -- 2020 vii, 100 f. : il. color. ; 30 cm.
Orientador: Alberto Sebastião de Arruda. Co-orientador: José José Barba Ortega. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Mato Grosso, Instituto de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Cuiabá, 2020. Inclui bibliografia.
1. Supercondutividade. 2. Ginzburg-Landau. 3. Vórtice-antivórtice cinemático. 4. Efeitos de interface. I. Título.

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

### Permitida a reprodução parcial ou total, desde que citada a fonte.

À minha família.

### Agradecimentos

A Deus por me guiar até este momento.

Agradeço ao meu orientador, Alberto Sebastião de Arruda, pela paciência, conselhos e orientação que me levaram à finalização deste trabalho. Aos professores Luiz Craco, pela sua paciência e dedicação ao me iniciar na linguagem de programação em Fortran, e Jorge Luiz Brito de Faria (Hulk) pela ajuda e apoio durante o período de doutoramento.

Agradeço também ao amigo Christian Aguirre e ao professor J. Barba Ortega pela ajuda nas simulações e publicação dos trabalhos.

As secretárias Dulce Corrêa e Alice por estarem a disposição sempre que precisei, em especial, à Dulce pelo carinho, e apoio desde o início da graduação (2001), com uma amizade perdura até esta data e certamente continuará até o fim.

Aos meus amigos, Sidnei e Douglas, onde nossas conversas divertidas que, juntamente com todos os desfalques e intempéries ocorridos, só serviram para reforçar ainda mais uma amizade que já dura anos. É claro que há espaço para as novas amizades como, Wilian, Eupídio e Sílvio que sempre estiveram lá para animar, ajudar e apoiar de alguma forma, tornando esse período de estudos e trabalho mais leve e descontraído.

Agradeço imensamente aos meus pais Carlos e Denise pelo seu amor incondicional e apoio em todas as minhas escolhas e fazes da minha vida. Aos meus irmãos Lucas e Rafael, pelo companheirismo onde nosso laço de sangue nunca enfraqueceu mesmo com a separação e distanciamento, pelo contrário, ficou mais forte. As minhas cunhadas queridas Angélica e Samara que, ao fazerem parte da família, tornou-a mais rica e incrivelmente bela. Em especial, ao meu irmão Lucas Nunes Jorge, pelo seu apoio durante todo o doutorado, sem sua ajuda, este caminho teria sido mais árduo.

A Universidade Federal do Acre pelos quatro anos de liberação para o meu processo de doutoramento.

Embora aqui, jornada finda, tu escuridão me aflijas, além das altas torres inda e das montanhas rijas, além das sombras vai o sol e estrelas há nos céus. E não direi: "Morreu o sol", e nem direi adeus.

J. R. R. Tolkien - O retorno do rei.

### Lista de Símbolos

- $\kappa$  Parâmetro GL
- $\lambda$  Comprimento de penetração de London
- $\xi$  Comprimento de coerência
- $\Phi_0$  Quantum de fluxo ou fluxóide
- $\Psi$  Parâmetro de ordem
- A Potencial vetor
- *b* Comprimento de extrapolação de De Gennes
- $J_c$  Corrente crítica
- $J_{c1}$  Primeira corrente crítica
- $J_{c2}$  Segunda corrente crítica
- $J_{c3}$  Terceira corrente crítica
- $H_c$  Campo crítico
- $H_{c1}$  Primeiro campo crítico
- $H_{c2}$  Segundo campo crítico
- $H_{c3}$  Terceiro campo crítico
- $T_c$  Temperatura crítica
- $U_{i,j}^x$  Variável de ligação no eixo x
- $U_{i,j}^y$  Variável de ligação no eixo y

# Lista de Figuras

| 1.1 | O célebre gráfico da transição supercondutora do mercúrio ao atingi<br>r $4,\!2$         |    |
|-----|--|----|
|     | K, obtido por H. K. Onnes em 1911 [7]  | 5  |
| 1.2 | (a) Condutor no estado normal $T > T_c$ permite que as linhas de campo o                 |    |
|     | atravessem enquanto que, em (b) elas não penetram no material supercon-                  |    |
|     | dutor $T < T_c$ devido as correntes de blindagem geradas na superfície do                |    |
|     | supercondutor.   | 6  |
| 1.3 | (a) A rede triangular formado pelos vórtices prevista por Abrikosov, e (b)               |    |
|     | mostra a primeira imagem obtida mostrando a previsão de Abrikosov [19].                  | 7  |
| 1.4 | Estrutura de um vórtice isolado mostrando a variação do parâmetro de                     |    |
|     | ordem $ \Psi ^2$ e do comprimento de penetração $\lambda$                                | 8  |
| 1.5 | Nucleação dos pares $V - Av$ no centro do material, eles seguem em direção               |    |
|     | às bordas por onde deixam a amostra [36]   | 10 |
| 1.6 | (a) Gráfico da corrente versus a voltagem, para amostra com defeitos in-                 |    |
|     | ternos simulado por $\tau$ . Até a primeira descontinuidade $J_{c1}$ tem-se o estado     |    |
|     | Meissner, em seguida inicia-se o estado resistivo até $J_{c2}$ , onde a supercondu-      |    |
|     | tividade é suprimida mas não totalmente destruída. Na sequência aparece                  |    |
|     | um $J_{c3}$ que representa a supercondutividade residual na amostra [42]                 | 10 |
| 1.7 | (a) Gráfico da resistividade versus a temperatura do $MgB_2$ encontrada por              |    |
|     | Nagamatsu em 2001 [51]. (b) Os dois gaps obtidos de forma experimental,                  |    |
|     | a energia de cada gap é $\Delta_1 = 2.3 \text{ meV}$ e $\Delta_2 = 7.1 \text{ meV}$ [59] | 12 |
| 2.1 | Comprimento de penetração de London $\lambda.~$ O campo externo penetra                  |    |
|     | em uma pequena profundidade no supercondutor decrescendo exponen-                        |    |
|     | cialmente no interior do supercondutor   | 16 |
| 2.2 | Em (a) temos o comportamento entre os supercondutores do tipo-I e II                     |    |
|     | em função da penetração do campo externo, enquanto que (b) ilustra a                     |    |
|     | coexistência entre os estados de vórtice e Meissner.                                     | 18 |

| 2.3 | Gráfico da equação 2.24. A energia livre de Ginzburg-Landau para dois<br>valores de $\alpha$ . Quando $\alpha < 0$ , a curva apresenta dois mínimos característicos<br>de uma transição de fase de segunda ordem, o que significa que o sistema<br>se encontra na fase ordenada e portanto $T < T_c$ . Quando $T > T_c \rightarrow \alpha > 0$ ,  |    |
|-----|---|----|
|     | e a fase passa a ser desordenada no qual $\Psi = 0$ . O sinal de $\beta$ controla a   | 20 |
| 2.4 | concavidade da função   | 20 |
| 2.5 | $\xi << \lambda$  | 29 |
|     | dutores tipo-I, onde existe um perfeito estado Meissner. Quando $H$ atinge<br>o campo crítico $H_c$ o estado supercondutor é totalmente destruído. Em<br>(b) o estado Meissner se mantém até atingir o primeiro campo crítico $H_{c_1}$ .   |    |
| 2.6 | Entre $H_{c_1}$ e $H_{c_2}$ os vórtices entram no material sem destruição do estado<br>supercondutor e passa a existir o estado misto ou Shubnikov Diagrama de fase $H-T$ para supercondutores tipo-I onde existe um perfeito   | 30 |
|     | estado Meissner quando $H$ atinge o campo crítico $H_c$ e a supercondutivi-<br>dade é totalmente suprimida. (b) mostra o diagrama de fase para uma<br>amostra macroscópica onde o estado Meissner se mantém até atingir o pri-<br>meiro campo crítico $H_{c_1}$ . Entre $H_{c_1}$ e $H_{c_2}$ os vórtices entram no material<br>no qual passa a existir a fase Shubnikov. Após $H_{c_3}$ não existe mais o estado |    |
|     | supercondutor.  | 30 |
| 3.1 | Estrutura de uma rede bi-dimensional para uma única célula unitária onde,<br>$\psi_{i,j}$ é o parâmetro de ordem, $U_{i,j}^x$ , $U_{i,j}^y$ são as variáveis de ligação nos eixos<br>$x \in y$ respectivamente. A soma de todas as variáveis ao redor da célula<br>corresponde campo de indução magnético $L_{i,j}^z$ no eixo $z$ no centro da célula   |    |
| 3.2 | unitária  | 42 |
| 4 1 | quadrado tracejado verde é onde as equações G-TDGL serão resolvidas   | 42 |
| 4.1 | Representação do modelo estudado; uma amostra supercondutora qua-<br>drada com tamanho lateral igual a $L = 12\xi$ , com um defeito central de  |    |
| 4.2 | largura $d$ , imerso em um campo magnético perpendicular <b>H</b>   | 53 |
| 4.3 | para $d = 0$ e $\Gamma = 1.0.$  | 56 |
|     | com $N = 8$ , em (f) $H = 1.04$ com $N = 10$ .  | 56 |

| 4.4   | (acima)<br>Módulo quadrado do parâmetro de ordem ( $ \psi_i ^2$ ),<br>e (abaixo) posi-           |    |
|-------|--|----|
|       | ção central dos vórtices quando, $d=0$ e $\Gamma=1.0.$ De (a-e) $1.24 \leq H \leq 1.32$          |    |
|       | com $N = 10$ , e (f) $H = 1.38$ com $N = 12$   | 57 |
| 4.5   | (a) Magnetização para diferentes valores do defeito central. Nota-se a di-                       |    |
|       | minuição gradativa do campo $H_{c1}$ conforme d diminui, no entanto, $H_{c2}$                    |    |
|       | permanece constante. Em (b) a vorticidade para $d^2 = 1, 4, 9, 16(\xi^2)$ , e                    |    |
|       | $\Gamma = 1.0$ , que apresenta o número de vórtices e a variação de $H_{c1}$ com o               |    |
|       | aumento do defeito.  | 57 |
| 4.6   | (acima) ( $ \psi_i ^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando, $d/\xi = 1$ e          |    |
|       | $\Gamma = 1.0$ , para $0.88 \le H \le 1.24$ (a-f).   | 58 |
| 4.7   | (acima) ( $ \psi_i ^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando, $d/\xi = 2$ e          |    |
|       | $\Gamma = 1.0$ , para $0.88 \le H \le 1.24$ (a-f).   | 62 |
| 4.8   | (acima) ( $ \psi_i ^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando, $d/\xi = 3$ e          |    |
|       | $\Gamma = 1.0$ , para $0.96 \le H \le 1.42$ (a-f).   | 62 |
| 4.9   | (acima) ( $ \psi_i ^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando, $d/\xi = 4$ e          |    |
|       | $\Gamma = 1.0$ , para $1.08 \le H \le 1.34$ (a-f).   | 62 |
| 4.10  | "fit<br>"do buraco central $d$ em função do campo crític<br>o ${\cal H}_{c_1},$ o qual encontra- |    |
|       | mos $d^2 = 147.45H_{c_1} - 99.4$   | 63 |
| 4.11  | (a) O comportamento da magnetização nesta situação é bem diferente da $\hfill$                   |    |
|       | anterior. Há uma campo $H_{c1}$ e $H_{c2}$ para casa valor de $\Gamma$ , onde se ob-             |    |
|       | serva também a diminuição (quando $\Gamma < 1$ ), e aumento (quando $\Gamma > 1$ ),              |    |
|       | desses dois campos críticos. (b) apresenta a vorticidade para $d = 0$ e                          |    |
|       | $\Gamma = 0.90, 0.98, 1.02, 1.04.$   | 63 |
| 4.12  | Estado de vórtices e posição para $\Gamma = 0.90$ e $d = 0$ para diferentes valores              |    |
|       | do campo externo.  | 64 |
| 4.13  | Estado de vórtices e posição para $\Gamma = 0.99$ e $d = 0$ para diferentes valores              |    |
|       | do campo externo.  | 65 |
| 4.14  | Estado de vórtices e posição para $\Gamma = 1.02$ e $d = 0$ , para diferentes valores            |    |
| 4 1 5 | do campo externo.  | 66 |
| 4.15  | Estado de vortices e posição para $\Gamma = 1.04$ e $d = 0$ , e diferentes valores o             | 00 |
|       | campo externo  | 66 |
| 5.1   | A amostra é composta de um loop retangular com dimensões $e+2f = 9.20\xi$ ,                      |    |
|       | $c+2d=22.71\xi$ , com um buraco interno com $a=b=3.2\xi$ . O tamanho dos                         |    |
|       | eletrodos é $m = 1\xi$ , através da qual é injetada uma densidade de corrente                    |    |
|       | dcuniforme $J.$ O campo magnético externo $H$ é perpendicular ao plano da                        |    |
|       | amostra. No primeiro caso (a) temos um material com um buraco (defeito)                          |    |
|       | no centro e nos cantos. No caso (b) existe uma material supercondutor com                        |    |
|       | temperatura crítica mais baixa no lugar dos defeitos, simulado por $\tau=0.$ .                   | 68 |
| 5.2   | O diagrama de fases $H - T$ quando $J = 0$ , para o caso (a)                                     | 70 |

| 5.3  | (a) temos a magnetização $-4\pi M$ e (b) energia livre de Gibbs G como uma   |    |
|------|--|----|
|      | função do campo magnético externo aplicado para $T = 0.5; 0.6; 0.7, 0.8, 0.9$  |    |
|      | para o caso (a). $\ldots$   | 71 |
| 5.4  | (a) e (b) Magnetização e a curva da histerese para T=0.40 e T=0.60. (c)  |    |
|      | Energia livre de Gibbs $G$ como uma função do campo magnético externo  |    |
|      | H para $T=0.90; 0.92; 0.94; 0.95,$ mostrando que as descontinuidades con-  |    |
|      | tinuam a ocorrer mesmo em temperaturas perto de $T_c$  | 72 |
| 5.5  | Susceptibilidade magnética $\chi_m$ como uma $H$ função para a) $T = 0.6$ , b)   |    |
|      | $T = 0.7, c$ $T = 0.8 e d$ $T = 0.9. \dots $ | 72 |
| 5.6  | Módulo quadrado do parâmetro de ordem $ \Psi ^2$ para $T=0.5~{\rm com}$ a indica-  |    |
|      | ção dos campos magnéticos.   | 73 |
| 5.7  | Módulo quadrado do parâmetro de ordem $ \Psi ^2$ para $T=0.6$ com a indica-  |    |
|      | ção dos campos magnéticos.   | 73 |
| 5.8  | (a) Curva da voltagem $V$ como uma função da densidade de corrente apli-   |    |
|      | cada $J$ para várias temperaturas. (b) Logaritmo do parâmetro de ordem,  |    |
|      | $ln \mid \psi \mid$ (amarelo/vermelho correspondendo ao maior/zero respectivamente   |    |
|      | $ \psi $ com a supercorrente $J_s$ em $T = 0$  | 74 |
| 5.9  | (a) Resistividade $\partial V/\partial J$ em função da corrente aplicada $J$ para $T$ = 0 e  |    |
|      | T = 0,25. Velocidade média dos pares de vórtices-anti-vórtices $V - Av$ ,  |    |
|      | para (b) $T = 0.25$ e (c) $T = 0.$   | 75 |
| 5.10 | (a) Voltagem V em função da densidade de corrente aplicada J para $H = 0$ ,  |    |
|      | 0.4 e $T$ = 0.25. (b) Logaritmo do parâmetro de ordem, $ln \mid \psi \mid$ (ama-   |    |
|      | relo/vermelho correspondendo ao maior/zero respectivamente   $\psi$  ) com a   |    |
|      | super-corrente $J_s$ para $J = 0.62, 0.92$ para $H = 0.4. \ldots \ldots \ldots$  | 76 |

### Resumo

Nesta tese, estudamos as propriedades físicas em materiais supercondutores tais como magnetização, energia livre, susceptibilidade magnética, vorticidade e a dinâmica de vórtices, utilizando as equações de Ginzburg-Landau dependente do tempo (TDGL), e o método  $\psi - U$  para fazer a simulação computacional em amostras de uma e duas bandas. Em um primeiro momento, uma amostra com defeitos nas bordas e no centro, foi submetida a um campo magnético externo de onde obteve-se a magnetização, energia livre, o diagrama de fases e a dinâmica de vórtices. Podemos observar a diminuição dos campos críticos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  com o aumento da temperatura e que o defeito central no material influencia a configuração dos vórtices funcionando como um centro de aprisionamento de vórtices. Em outra ocasião, analisamos o comportamento de um supercondutor, no qual os defeitos foram preenchidos com um material supercondutor com  $T_c$  maior e submetido a uma corrente de transporte. Obtivemos a corrente crítica  $J_{c1}$  onde podemos ver sua dependência inversa com o aumento da temperatura, e o início do estado resistivo com o surgimento de um par vórtice-antivórtice (V-Av) cinemático. Encontramos a resistividade com função da corrente aplica e sua forma característica devido ao movimento ultra-rápido dos vórtices. Constatamos a drástica diminuição da corrente crítica  $J_{c1}$ , devido à aplicação de um campo magnético externo e o surgimento de dois vórtices de Abrikosov.

Dentro do formalismo de duas bandas (2B-TDGL), buscamos compreender como se comportam os vórtices em uma amostra quadrada com um defeito central. Aqui encontramos um interessante resultado: a configuração dos vórtices não obedece a rede triangular de Abrikosov devido à competição entre as bandas para manter seu estado supercondutor. Com o aumento do defeito a amostra se tornou mais diamagnética pois não houve alteração do campo  $H_{c2}$ , onde o defeito central levou ao ancoramento dos vórtices. Para simular uma situação em que a amostra está em contato com outro material, ou seja, os efeitos de interface com material ferromagnético ou supercondutor com  $T_c$  maior, utilizamos a influência do comprimento de extrapolação de deGennes b. Observamos um estado de vórtice não convencional e a diminuição do campo  $H_{c1}$ , quando a interface é ferromagnético/supercondutor e um aumento quando temos uma interface supercondutor/supercondutor. Essa diminuição/aumento é devido à contaminação nas fronteiras do material por elétrons/pares de Cooper que contribuem para a degradação/aumento do estado supercondutor.

**Palavras Chave:** Supercondutividade, Ginzburg-Landau, Vórtice-antivórtice cinemático, Efeitos de interface.

### Abstract

In this thesis, we study the physical properties of superconducting materials such as magnetization, free energy, magnetic susceptibility, vorticity and vortex dynamics, using the time-dependent Ginzburg-Landau equations (TDGL), and the  $\psi - U$  method to do the computer simulation in samples of one and two bands. At first, a sample with defects in the edges and the center was submitted to an external magnetic field from which the magnetization, free energy, the phase diagram, and the vortex dynamics were obtained. We can observe the decrease in the critical fields  $H_{c1}$  and  $H_{c2}$  with increasing temperature and that the central defect in the material influences the configuration of the vortex functioning as a vortex trapping center. On another occasion, we analyzed the behavior of a superconductor, in which the defects were filled with a superconducting material with  $T_c$  greater and submitted to a transport current. We obtained the critical current  $J_{c1}$  where we can see its inverse dependence with the increase in temperature, and the beginning of the resistive state with the appearance of a kinematic vortex-antivortex pair (V-Av). We found the resistivity with function of the applied current and its characteristic shape due to the ultra-fast movement of the vortices. We found a drastic decrease in the critical current  $J_{c1}$ , due to the application of an external magnetic field and the appearance of two Abrikosov vortices.

Within the two-band formalism (2B-TDGL), we seek to understand how the vortexes behave in a square sample with a central defect. Here we find an interesting result: the configuration of the vortices does not obey Abrikosov's triangular lattice due to the competition between the bands to maintain their superconducting state. As the defect increased, the sample became more diamagnetic as there was no change in the  $H_{c2}$  field, where the central defect led to the anchoring of the vortexes. To simulate a situation in which the sample is in contact with other material, that is, the effects of interfacing with ferromagnetic or superconducting material with  $T_c$  greater, we use the influence of deGennes *b* extrapolation length. We observed an unconventional vortex state and a decrease in the  $H_{c1}$  field, when the interface is ferromagnetic/superconducting and an increase when we have a superconducting/superconducting interface. This decrease/increase is due to contamination at the material boundaries by electrons/Cooper pairs that contribute to the degradation/increase of the superconducting state.

**Keywords:** Superconductivity, Ginzburg-Landau, kinematic vortex-antivortex, de-Gennes extrapolation length.

# Sumário

| D                         | edica                | tória   | ii  |  |
|---------------------------|----------------------|---|-----|--|
| $\mathbf{A}_{\mathbf{i}}$ | grade                | ecimentos   | iii |  |
| Eļ                        | pígra                | fe  | iv  |  |
| Li                        | Lista de Símbolos iv |   |     |  |
| $\mathbf{Li}$             | sta d                | le Figuras  | vi  |  |
| R                         | esum                 | 0   | x   |  |
| $\mathbf{A}$              | bstra                | let   | xii |  |
| 1 Introduçã               |                      | odução  | 4   |  |
|                           | 1.1                  | Revisão histórica   | 4   |  |
|                           | 1.2                  | Supercondutores sob ação de uma corrente externa                    | 9   |  |
|                           | 1.3                  | Supercondutores de duas bandas: o caso do $MgB_2$                   | 11  |  |
| <b>2</b>                  | Cor                  | nceitos básicos da Supercondutividade                               | 14  |  |
|                           | 2.1                  | Equações de London  | 14  |  |
|                           | 2.2                  | Teoria Fenomenológica de Ginzburg-Landau                            | 17  |  |
|                           |                      | 2.2.1 As equações GL  | 17  |  |
|                           | 2.3                  | Derivações da energia livre GL: O parâmetro de ordem e densidade de |     |  |
|                           |                      | corrente  | 21  |  |
|                           | 2.4                  | Comprimentos característicos e o parâmetro de Ginzburg-Landau       | 26  |  |

|          |      | 2.4.1   | Comprimento de penetração $(\lambda)$ do campo magnético           | 26 |  |
|----------|------|---|--|----|--|
|          |      | 2.4.2   | Comprimento de Coerência $(\xi)$                                   | 27 |  |
|          |      | 2.4.3   | Tipos de supercondutores e o parâmetro $\kappa$                    | 28 |  |
|          | 2.5  | Vórtic  | es em Supercondutores  | 31 |  |
|          |      | 2.5.1   | Quantização do fluxo   | 31 |  |
|          |      | 2.5.2   | Estrutura e energia de um vórtice                                  | 32 |  |
|          | 2.6  | Equaç   | ões GL Dependente do Tempo - TDGL                                  | 35 |  |
|          | 2.7  | Equaç   | ões TDGL adimensionais   | 37 |  |
|          | 2.8  | Formalismo TDGL para supercondutores de duas bandas (2B-TDGL) 38 $$ |  |    |  |
|          | 2.9  | Equaç   | ões TDGL generalizadas (G-TDGL)                                    | 39 |  |
| 3        | Mét  | todo n  | umérico: as equações GL discretas                                  | 41 |  |
|          | 3.1  | Métod   | lo $\psi - U$ e as equações TDGL                                   | 41 |  |
|          | 3.2  | Propri  | iedades das variáveis de ligação                                   | 43 |  |
|          |      | 3.2.1   | Discretização da primeira equação GL                               | 44 |  |
|          |      | 3.2.2   | Discretização da segunda equação GL e da G-TDGL                    | 46 |  |
|          |      | 3.2.3   | Condições de Contorno  | 49 |  |
|          |      | 3.2.4   | Cálculo da magnetização e vorticidade                              | 51 |  |
| 4        | Sup  | ercono  | lutores mesoscópicos via teoria de Ginzburg-Landau                 | 53 |  |
|          | 4.1  | Forma   | llismo teórico   | 53 |  |
|          | 4.2  | Result  | ados e discussão   | 55 |  |
|          |      | 4.2.1   | Caso (a): Amostra homogênea, $d = 0$ e $\Gamma = 1.0$              | 55 |  |
|          |      | 4.2.2   | Caso (b): Efeito do tamanho do defeito $d$ sobre o estado e número |    |  |
|          |      |   | de vórtices para $\Gamma = 1.0$                                    | 57 |  |
|          |      | 4.2.3   | Caso (c): Efeito das condições de contorno sobre o estado e o nú-  |    |  |
|          |      |   | mero de vórtices para $d = 0$                                      | 60 |  |
|          | 4.3  | Concl   | usões  | 61 |  |
| <b>5</b> | Pro  | prieda  | des supercondutoras de uma amostra retangular com defeitos         | 5  |  |
|          | e so | b a aç  | ão de corrente e campo externo                                     | 67 |  |
|          | 5.1  | Forma   | lismo teórico  | 67 |  |
|          | 5.2  | Result  | ados e discussão   | 69 |  |

|  | Ę                     | 5.2.1  | Caso (a). Propriedades supercondutoras de uma amostra retangular $% \left( {{{\bf{n}}_{\rm{s}}}} \right)$ |    |
|--|-----------------------|--------|---|----|
|  |                       |        | com defeitos e sob a ação de campo magnético externo  | 69 |
|  | L<br>L                | 5.2.2  | Caso (b). Propriedades supercondutoras de uma amostra retangular  |    |
|  |                       |        | com defeitos e sob a ação de corrente elétrica externa  | 74 |
|  | Ę                     | 5.2.3  | Conclusões  | 76 |
| 6  | Conc                  | lusões | s e Perspectivas  | 78 |
| $\mathbf{A}$   | Equa                  | ções 1 | TDGL adimensionais  | 81 |
|  | A.1 A                 | Adimer | nsionalização da 1º equação   | 81 |
|  | A.2                   | Adimer | nsionalização da 2º equação   | 84 |
| B Obtenção da forma explícita para $\partial\psi/\partial t$ da G-TDGL utilizando o méto |                       |        |   |    |
|  | de Ci                 | ramer  |   | 86 |
| $\mathbf{C}$   | Méto                  | odo da | s diferenças finitas  | 88 |
| D  | Artig                 | go pub | olicado no The European Physical Journal B (EPJ B)  | 90 |
| $\mathbf{E}$   | Artig                 | go sub | metido ao Journal of Superconductivity and Novel Magne-   |    |
|  | $\operatorname{tism}$ | (JOS   | C)  | 91 |
| $\mathbf{F}$   | Artig                 | go não | relacionado à tese publicado no Physical Review B   | 92 |
| Re   | eferên                | cias B | ibliográficas   | 92 |

### Introdução

Dizemos que um material está no estado supercondutor quando uma corrente elétrica, ao atravessa-lo, não enfrenta qualquer tipo de resistência. Conhecida como supercondutividade este novo estado termodinâmico detém propriedades físicas novas e surpreendentes que serão apresentadas no decorrer desta introdução. Os materiais supercondutores já são utilizados na produção de campos magnéticos intensos em exames médicos como magnetoencefalografia (MEG) e magnetocardiografia (MCG) [1], em turbinas eólicas [2], em meios de transporte por levitação magnética (trens bala) [3], dispositivos ultra sensíveis (SQUID) capazes de medir tênues campos magnéticos como o gerado pelo cérebro humano [4], ou radiação infravermelha de estrelas distantes (bolômetro), aceleradores de partículas e reatores de fusão [5].

### 1.1 Revisão histórica

A descoberta da supercondutividade ocorreu na universidade de Leiden na Holanda em 1911 [6]. Naquela ocasião, o físico Heike Kamerlingh Onnes estava medindo a resistência elétrica do mercúrio em baixíssimas temperaturas quando, ao atingir 4,2 K a resistência do material em questão foi a zero abruptamente, como pode ser visto no célebre gráfico da resistência versus temperatura, obtido por Onnes na Figura 1.1. Este feito foi possível pois, em 1908, Onnes havia conseguido liquefazer o hélio (He), passando assim a utilizá-lo para resfriar suas amostras. A liquefação do hélio lhe rendeu o prêmio Nobel em 1913 [7]. Ao fazer o mesmo experimento com outros materiais, Onnes observou a mesma transição supercondutora porém em temperaturas diferentes. Para o chumbo (Pb) ele obteve uma temperatura de aproximadamente 7,2 K e 3,1 K para o estanho (Sn). A essas temperaturas deu-se o nome de *temperatura crítica*  $T_c$ , um valor no qual acima dela a matéria perde



Figura 1.1: O célebre gráfico da transição supercondutora do mercúrio ao atingir 4,2 K, obtido por H. K. Onnes em 1911 [7].

seu estado supercondutor.

Outra propriedade dos materiais supercondutores é a capacidade de expelir totalmente de seu interior um campo magnético externo, como ilustrado na Figura 1.2, exibindo assim um comportamento diamagnético perfeito. Este novo fenômeno foi descoberto por W. Meissner e R. Ochsenfeld em 1933 [8] e recebeu o nome de *Efeito Meissner-Ochsenfeld* ou simplesmente efeito Meissner. Esse efeito é o responsável pela levitação magnética e ocorre porque o campo externo induz uma corrente que blinda a entrada do campo entretanto, ela só ocorre para campos fracos pois quando o campo aumenta ele rompe a blindagem e, ao penetrar no seu interior, o estado supercondutor é destruído. O valor atingido pelo campo externo capaz de destruir a supercondutividade de um material é chamada de *campo crítico*  $(H_c)$ . Além da temperatura crítica e campo crítico, há um terceiro parâmetro que constitui limite para o estado supercondutor, a *corrente crítica*  $(J_c)$ , assim, esses três parâmetros constituem um limite para o estado supercondutor.

Levou mais de vinte anos entre a descoberta da supercondutividade e o surgimento da primeira teoria que a explicasse a supercondutividade. Em 1935, os irmãos London criaram a sua teoria fenomenológica dos supercondutores [9]. Essa teoria, embora clássica, descreve bem o estado supercondutor e o efeito Meissner, além disso, eles introduziram um parâmetro o qual é chamado de *comprimento de penetração de London* ( $\lambda$ ). Este



Figura 1.2: (a) Condutor no estado normal  $T > T_c$  permite que as linhas de campo o atravessem enquanto que, em (b) elas não penetram no material supercondutor  $T < T_c$ devido as correntes de blindagem geradas na superfície do supercondutor.

comprimento corresponde à distância que um campo magnético externo penetra no material supercondutor, sendo em torno de 100 nm na maioria dos sistemas supercondutores. Nesse mesmo ano, Schubnikov *et al.* [10], publicaram um trabalho no qual, observaram que cristais de PbTl<sub>2</sub>, ao atingir o campo crítico  $H_c$ , não tinham sua supercondutividade destruída, mas passava a ter um estado misto, até atingir outro campo crítico que ele chamou de  $H_{c2}$  [11, 12]. Acima desse segundo campo crítico o estado supercondutor era suprimido. Supercondutores que possuem essa fase mista com os dois campos críticos  $H_{c1}$ e  $H_{c2}$  passaram a ser chamados de supercondutores tipo-II, e aqueles os quais possuem apenas um campo crítico  $H_c$ , e que tem seu estado supercondutor destruído abruptamente após alcança-lo, são conhecidos de supercondutores do tipo-I. O termo *fase Shubnikov* foi utilizado pela primeira vez para designar a fase mista em 1972 [13].

Em 1950, L. D. Landau e V. L. Ginzburg publicam sua teoria fenomenológica da supercondutividade baseada na teoria das transições de fase de segunda ordem de Landau [14, 15]. Nesse trabalho, eles introduziram um parâmetro de ordem complexo  $\Psi(\mathbf{r})$ , que é zero para temperatura acima da temperatura crítica  $(T > T_c)$ , e diferente de zero para valores abaixo dela  $(T < T_c)$ . Aqui o parâmetro de ordem  $\Psi(\mathbf{r})$  faz o papel de uma função de onda para os elétrons supercondutores semelhante à de Schrödinger. Com essa abordagem, eles obtiveram o comprimento de penetração de London  $\lambda$ , e introduziram o conceito do *comprimento de coerência*  $\xi$ , que determina a variação espacial do parâmetro de ordem. Essa teoria foi uma enorme proeza de seus criadores, pois descreve com sucesso o comportamento macroscópico dos supercondutores do tipo-I e tipo-II [16, 17].

Em 1957, Abrikosov mostrou que a teoria de Ginzburg-Landau (GL) previa a separação entre os dois tipos de supercondutores e que, no estado misto, o campo externo atravessa



Figura 1.3: (a) A rede triangular formado pelos vórtices prevista por Abrikosov, e (b) mostra a primeira imagem obtida mostrando a previsão de Abrikosov [19].

a amostra na forma vórtices carregando um quantum de fluxo, e que esse vórtices se agrupariam em redes triangulares conhecidas como *rede de Abrikosov* [18], veja a Figura 1.3. Abrikosov mostrou que os vórtices ocorrem quando  $\xi \ll \lambda$ , o que favorece a entrada do campo magnético externo que atravessa a amostra sem destruir a supercondutividade, formando um estado intermediário. Por outro lado, se  $\xi \gg \lambda$  a energia da superfície é positiva e não gera condições para a nucleação dos vórtices. A Figura 1.4 ilustra a estrutura de um vórtice no qual o centro é o único local onde o estado supercondutor é suprimido, isto é,  $\Psi = 0$ , enquanto que os pares de Cooper mantém a estabilidade do vórtice.

A teoria GL foi proposta inicialmente para tratar de supercondutores do tipo-I, onde o parâmetro de ordem varia lentamente para temperaturas próxima da temperatura crítica. Entretanto, os trabalhos de Shubnikov envolvendo ligas mostrava que o campo magnético podia atravessar o material sem destruir o estado supercondutor. Embora Landau, Ginzburg entre outros acharem que as ligas eram "um negócio desagradável"[15], sua teoria acabou por desempenhar um importante papel no estudo das ligas supercondutoras e outros materiais cuja temperatura crítica está além da prevista pela teoria BCS [20]. De Gennes mostrou que a teoria GL é válida para qualquer temperatura submetido a fortes campos magnéticos [16].

Via de regra, supercondutores ditos puros como Sn, Pb, Zn, apresentam um campo crítico, são do tipo-I, com exceção de três materiais o nióbio (Nb), o tecnécio (Tc) e o vanádio (V). Ligas, que são compostas por mais de um material, como o NbTi, o Nb<sub>3</sub>Sn, MgB<sub>2</sub>, e, como dito anteriormente, Nb, Tc e o V, são supercondutores do tipo-II. Finalmente, em 1957, surgiu a primeira teoria microscópica para a supercondutividade. Conhecida como *teoria BCS*, em homenagem a seus criadores Bardeen, Cooper e Schrieffer, ela descreve



Figura 1.4: Estrutura de um vórtice isolado mostrando a variação do parâmetro de ordem  $|\Psi|^2$  e do comprimento de penetração  $\lambda$ .

o movimento da corrente supercondutora como um fluido de pares de Cooper, onde dois elétrons se unem para formar o par de Cooper mediante a atração criada pela a deformação da rede cristalina (fônons) [21]. Em 1959, Gor'kov mostrou que a teoria GL é um caso particular da teoria BCS para temperaturas próximas a temperatura crítica [22]. Os criadores da teoria BCS ganharam o prêmio nobel em 1972 e, embora seu trabalho tenha tido sucesso na descrição da supercondutividade, ela não é aplicada para supercondutores de alta  $T_c$ . A temperatura crítica máxima aceita pela teoria é cerca de 30K.

Em detrimento ao limite de temperatura imposto pela teoria BCS, alguns cientistas acreditavam que não poderiam ocorrer supercondutores com temperaturas críticas acima de 30K, ou seja, o estado supercondutor seria um fenômeno restrito as baixas temperaturas. Por exemplo, a temperatura crítica do NbTi é  $T_c = 10K$ , o Nb<sub>3</sub>Sn possui  $T_c = 18K$ e o Nb<sub>3</sub>Ge com  $T_c = 23K$ . Contudo, em 1986, K. Alex Müller e J. George Bednorz publicaram um trabalho onde encontraram supercondutividade em um cuprato baseado em perovstkita a base de lantânio a uma temperatura crítica de 35K [23] (considerado o primeiro supercondutor de alto  $T_c$ ). Mais tarde eles trocaram o lantânio por ítrio dando origem ao famoso composto YBCO que atingiu incríveis 92K [24].

A descoberta dos cupratos supercondutores renovou os ânimos dos pesquisadores com relação a supercondutividade pois, com a temperatura crítica ultrapassando a temperatura do nitrogênio líquido que é de 77 K, abriu-se a janela para novas pesquisas e aplicações, visto que o nitrogênio é um material mais barato e mais fácil de se obter do que o hélio. Assim, a busca por materiais com temperatura crítica mais alta, quiçá com temperatura próxima à ambiente, havia começado.

A teoria GL ganhou destaque no estudo da física dos supercondutores de alta temperatura crítica tais como, a dinâmica dos vórtices [25], supercondutores de uma ou multibandas [26, 27, 28, 29], amostras finitas ou periódicas [30]. Resultados experimentais mostraram a influência do tamanho da amostra, variações de temperatura e do campo externo sobre a magnetização e a dinâmica de estados de vórtices, multi-vórtices e vórtices gigantes [31, 32, 33, 34].

### 1.2 Supercondutores sob ação de uma corrente externa

Existe outro tipo de vórtice criado quando um supercondutor é submetido à aplicação de uma corrente externa  $J_c$ . Conhecidos como vórtices cinemáticos (Vk's), eles foram previstos por Andorov et. al., [35], e também tem sido largamente estudada por meio da teoria GL [36, 37, 38, 39, 40, 41, 42]. Esses vórtices causam um efeito resistivo quando penetram no material conhecido como phase-slips (PL) [43], e são diferentes tanto em forma quanto em velocidade. Vórtices de Abrikosov são circulares, isotrópicos e possuem velocidade em torno de  $10^3 m/s$ , enquanto que os vórtices cinemáticos são elípticos, anisotrópicos e se movimentam á aproximadamente  $10^5 m/s$  [44]. Supercondutores percorridos por corrente externa já são utilizados em detectores single-photon, quando um único fóton de radiação ultravioleta à infravermelha atinge um nanofio supercondutor [45, 46].

Quando uma corrente externa longitudinal é aplicada no supercondutor, um par vórtice-antivórtice cinemático (V - Av) pode surgir quando a primeira corrente crítica  $J_{c1}$ é alcançada no sistema. Esses pares podem aparecer no centro do material perpendicular à corrente externa, e saem da amostra pelas laterais, perpendicular à corrente aplicada, ou podem ser formados nas laterais dirigindo-se ao centro onde se aniquilam como pode ser visto na Figura 1.5.

O tamanho dos contatos metálicos e da amostra podem influenciar o comportamento das PL, no caso unidimensional (nanofio) onde a amostra possui largura e espessura We w respectivamente, se  $W \ll \xi$  e  $w \ll \xi$ , a aparição dos pares V - Av são chamados de *phase-slip center* (PLC). Para o caso bidimensional (filme fino) quando  $W \gg \xi$  e  $w \ll \xi$ , pode ocorrer a formação de *phase-slip line* (PSL), que já é bastante estudada teoricamente [36, 42, 47], e foi observada experimentalmente por Sivakov *et al.* [44]. A Figura 1.6 mostra o comportamento da primeira corrente crítica  $J_{c1}$ , em um filme fino supercondutor com vários defeitos em seu centro simulados por  $\tau^1$ . Para  $\tau = 1$  o

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Na simulação feita por J. Barba em [42],  $\tau(x, y)$  representa uma função de temperatura crítica local. Quando  $\tau < 1$  tem-se um supercondutor com  $T_c$  menor, e para  $\tau > 1$  a temperatura crítica é maior.



Figura 1.5: Nucleação dos pares V - Av no centro do material, eles seguem em direção às bordas por onde deixam a amostra [36].

material não possui defeitos (amostra homogênea),  $\tau < 1$ , tem-se um supercondutor com  $T_c$  menor, e quando  $\tau > 1$  o material supercondutor está em contato com outro com  $T_c$  maior. No trabalho de Berdiyorov *et al.* [36], pode-se ver claramente a influência dos contatos metálicos sobre a corrente crítica  $J_{c1}$ , e os vórtices cinemáticos que surgem no centro do supercondutor.



Figura 1.6: (a) Gráfico da corrente versus a voltagem, para amostra com defeitos internos simulado por  $\tau$ . Até a primeira descontinuidade  $J_{c1}$  tem-se o estado Meissner, em seguida inicia-se o estado resistivo até  $J_{c2}$ , onde a supercondutividade é suprimida mas não totalmente destruída. Na sequência aparece um  $J_{c3}$  que representa a supercondutividade residual na amostra [42].

Diferentemente dos vórtices de Abrikosov  $(V_{Ab})$ , os  $V'_ks$  não são formados por campos magnético externo, eles surgem das inomogeneidades do campo da própria amostra, quando o parâmetro de ordem oscila entre seu valor máximo e mínimo em detrimento da corrente aplicada [35]. A aplicação do campo externo aumenta o estado resistivo e afeta a velocidade dos  $V'_ks$ , devido sua contribuição para a assimetria da densidade das linhas de corrente supercondutora que afeta diretamente sua dinâmica e consequentemente sua velocidade. Por outro lado, a distribuição das correntes está diretamente ligada à velocidades dos  $V'_ks$ , isto é, quanto mais uniforme for o fluxo da corrente, maior será a velocidade dos vórtices cinemáticos [36, 48].

### **1.3** Supercondutores de duas bandas: o caso do $MgB_2$

Abrikosov, utilizando a teoria GL, mostrou que supercondutores podem ser separados em dois tipos dependendo do valor de  $\kappa^2$ : tipo-I para  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , onde os vórtices se atraem até atingir o estado normal e os do tipo-II, onde  $\kappa > 1/\sqrt{2}$  e os vórtices se arranjam em uma rede triangular repelindo-se uns aos outros [18]. Uma propriedade fundamental do estado de vórtice nesta teoria, é que cada vórtice só pode ter um quantum inteiro de fluxo magnético, e que foi determinado experimentalmente em [49, 50].

Contudo, a descoberta do supercondutor de duas bandas, o diborato de magnésio,  $(MgB_2)$  mudou drasticamente esse cenário. Em 2001, Nagamatsu *et al* [51], publicaram um trabalho onde a curva da resistividade do diborato de magnésio caía abruptamente a zero em uma temperatura de 39 K, veja a Figura 1.7(a).Ele se tornou o material mais estudado recentemente em virtude das caraterísticas físicas distintas dos materiais de uma banda. Supercondutores de duas bandas podem ser estudados usando a teoria de Ginzburg-Landau para supercondutores de duas bandas (2B-TDGL). Nela a energia livre de Gibbs possui um termo de acoplamento entre as bandas do tipo Josephson [52, 53, 54]. O  $MgB_2$  possui propriedades físicas diferentes daquelas encontradas em supercondutores de uma banda por exemplo, Liu *et al*, previram teoricamente a existência de dois gaps nesse material [55], que foram encontrados experimentalmente por F. Giubileo *et al.* [56].

A descoberta do  $MgB_2$  animou os estudos acerca da procura de um supercondutor de alto  $T_c$ , restava saber se este novo elemento era um supercondutor convencional, cujo pareamento elétron-fônon obedecia a teoria BCS, ou não convencional com algum novo tipo de acoplamento entre elétrons e fônons. A resposta a essa questão veio por meio de

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>O parâmetro  $\kappa$ , corresponde à razão entre  $\lambda \in \xi$ , sendo considerado um divisor entre os supercondutores do tipo-I e II, e será discutido com mais detalhes na seção 2.4.3.



Figura 1.7: (a) Gráfico da resistividade versus a temperatura do  $MgB_2$  encontrada por Nagamatsu em 2001 [51]. (b) Os dois gaps obtidos de forma experimental, a energia de cada gap é  $\Delta_1 = 2.3$  meV e  $\Delta_2 = 7.1$  meV [59].

um resultado experimental conhecido como efeito isótopo [57], que mostrou um comportamento elétron-fônon tipo BCS. Porém, resultados teóricos e experimentais mostraram a existência de dois gaps [55, 58, 59]; supercondutores convencionais possuem apenas um gap, o que deixou o  $MgB_2$  com um comportamento anômalo, portanto, destoante da teoria BCS. Observe o gráfico da Figura 1.7(b).

Embora a temperatura crítica seja 39 K, a análise em separado das bandas mostrou que elas possuem temperaturas abaixo desse valor, a saber  $T_{c1} = 38K$  e  $T_{c2} = 3, 9K$  [60]. O acoplamento entre as bandas em supercondutores multibandas pode levar a frustração entre as fazes das bandas, podendo levar o sistema ao um estado de quebra de simetria de tempo reverso (time-reversal symetry-breaking) (TRSB) [55, 56, 61, 62, 63], além de poder gerar vórtices fracionários, isto é, vórtices não convencionais que não carregam um quantum inteiro de fluxo [64, 65, 66].

Não demorou muito para vários pesquisadores buscarem explicações sobre esses comportamentos inusitados [67, 68, 69]. A evidência experimental foi discutida por Silaev em 2011 [70]. As investigações continuaram e previram que devido à competição entre os comprimentos da escala, um comportamento não monotônico das interações entre vórtices pode ser considerado, ou seja, um vórtice pode atrair outro a uma grande distância e repelir-se em curtas distâncias [69, 71, 72, 73, 74]. Vórtices em  $MgB_2$  supercondutores foram observados por meio da técnica *Bitter decoration* [74, 75] e reproduzidos em outras simulações numéricas [76, 77, 78]. Outras técnicas experimentais já exploraram o  $MgB_2$ tais como SQUIDS [79, 80, 81, 82], cálculos de primeiros princípios e medidas RAMAN [83], além de medidas de calor específico e capacidade calorífica [84, 85].

Com tamanho empenho dos pesquisadores em desvendar os segredos do  $MgB_2$ , filmes finos desse material estão sendo feitos com o objetivo de substituir compostos de  $Nb_3Sn$ e NbTi e assim diminuir os custos do processo de fabricação desse tipo de material supercondutor [86].

Nesta tese foram investigas as propriedades da matéria de vórtices<sup>3</sup> em supercondutores do tipo II, com e sem defeitos, utilizando a teoria GL para uma e duas bandas. Em um primeiro momento, uma amostra com defeitos foi submetida á um campo magnético externo de onde se obteve algumas propriedades física tais como, magnetização, energia livre, susceptibilidade magnética, um diagrama de fases e o parâmetro de ordem. Em outra situação, os defeitos dessa mesma amostra, foram preenchidos por um material supercondutor com  $T_c$  maior. Nesse novo cenário, uma corrente externa foi aplicada onde obtivemos as curvas da voltagem com a corrente crítica (I - V), a resistividade, o par vórtice-antivórtice e um par de vórtices de Abrikosov quando um campo magnético externo é aplicado na amostra. Na segunda parte, um material com e sem defeitos, baseado na teoria dos materiais supercondutores de duas bandas é submetido a um campo externo. Controlando parâmetros tais como, o tamanho do defeito e a condição de contorno do material, quando este está em imerso no vácuo ou em contato com outro material supercondutor com  $T_c$  maior, obtivemos a magnetização, vorticidade e o comportamento do parâmetro de ordem.

Esta Tese está ordenada da seguinte forma: no Capítulo 1, foi feita uma introdução geral, dando enforque histórico acerca da supercondutividade seguido de algumas importantes propriedades físicas. No Capítulo 2 há uma revisão dos conceitos sobre materiais supercondutores cujo enfoque está no formalismo teórico que engloba todo este trabalho. O Capítulo 3 apresenta uma revisão acerca dos métodos utilizados na simulação computacional. No Capítulo 4 temos os resultados do material dentro do conceito dos materiais supercondutores de duas bandas com campo externo aplicado no vácuo e em contato com outro material supercondutor com  $T_c$  maior. No Capítulo 5 realizamos uma simulação em uma amostra com defeitos submetida à um campo magnético e corrente externa. No Capítulo 6 apresentamos as conclusões e perspectivas futuras, e finalmente, o Apêndice com detalhamento de algumas equações importantes.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>As linhas de fluxo magnético que atravessam um material supercondutor na forma de um tubo, é comumente chamada de matéria de vórtices (*vortex matter*)[87].

### Conceitos básicos da Supercondutividade

### 2.1 Equações de London

Após 20 anos do descobrimento da supercondutividade os irmãos London desenvolveram uma teoria fenomenológica que descreve macroscópicamente materiais supercondutores. Proposta em 1935 [9], essa teoria, baseada na teoria do modelo do <sup>4</sup>He superfluido, considera que, um material no estado supercondutor, existam tanto elétrons quanto pares de Copper, porém apenas uma fração deste último. Considerando que n é a quantidade total de elétrons então  $n_n$  será o número de eléltrons normais e  $n_s$  quantidade de elétrons supercondutores, ou seja,

$$n = n_s + n_n. \tag{2.1}$$

Por definição a densidade de corrente supercondutora  ${\bf J}$  será:

$$\mathbf{J}_s = -n_s e^* \mathbf{v}_s,\tag{2.2}$$

onde  $e^*$  é a carga e **v** a velocidade da supercorrente eletrônica. Partindo agora da 2° lei de Newton podemos escrever a seguinte equação de movimento

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e^* \mathbf{E},\tag{2.3}$$

onde  $m^*$  é a massa dos superelétrons e **E** o campo elétrico aplicado. Nessa equação podemos ver que a resultante não possui forças resistivas e sim apenas a força elétrica como deve ser um para uma supercondutor. Derivando a equação 2.2 em relação ao tempo obtemos

$$\frac{d\mathbf{J}_s}{dt} = -n_s e^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt}.$$
(2.4)

Comparando as equações 2.4 e 2.3, teremos

$$\frac{d\mathbf{J}_s}{dt} = \frac{n_s e^{*2}}{m^*} \mathbf{E},\tag{2.5}$$

que é conhecida como primeira equação de London. Ela é equivalente à segunda lei de Newton aplicada aos elétrons supercondutores de materiais de resistividade nula. Se tomarmos o rotacional em ambos os lados de 2.5 vamos ter

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{J}_s) = \frac{n_s e^{*2}}{m^*} (\nabla \times \mathbf{E}).$$
(2.6)

Utilizando agora a lei de Ampère

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J},\tag{2.7}$$

e a lei de Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},\tag{2.8}$$

na equação 2.6, e aplicando o rotacional obtemos

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \frac{4\pi n_s (e^*)^2}{m^* c^2} \mathbf{B} = 0, \qquad (2.9)$$

ou então

$$\lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} = 0, \qquad (2.10)$$

onde

$$\lambda_L^2 = \frac{m^* c^2}{4\pi n_s (e^*)^2}.$$
(2.11)



Figura 2.1: Comprimento de penetração de London  $\lambda$ . O campo externo penetra em uma pequena profundidade no supercondutor decrescendo exponencialmente no interior do supercondutor.

A equação 2.10 é conhecida como a segunda equação de London e a constante  $\lambda_L$ , é chamada de *comprimento de penetração de London*. Se utilizarmos a seguinte identidade

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = -\nabla^2 \mathbf{B} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}), \qquad (2.12)$$

e a lei de Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \tag{2.13}$$

em (2.27) teremos

$$\frac{\partial^2 \mathbf{B}_{\mathbf{z}}}{\partial z} - \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B}_{\mathbf{z}} = 0, \qquad (2.14)$$

cuja solução é dada por

$$\mathbf{B} = B_0 e^{-x/\lambda_L}.\tag{2.15}$$

A equação 2.15 mostra que o campo magnético externo aplicado vai a zero conforme penetra na amostra o que indica a existência do efeito *Meissner*, veja a Figura 2.1. A teoria dos irmãos London, embora macroscópica, explica de modo satisfatório a supercondutividade tipo-II além dos estados de vórtice nesses supercondutores não levando em conta a estrutura física nem o tamanho dos vórtices.

### 2.2 Teoria Fenomenológica de Ginzburg-Landau

#### 2.2.1 As equações GL

A teoria de Ginzburg e Landau está alicerçada na teoria das transições de fase de  $2^{a}$  ordem Landau [88], em que trata da magnetização do material quando atinge a temperatura crítica  $T_c$ , chamado também de ponto Curie. O estado supercondutor é caracterizado por uma transição de faze de segunda ordem do estado normal para o estado supercondutor. Em um material supercondutor, a transição para o estado supercondutor acontece quando a temperatura do material atinge uma temperatura crítica o qual, a partir deste valor, a resistividade do material vai a zero e a corrente, chamada agora de corrente supercondutora, flui sem resistência. Além disso, o calor específico, a magnetização mudam drasticamente. O efeito mais impressionante, talvez seja o *efeito Meissner* onde, um campo magnético externo aplicado no material, é totalmente expulso de dentro dele e ela se torna um diamagneto perfeito.

A transição para o estado supercondutor/normal pode ocorrer de maneira abrupta caracterizado por uma descontinuidade no ponto crítico, nesse caso teremos uma transição de fase de primeira ordem, ou suave, quando o estado supercondutor começa a se desfazer porém, a amostra ainda mantém partes no estado normal e supercondutor, nesse caso a transição de fase será de segunda ordem.

Em uma transição de primeira ordem temos uma destruição abrupta do estado supercondutor quando se aplica um campo magnético externo e se alcança um valor crítico  $H_c$ do campo, veja a Figura 2.2(a). Entretanto, em alguns supercondutores, o campo aplicado penetra no material sem aniquilar a supercondutividade. Nesses materiais o campo magnético atravessa a amostra na forma de vórtices onde cada um carrega um *quantum de fluxo*, dessa forma, o estado Meissner-Ochsenfeld e o estado de vórtices passam a coexistir como ilustra a Figura 2.2(b). Materiais supercondutores com esse tipo de comportamento passaram a ser chamados de supercondutores do tipo-II, enquanto aqueles cujo estado supercondutor é destruído rapidamente são conhecidos como tipo-I. Na Figura 2.2(a) podemos observar que conforme o campo externo aumenta até o primeiro vórtice entrar na amostra então, nesse ponto, temos o primeiro campo crítico  $H_{c1}$ . Contudo, elevando-se



Figura 2.2: Em (a) temos o comportamento entre os supercondutores do tipo-I e II em função da penetração do campo externo, enquanto que (b) ilustra a coexistência entre os estados de vórtice e Meissner.

ainda mais o campo externo o número de vórtices aumenta até extinguir totalmente o efeito supercondutor atingindo assim um outro campo crítico  $H_{c2}$ .

Landau notou que a transição de fase supercondutora do tipo-II era semelhante à sua teria das transições de fase de segunda ordem, que descreve semi-classicamente a magnetização em termos de um parâmetro de ordem  $\eta$ , onde a energia livre de Gibbs é expandida em uma série de potências da seguinte forma

$$G(P,T,\eta) = G_0 + \rho\eta + A\eta^2 + C\eta^3 + B\eta^4 + \dots, \qquad (2.16)$$

onde os coeficientes A,B, C e  $\rho$  são são funções de *P*, *T*, e  $\eta$ . Nessa teoria precisamos considerar C = 0, pois para  $C \neq 0$ , a transição ocorre em pontos isolados tal como uma transição líquido-gás, o que não é característico das transições de fase de segundo tipo. Na equação 2.16, o parâmetro de ordem é igual a zero ( $\eta = 0$ ) acima do ponto crítico e diferente de zero ( $\eta \neq 0$ ) abaixo dele. Ao minimizarmos a energia livre teremos,

$$\frac{\partial G}{\partial \eta} = \rho + 2A\eta + 3C\eta^2 + 4B\eta^3. \tag{2.17}$$

As soluções, cuja equação 2.17 é satisfeita, são

$$\begin{cases} \rho = 0, \\ \eta = 0, \end{cases}$$
(2.18)

е

$$\begin{cases} \rho = 0, \\ \eta \neq 0, \end{cases}$$
(2.19)

onde nas duas situações  $\rho$  é sempre zero.

O parâmetro de ordem introduzido por Ginzburg e Landau para a teoria supercondutora tipo-II corresponde à separação entre o estado normal, também chamado de estado desordenado, e o supercondutor que surge abaixo de  $T_c$ , onde o sistema se encontra em um estado chamado de estado ordenado. O parâmetro de ordem é igual a zero ( $\eta = 0$ ) quando a temperatura está igual ou acima de  $T_c$ , e diferente de zero ( $\eta \neq 0$ ) abaixo do ponto crítico onde ocorreu a transição de fase. Considerando que  $\eta$  é pequeno e varia de forma lenta e suave nas proximidades de  $T_c$ , ele pode ser expandido em uma série de potências tal como foi feito na equação 2.16, entretanto, como se trata de uma transição supercondutora de segunda ordem, a potência ímpar não é interessante pois ela caracteriza transições de primeira ordem. Podemos ver também, por meio da equação 2.17 e suas soluções 2.18 e 2.19, que  $\rho$  é zero, assim 2.16 fica

$$G(P, T, \eta) = G_0 + \alpha \eta^2 + \beta \eta^4.$$
(2.20)

Na equação 2.20,  $\beta$  controla a concavidade da função e precisa ser positivo, pois para  $\beta < 0$  a função diverge e não obtemos nenhum resultado satisfatório. Contudo, para  $\alpha > 0$  teremos um mínimo em  $\eta = 0$  e para  $\alpha < 0$  o mínimo será em  $\eta \neq 0$ . Logo, podemos escrever a seguinte relação para  $\alpha$ :

$$\begin{cases} \alpha = 0 \quad \text{se} \quad T > T_c, \\ \alpha \neq 0, \quad \text{se} \quad T < T_c. \end{cases}$$
(2.21)

A teoria de Landau não apresenta singularidades em  $T = T_c$ , portanto ele escreveu a constante  $\alpha$  da seguinte forma

$$\alpha = \alpha_0 (T - T_c), \tag{2.22}$$
e a equação 2.19 se torna:

$$\alpha = \begin{cases} 0, & \text{se } T \ge T_c, \\ \alpha_0(T - T_c), & \text{se } T < T_c. \end{cases}$$
(2.23)

Landau e Ginzburg adaptaram a equação 2.20 que descreve a magnetização no ponto Curie macroscopicamente para a transição de fase supercondutora de ordem dois. Então, em 1950, eles desenvolveram uma teoria para a supercondutividade e a equação 2.20 ficou

$$G = G_0 + \alpha \Psi^2 + \frac{\beta}{2} \Psi^4,$$
 (2.24)

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são os parâmetros fenomenológicos e  $\Psi(\mathbf{r})$  é o parâmetro de ordem complexo que varia espacialmente (veja o gráfico da equação 2.24 na Figura 2.3), ele é igual a zero no estado normal e diferente de zero no estado supercondutor.



Figura 2.3: Gráfico da equação 2.24. A energia livre de Ginzburg-Landau para dois valores de  $\alpha$ . Quando  $\alpha < 0$ , a curva apresenta dois mínimos característicos de uma transição de fase de segunda ordem, o que significa que o sistema se encontra na fase ordenada e portanto  $T < T_c$ . Quando  $T > T_c \rightarrow \alpha > 0$ , e a fase passa a ser desordenada no qual  $\Psi = 0$ . O sinal de  $\beta$  controla a concavidade da função.

Inicialmente a teoria GL não tinha noção exata do que seria o parâmetro de ordem para o estado supercondutor, ele foi considerado uma função de onda dos elétrons supercondutores tal como na equação de Schrödinger porém, foi identificada mais a frente que ela correspondia à densidade dos pares de Cooper.

# 2.3 Derivações da energia livre GL: O parâmetro de ordem e densidade de corrente

Vamos agora modificar a equação 2.24, adaptando-a conforme as características físicas do estado supercondutor conforme feito por Landau e Ginzburg [16, 17], escrever a energia livre GL e obter as duas equações principais da teoria que são o termo não linear dependente do parâmetro de ordem que fornece o potencial repulsivo e a densidade de corrente supercondutora.

A energia livre pode ser escrita em termos da energia livre de Helmholtz ou de Gibbs. A primeira trata da atuação de um campo magnético externo variável que induz uma corrente interna enquanto que na segunda o campo magnético é constante. Vamos partir da densidade de energia livre com campo externo aplicado, proposta por GL, dada por

$$F_{s} - F_{n} = \int_{V} dV \left\{ \alpha |\Psi|^{2} + \frac{1}{2} \beta |\Psi|^{4} + \frac{1}{2m^{*}} \left| \left[ -i\hbar \nabla - \frac{e^{*}}{c} \mathbf{A} \right] \Psi \right|^{2} + \frac{(\mathbf{h} - \mathbf{H}_{0})^{2}}{8\pi} \right\},$$
(2.25)

onde  $F_s$  e  $F_n$  correspondem as energias no estado supercondutor e normal respectivamente,  $\Psi$  é o parâmetro de ordem que separa o estado normal do estado supercondutor (energia de condensação do estado supercondutor). Ele é nulo para valores acima ou igual a temperatura crítica e diferente de zero abaixo dela, **A** é o potencial vetor,  $\alpha \in \beta$  são as constantes fenomenológicas já discutidos anteriormente, sendo que  $\alpha < 0 \in \beta > 0$ ;  $m^* \in e^*$  correspondem a massa e a carga dos pares de Cooper, o termo

$$\frac{1}{2m^*} \left| \left[ -i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right] \Psi \right|^2, \qquad (2.26)$$

é a energia cinética dos super elétrons. O último termo, nada mais é do que a diferença entre os campos induzido  $\mathbf{h}$  e aplicado  $\mathbf{H}_0$ , ou seja, é a energia necessária para manter o campo externo fora da amostra e assegurar o estado supercondutor. Para encontrar as equações de GL devemos minimizar a energia livre, equação 2.25, com relação a  $\Psi \in \mathbf{A}$ , isto é,  $\delta F_s / \delta \Psi^* \in \delta F_s / \delta \mathbf{A}$ , pois o estado supercondutor é caracterizado por um estado de mínima energia. Para a primeira equação GL temos<sup>1</sup>

$$\frac{\delta}{\delta\Psi^*}(F_s - F_n) = 0, \qquad (2.27)$$

$$\frac{\delta}{\delta\Psi^*}[\alpha(T)\Psi^*\Psi] = \alpha(T)\Psi\delta\Psi^*, \qquad (2.28)$$

$$\frac{\delta}{\delta\Psi^*} \left[ \frac{\beta}{2} (\Psi^*\Psi)^2 \right] = \beta(\Psi^*\Psi) \Psi \delta\Psi^*, \qquad (2.29)$$

$$\frac{1}{2m^*}\frac{\delta}{\delta\Psi^*}\left[-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right]^2(\Psi^*\Psi) = \frac{1}{2m^*}\left[-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right]^2\Psi\delta\Psi^*,\tag{2.30}$$

$$\frac{\delta}{\delta\Psi^*} \left[ \frac{\mathbf{H}^2}{8\pi} \right] = 0. \tag{2.31}$$

Juntando as equações 2.28 - 2.31, chegamos em

$$\int 0dVr = \int dV \left[ \alpha(T)\Psi + \beta(\Psi^*\Psi)\Psi + \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi \right] \delta\Psi^*, \qquad (2.32)$$

 $ou^2$ 

$$\alpha(T)\Psi + \beta(\Psi^*\Psi)\Psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)^2 \Psi = 0.$$
(2.33)

A equação 2.33 é conhecida como primeira equação de GL. Ela se assemelha a equação de Schrödinger e mostra como o parâmetro de ordem pode variar na amostra supercondutora. Obtemos também a seguinte condição de contorno

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \left( -i\hbar\nabla - \frac{-e^*}{c} \mathbf{A} \right) \bigg|_S = 0, \qquad (2.34)$$

onde  $\mathbf{n}$  é um vetor unitário norma à superfície que garante que a supercorrente não atravessa o material perpendicularmente. Essa condição de fronteira foi generalizada por

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Lembrando que:  $|\Psi|^4 = (\Psi^*\Psi)^2 e \partial |\Psi|^4 / \partial \Psi^* = 2(\Psi^*\Psi)\Psi = 2|\Psi|^2\Psi.$ 

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Do teorema fundamental do cálculo:  $\int \eta M d^3 r = 0$ , onde  $\eta = 0$ .

de Gennes como

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \left( -i\hbar \nabla - \frac{-e^*}{c} \mathbf{A} \right) \bigg|_S = \frac{i}{b} \Psi \bigg|_S, \qquad (2.35)$$

onde b é uma constante que depende do tipo de material que se encontra em contato com a amostra supercondutora, ou seja:

$$b \begin{cases} > 0 \to \text{metal normal,} \\ < 0 \to \text{supercondutor com } T_c \text{ maior,} \\ = 0 \to \text{material magnético,} \\ = \infty \to \text{isolante ou vácuo.} \end{cases}$$
(2.36)

Para obtermos a segunda equação GL fazemos  $\delta F_s/\delta {\bf A},$  isto é,

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}}(F_s - F_n) = \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \int_V dV \left\{ \alpha |\Psi|^2 + \frac{1}{2} \beta |\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left[ -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right] \Psi \right|^2 \right\} + \frac{(\mathbf{h} - \mathbf{H_0})^2}{8\pi}.$$
 (2.37)

Temos então que

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}}(F_s - F_n) = 0, \qquad (2.38)$$

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \alpha |\Psi|^2 = 0, \qquad (2.39)$$

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \frac{1}{2} \beta |\Psi|^4 = 0, \qquad (2.40)$$

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \frac{1}{2m^*} \left\| \left[ -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right] \Psi \right\|^2 = \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left( -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \Psi^* \Psi,$$

$$= \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar \nabla \Psi^* - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \Psi^* \right) \cdot \left( i\hbar \nabla \Psi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \Psi \right),$$

$$= \frac{1}{2m^*} \left[ \left( -\frac{e^*}{c} \Psi^* \right) \cdot \left( -i\hbar \nabla \Psi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \Psi \right) + \left( i\hbar \nabla \Psi^* - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \Psi^* \right) \cdot \left( -\frac{e^*}{c} \Psi \right) \right],$$
$$= \frac{1}{2m^*} \left[ \left( \frac{i\hbar e^*}{c} \Psi^* \nabla \Psi \right) + \left( \frac{e^{*2}}{c} \right) \Psi^* \mathbf{A} \Psi - \left( \frac{i\hbar e^*}{c} \Psi \nabla \Psi^* \right) + \left( \frac{e^{*2}}{c} \right)^2 \Psi \mathbf{A} \Psi^* \right],$$

$$= \frac{1}{2m^*} \left[ \frac{i\hbar e^*}{c} \left( \Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right) + 2 \left( \frac{e^*}{c} \right)^2 \Psi^* \mathbf{A} \Psi \right].$$
(2.41)

E agora, o termo da energia magnética

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \left[ \frac{(\mathbf{h} - \mathbf{H}_{\mathbf{0}})^2}{8\pi} \right] = \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \left[ \frac{(\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}_{\mathbf{0}})^2}{8\pi} \right],$$

$$= \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}} \left[ \frac{(\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}_0)(\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}_0)}{8\pi} \right],$$

$$=\frac{2(\nabla\times\mathbf{A}-\mathbf{H_0})(\nabla\times\delta\mathbf{A})}{8\pi},$$

$$=\frac{1}{4\pi}\bigg[\nabla\cdot(\delta\mathbf{A}\times(\nabla\times\mathbf{A})-\mathbf{H_0})+\delta\mathbf{A}\cdot(\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A})-\mathbf{H_0})\bigg],$$
(2.42)

onde usamos a seguinte relação vetorial:  $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\nabla \times \mathbf{a}) - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$ , sendo que,  $\mathbf{a} = \delta \mathbf{A}$  e  $\mathbf{b} = \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}_{\mathbf{0}}$ . Substituindo as equações 2.38 - 2.42, em 2.37, teremos

$$0 = \frac{1}{2m^*} \int_V \delta \mathbf{A} \left[ \frac{i\hbar e^*}{c} \left( \Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right) + 2 \left( \frac{e^*}{c} \right)^2 \Psi^* \mathbf{A} \Psi \right] dV + \int_V \frac{1}{4\pi} \left[ \nabla \cdot \left( \delta \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right) - \mathbf{H_0} \right) + \delta \mathbf{A} \cdot \left( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H_0} \right) \right] \delta \mathbf{A} dV.$$
(2.43)

Utilizando o teorema da divergência $^3$  no segundo termo da direita e reorganizando a

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Teorema de Gauss ou da divergência:  $\int_V dV \nabla \cdot \mathbf{P} = \oint_S dS(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P})$ , onde  $\hat{\mathbf{n}}$  é um vetor normal à

equação acima chegamos em

$$0 = \int_{V} \delta \mathbf{A} \left[ \frac{i\hbar e^{*}}{2m^{*}c} \left( \Psi^{*} \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^{*} \right) + \frac{e^{*2}}{c^{2}m^{*}} \Psi^{*} \mathbf{A} \Psi \right] dV + \frac{1}{4\pi} \oint_{S} dS \left[ \widehat{n} \cdot \left( \delta \mathbf{A} \times \left( \nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \right) \right) \right] dV + \frac{1}{4\pi} \int_{V} \left[ \delta \mathbf{A} \cdot \left( \nabla \times \left( \nabla \times \mathbf{A} \right) - \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \right) \right] dV.$$
(2.44)

Superficialmente o campo de indução magnética,  $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{H}_{\mathbf{0}}$ , é igual ao campo externo, portanto, a integral de superfície é igual a zero, logo

$$0 = \int_{V} \delta \mathbf{A} \left[ \frac{i\hbar e^{*}}{2m^{*}c} \left( \Psi^{*} \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^{*} \right) + \frac{e^{*2}}{c^{2}m^{*}} \Psi^{*} \mathbf{A} \Psi \right] dV + \frac{1}{4\pi} \int_{V} \left[ \delta \mathbf{A} \cdot \left( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \right) \right] dV, \qquad (2.45)$$

ou então

$$0 = \int_{V} \delta \mathbf{A} \Biggl\{ \Biggl[ \frac{i\hbar e^{*}}{2m^{*}c} \left( \Psi^{*} \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^{*} \right) + \frac{e^{*2}}{c^{2}m^{*}} \Psi^{*} \mathbf{A} \Psi \Biggr] + \frac{1}{4\pi} \Biggl[ \delta \mathbf{A} \cdot \left( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H_{0}} \right) \Biggr] \Biggr\} dV.$$
(2.46)

Para um  $\delta \mathbf{A}$  qualquer, tem-se,

$$\frac{i\hbar e^*}{2m^*c}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) + \frac{e^{*2}}{c^2m^*}\Psi^*\mathbf{A}\Psi + \frac{1}{4\pi}\left(\nabla\times\left(\nabla\times\mathbf{A}\right) - \mathbf{H_0}\right) = 0, \qquad (2.47)$$

então,

$$\frac{1}{4\pi} \Big( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H_0} \Big) = -\frac{i\hbar e^*}{2m^* c} \left( \Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right) - \frac{e^{*2}}{c^2 m^*} \Psi^* \mathbf{A} \Psi.$$
(2.48)

Utilizando a lei de Ampère,<sup>4</sup> finalmente chegamos em

$$\mathbf{j}_s = -\frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^* c} \mathbf{A} |\Psi|^2, \qquad (2.49)$$

que é conhecida como a segunda equação GL. As equações 2.33 e 2.49, são as famosas superfície. Temos assim:  $\frac{1}{4\pi} \int_V \nabla \cdot \left( \delta \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H_0} \right) dV = \oint_S \hat{\mathbf{n}} \cdot \left( \delta \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{H_0} \right) dS.$  ${}^4\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j_s} \Rightarrow \mathbf{j_s} = \frac{\mathbf{c}}{4\mathbf{B}} \left( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right)$  equações de Ginzburg e Landau para supercondutores mesoscópicos. A primeira nos mostra o comportamento do parâmetro de ordem enquanto a segunda dá as correntes, ou seja, a resposta diamagnética do supercondutor. São equações não lineares que precisam ser resolvidas de forma auto-consistente com a equação 2.35.

# 2.4 Comprimentos característicos e o parâmetro de Ginzburg-Landau

As equações de GL geram dois comprimentos característicos da teoria dos supercondutores: o comprimento de penetração  $\lambda(T)$  que aparece na teoria de London e mede o quando o campo magnético adentra o material e o comprimento de coerência  $\xi(T)$ que corresponde a variação espacial do parâmetro de ordem. Da relação entre esses dois comprimentos obtemos o parâmetro de Ginzburg-Landau (GL), o qual separa os supercondutores em tipo-I e tipo-II.

### 2.4.1 Comprimento de penetração $(\lambda)$ do campo magnético

Para obter o comprimento de penetração vamos considerar um campo magnético fraco sendo aplicado no supercondutor em uma região no centro da amostra, longe das bordas, onde o parâmetro de ordem varia pouco ou é praticamente constante. Com essas considerações, vamos aplicar o rotacional na equação 2.49 e assim obter

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{e^*}{m^* c} |\Psi|^2 \nabla \times \mathbf{A}, \qquad (2.50)$$

ou

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} = -\frac{4\pi e^{*2}}{m^* c} |\Psi|^2 \mathbf{H}.$$
(2.51)

Utilizando a identidade vetorial

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H}, \qquad (2.52)$$

onde  $obtemos^5$ 

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \frac{4\pi e^{*2} |\Psi|^2}{m^* c^2} \mathbf{H}.$$
 (2.53)

Reescrevendo 2.53 ficamos com

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{H},\tag{2.54}$$

cuja solução, dada por  $\mathbf{H} = H_0 e^{-r/\lambda}$ , é a mesma obtida na equação 2.15. Dessa forma o comprimento de penetração fica sendo definido por

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^* c^2}{4\pi e^{*2} |\Psi|^2}},\tag{2.55}$$

que é o mesmo da equação 2.11 obtido na teoria de London. Se considerarmos a densidade de elétrons supercondutores como  $n_s = |\Psi|^2 = |\alpha|/\beta$ , a equação 2.55 se torna

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^* c^2 \beta}{4\pi e^{*2} n_s}} = \sqrt{\frac{m^* c^2 \beta}{4\pi e^{*2} |\alpha|}}.$$
(2.56)

 $\lambda$  depende da temperatura já que  $\alpha(T)=-\alpha_0(1-T/T_c),$  portanto, pode ser expresso como

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\sqrt{\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}},\tag{2.57}$$

onde  $\lambda_0$  independe da temperatura.

### **2.4.2** Comprimento de Coerência $(\xi)$

O comprimento de coerência pode ser obtido a partir da primeira equação GL sem a atuação de campo magnético externo ou correntes e na forma unidimensional, dessa forma, a equação 2.33 pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \beta|\Psi|^3 + \alpha\Psi = 0.$$
(2.58)

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>sabendo que,  $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ .

Vamos inserir um parâmetro adimensional  $\Psi = f \Psi_0$ , onde f corresponde a um parâmetro de ordem normalizado e  $\Psi_0$  corresponde ao estado de menor energia na equação anterior que ficará

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\Psi_0 f}{dx^2} + \beta\Psi_0 f^3 - |\alpha|\Psi_0 f = 0.$$
(2.59)

A constante  $\alpha = -|\alpha|$ , pois para o estado supercondutor a constante  $\alpha$  é negativa, e lembrando que  $\Psi_0 = \sqrt{|\alpha|/\beta}$ , teremos

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}\frac{d^2f}{dx^2} + \beta f^3 - |\alpha|f = 0.$$
(2.60)

O termo da derivada segunda é definido como o comprimento de coerência  $\xi$ ,

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}.$$
 (2.61)

Da mesma forma que  $\lambda$  depende do tempo,  $\xi$  também depende por causa de  $\alpha(T)$ , e pode ser escrito como

$$\xi(T) = \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}},$$
(2.62)

e  $\xi_0$  é independente da temperatura.

### 2.4.3 Tipos de supercondutores e o parâmetro $\kappa$

Existe um parâmetro adimensional definido na teoria GL que separa os materiais supercondutores em tipo-I e tipo-II. Chamado de parâmetro de GL,  $\kappa$ , ele é definido pela razão entre o comprimento de penetração e o comprimento de coerência, ou seja,

$$\kappa = \frac{\lambda}{\xi},\tag{2.63}$$

o que implica que  $\kappa$  independe da temperatura. Foi por meio do trabalho de Abrikosov[18] que  $\kappa$  passou a separar os tipos de supercondutores. A Figura 2.4(a,b) ilustra a dependência espacial do parâmetro de ordem em função de  $\lambda$  e  $\xi$ . Quando  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , temos supercondutores do tipo-I, característicos por não favorecem a formação de vórtices em



seu interior pois a energia na superfície é positiva.

Figura 2.4: Dependência espacial do parâmetro de ordem  $\psi$  e do campo magnético H. Em (a) para supercondutores do tipo I onde  $\xi >> \lambda$ , e em (b) tipo II onde  $\xi << \lambda$ .

Nesta situação,  $\xi >> \lambda$ , e quando um campo magnético é aplicado o estado supercondutor é destruído imediatamente. Entretanto, para  $\kappa > 1/\sqrt{2}$  a situação se inverte e  $\xi << \lambda$ , a energia passa a ser negativa, o que torna possível a penetração do campo externo na forma de vórtices os quais carregam um quantum de fluxo dado pela equação 2.75.

A magnetização em supercondutores obedece a relação  $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$  e o comportamento nesses dois tipos de supercondutores também difere em função do campo externo. A figura 2.5(a) mostra que a magnetização em um supercondutor tipo I aumenta negativamente com o campo aplicado (internamente B = 0) e quando atinge o campo crítico o estado supercondutor é destruído causando uma abrupta descontinuidade. Entretanto, para supercondutores tipo II, a magnetização possui um primeiro campo crítico  $H_{c_1}$ , na primeira descontinuidade. A partir daí,  $\mathbf{M}$  começa a diminuir suavemente (internamente  $B \neq 0$ ) até zerar, onde atinge-se o segundo campo crítico  $H_{c_2}$ , como podemos ver na Figura 2.5(b).

Os campos críticos  $H_c$ ,  $H_{c_1}$  e  $H_{c_2}$  são mostrados no diagrama de fase da Figura 2.6. Para amostras *bulk* o valor do campo crítico  $H_c$ , veja a Figura 2.6(a) é dado por

$$H_c(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\sqrt{2}\xi_T\lambda_T},\tag{2.64}$$

onde  $\Phi = hc/e^*$  é um quantum de fluxo. O campo  $H_{c_1} < H < H_{c_2}$ , entre  $H_{c_1}$  e  $H_{c_2}$ , Figura 2.6(b) é chamado de estado misto, estado de vórtices ou fase Shubnikov. Em meados de 1930, L. V. Shubnikov e colaboradores mostraram pela primeira vez experimentalmente



Figura 2.5: (a) apresenta a magnetização em função do campo aplicado em supercondutores tipo-I, onde existe um perfeito estado Meissner. Quando H atinge o campo crítico  $H_c$  o estado supercondutor é totalmente destruído. Em (b) o estado Meissner se mantém até atingir o primeiro campo crítico  $H_{c_1}$ . Entre  $H_{c_1}$  e  $H_{c_2}$  os vórtices entram no material sem destruição do estado supercondutor e passa a existir o estado misto ou Shubnikov.

a fase mista em ligas supercondutoras [16, 15]. O valor do segundo campo crítico é

$$H_{c_2}(T) = \kappa \sqrt{2} H_c = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi(T)^2}.$$
 (2.65)

Acima de  $H_{c_2}$  há ainda um terceiro campo crítico  $H_{c_3}$ , caracterizado por uma supercon-



Figura 2.6: Diagrama de fase H - T para supercondutores tipo-I onde existe um perfeito estado Meissner quando H atinge o campo crítico  $H_c$  e a supercondutividade é totalmente suprimida. (b) mostra o diagrama de fase para uma amostra macroscópica onde o estado Meissner se mantém até atingir o primeiro campo crítico  $H_{c_1}$ . Entre  $H_{c_1}$  e  $H_{c_2}$  os vórtices entram no material no qual passa a existir a fase Shubnikov. Após  $H_{c_3}$  não existe mais o estado supercondutor.

dutividade superficial,  $H_{c_2} < H < H_{c_3}$ , cuja espessura é da ordem de 10<sup>3</sup> Å, onde o estado supercondutor não foi totalmente destruído, e seu valor é da ordem de

$$H_{c_3}(T) = 2.4\kappa H_c \approx 1.7 H_{c_2}.$$
(2.66)

## 2.5 Vórtices em Supercondutores

Anteriormente falamos sobre o estado misto, que corresponde aos vórtices magnéticos que atravessam um material supercondutor do tipo-II sem destruir seu estado supercondutor. Esses vórtices surgem dentro do material supercondutor, eles são regiões de estado normal isto é, onde  $\xi \rightarrow 0$ , no centro do vórtice. Essas regiões de estado normal são energeticamente mais favoráveis quando um campo externo atinge um valor maior do que o primeiro campo crítico  $H_{c1}$ . Esses vórtices são mantidos pelas correntes que circulam ao seu redor, mantendo sua estrutura giratória, possuem um comprimento característico  $\lambda$  e carregam um quantum de fluxo. Iremos agora mostrar a quantização do fluxo magnético bem como a estrutura e energia dos vórtices.

### 2.5.1 Quantização do fluxo

A quantização do fluxo magnético em um supercondutor foi determinada em experimentos de Doll e Nabauer e por Deaver e Fairbank em 1961 [49, 50]. Eles consideraram um anel supercondutor sendo submetido a um campo magnético externo perpendicular à corrente supercondutora e encontraram um múltiplo inteiro do fluxo quântico  $\Phi_0$ , tal que

$$\Phi = n\Phi_0,\tag{2.67}$$

onde n é um número inteiro e  $\Phi_0$  é

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e} \simeq 2 \cdot 10^{-7} G \cdot cm^2.$$
(2.68)

Para obter esse valor vamos partir da densidade de supercorrente obtida do formalismo de Ginzburg-Landau que foi estudado na seção 2.3. Podemos escrever a segunda equação GL na seguinte forma

$$\mathbf{j}_s = \frac{e^*h}{m^*} |\Psi|^2 \nabla \varphi - \frac{e^{*2}}{m^*c} \mathbf{A} |\Psi|^2, \qquad (2.69)$$

utilizando o teorema de Stokes,

$$\Phi = \int_{S} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \int_{S} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \oint_{C} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}, \qquad (2.70)$$

e isolando o potencial vetor  $\mathbf{A}$  na equação 2.69 teremos

$$\mathbf{A} = \frac{\hbar}{2e} \nabla \varphi(\mathbf{r}) - \frac{m^* \mathbf{j}_s}{4e^2 |\Psi|^2}.$$
 (2.71)

Substituindo agora 2.71 em 2.70, tem-se

$$\Phi = \frac{\hbar c}{e^*} \oint_C \nabla \varphi \cdot d\mathbf{l} - \frac{m^* c}{e^{*2}} \oint_C \frac{\mathbf{js}}{|\Psi|^2} \cdot d\mathbf{l}.$$
(2.72)

Precisamos fazer aqui algumas considerações: como estamos considerando um anel supercondutor o parâmetro de ordem não varia transversalmente em relação à área do anel e sua fase  $\varphi$  deve variar em múltiplos inteiros de  $2\pi n$  ao percorrer todo o circuito, i.e.,

$$\oint_C \nabla \varphi \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n. \tag{2.73}$$

Como a integral percorre um caminho fechado temos que,  $\mathbf{j}_{\mathbf{S}} = 0$ , ou seja,  $\mathbf{j}_{\mathbf{S}}$  é perpendicular a *d*l. Logo, a equação 2.72 fica

$$\Phi = \frac{\hbar c}{e^*} \oint_C \nabla \varphi \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar c}{e^*} (2\pi n), \qquad (2.74)$$

como $\hbar=h/2\pi$ e que  $e^*=2e$  chegamos em

$$\Phi = \frac{hc}{2e}n = \Phi_0 n \qquad (n = 0, 1, 2, ...).$$
(2.75)

A equação 2.75 mostra que o fluxo magnético que atravessa um supercondutor é quantizado em valores inteiros de um valor fundamental  $\Phi_0$ , ou seja, um *quantum de fluxo* ou *fluxóide*.

#### 2.5.2 Estrutura e energia de um vórtice

Para fazer um estudo analítico acerca das características físicas dos vórtices, vamos considerar  $\kappa \gg 1$ , e  $\lambda \gg \xi$ . Essa aproximação, no limite de supercondutores de segundo tipo (limite de London), é bastante conveniente, pois  $|\Psi|^2$  pode ser ponderado como constante em toda a amostra supercondutora, o que garante um estudo analítico do sistema visto que as equações GL requerem solução numérica. Vamos utilizar a equação 2.49, mas inicialmente, consideraremos que  $\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|e^{i\phi(\mathbf{r})}$ , para poder escreve-la em função do módulo e da fase, como

$$\mathbf{j}_{\mathbf{s}} = \frac{e^*}{m^*} |\Psi|^2 \left( \hbar \nabla \phi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right).$$
(2.76)

Tomando o rotacional em ambos os lados de 2.76 teremos

$$\nabla \times \mathbf{j}_{\mathbf{s}} = \frac{e^*}{m^*} |\Psi|^2 \left( \hbar \nabla \times \nabla \phi - \frac{e^*}{c} \nabla \times \mathbf{A} \right), \qquad (2.77)$$

$$=\Phi_0 \frac{c^2}{8\pi^2 \lambda^2} (\nabla \times \nabla \phi) - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \mathbf{B}.$$
 (2.78)

Vamos então, analisar o caso de um único vórtice i, no plano xy, situado no ponto  $\mathbf{r}_i(x_i, y_j)$  e paralelo ao eixo z. Temos que integrar a equação 3.52, sobre uma área dentro do contorno  $\sigma$ , onde esta localizado o núcleo do vórtice e fazer uma transformação de Stokes. Teremos assim

$$\int d^2 r \mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{j}_{\mathbf{s}} = \Phi_0 \frac{c^2}{8\pi^2 \lambda^2} \int d^2 r \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \nabla \phi) - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \mathbf{n} \cdot \mathbf{B},$$
$$= \Phi_0 \frac{c^2}{8\pi^2 \lambda^2} \oint d\mathbf{l} \cdot \nabla \phi - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}$$
$$= \Phi_0 \frac{c^2}{8\pi^2 \lambda^2} 2\pi L - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}.$$
(2.79)

Defini-se como função fonte para um único vórtice, a seguinte relação

$$v(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = \hat{z}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)L, \qquad (2.80)$$

onde *L* corresponde a um quantum de fluxo magnético de cada vórtice carrega. Utilizando esta definição e a relação  $4\pi \mathbf{j}/c = \nabla \times B$ , na equação de London 2.10, teremos

$$\mathbf{B} - \lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} = \hat{z} \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) L, \qquad (2.81)$$

onde temos um quantum de fluxo magnético  $L\Phi_0$ , localizado na posição  $\mathbf{r}_i$ , com núcleo infinitesimal  $\delta(\mathbf{r})$ , direcionado no eixo  $\hat{z}$ . A solução da equação 2.81 é dada por

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{L\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}{\lambda}\right) \hat{z},\tag{2.82}$$

onde  $K_0$  é uma função de Bessel modificada de ordem zero, com os seguintes limites assintóticos:

$$\begin{cases} K_0(\mathbf{r} \to 0) \longrightarrow -\ln(r), \\ K_0(\mathbf{r} \to \infty) \longrightarrow e^{-r}/\sqrt{r}. \end{cases}$$
(2.83)

Entretanto, existe uma divergência no campo magnético quando  $\mathbf{r} \to 0$ , contudo, o núcleo do vórtice é finito, o que implica que quando  $\mathbf{r} > \xi$ , essa solução não pode ser usada. Dessa forma, a magnitude do campo magnético na origem pode ser encontrada ao inserimos um limite de corte quando  $\mathbf{r} \sim \xi$ , assim teremos

$$\mathbf{B}(0) \approx \frac{L\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \ln\left(\frac{\lambda}{\xi}\right),\tag{2.84}$$

para  $\lambda >> \xi$ , o que nos dá uma solução física mais aceitável, pois uma distância da ordem do núcleo do vórtice  $\xi \in |\Psi| \rightarrow 0$ .

A energia por unidade de comprimento do vórtice pode agora ser calculada através da integral da soma das energias referente à supercorrente e ao campo magnético, desprezando a energia no núcleo do vórtice. Teremos então que,

$$E_v = \frac{1}{8\pi} \int \left[ \lambda^2 |\nabla \times \mathbf{B}|^2 + \mathbf{B}^2 \right] d^3 \mathbf{r}.$$
 (2.85)

Usando a identidade  $|\nabla \times \mathbf{B}|^2 = \mathbf{B} \cdot \left[ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) \right] + \nabla \cdot \left[ \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) \right]$ , podemos reescrever a equação 2.85 como

$$E_v = \frac{1}{8\pi} \int \left[ \mathbf{B} \cdot \left( \mathbf{B} + \lambda^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) \right) \right] d^3 \mathbf{r} + \frac{\lambda^2}{8\pi} \int \left( \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) \right) \cdot d^3 \mathbf{r}.$$
 (2.86)

Como a integração é sobre todo o volume de um cilindro na direção  $\hat{z}$  de raio infinito, e onde desprezamos o núcleo, a primeira integral será nula. Agora utilizando o teorema de

Gauss <sup>6</sup> na segunda integral teremos

$$E_v = \frac{\lambda^2}{8\pi} \oint \left( \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) \right) \cdot \hat{n} d^2 \mathbf{r}.$$
 (2.87)

Os limites de integração correspondem às partes interna do cilindro, quando  $\mathbf{r} \to \xi$  e a externa  $\mathbf{r} \to \infty$ , temos portanto

$$E_v = \frac{\lambda^2}{8\pi} \left[ B \frac{dB}{dr} 2\pi r \right]_{r=\xi} - \frac{\lambda^2}{8\pi} \left[ B \frac{dB}{dr} 2\pi r \right]_{r=\infty}, \tag{2.88}$$

mas o segundo termo da equação 2.88 se anula quando  $B(r \to \infty) = 0$ . Usando a equação 2.84,  $dB/dr = \Phi_0/2\pi\lambda^2 r$ , vem que

$$E_v = \frac{\lambda^2}{8\pi} \left[ B \left( L \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2 r} \right) 2\pi r \right]_{r=\xi} = \frac{L\Phi_0}{8\pi} \left[ B(r) \right]_{r=\xi}, \tag{2.89}$$

$$E_v = \frac{L\Phi_0}{8\pi} B(\xi) \approx \frac{L\Phi_0}{8\pi} B(0),$$
 (2.90)

agora, utilizando o mesmo limite de corte, <br/>  $\mathbf{r}\sim\xi,$ e a equação 2.84, obtemos

$$E_v = \left(\frac{L\Phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \ln\left(\frac{\lambda}{\xi}\right). \tag{2.91}$$

Podemos ver que  $E_v \propto L^2$ , ou seja, esse resultado mostra que no modelo de London é energeticamente mais favorável a nucleação de dois vórtices onde cada um deles carrega um quantum de fluxo, do que um vórtice com dois quantum de fluxo.

## 2.6 Equações GL Dependente do Tempo - TDGL

Para observarmos o comportamento da dinâmica dos vórtices temos que utilizar as equações de GL dependente do tempo, as chamadas TDGL [89, 90, 91]. Essas equações exigem um tempo de relaxação da ordem  $\tau_{\epsilon}\Psi \ll \hbar$ , onde  $\tau_{\epsilon}$  corresponde ao tempo livre médio de cada colisão inelástica entre os fônons e os pares de Cooper. Na seção 2.3 foi feita a minimização da energia livre  $\delta F_s/\delta \Psi^* = \delta F_s/\delta \mathbf{A}$ , para encontrar as duas equações GL independente do tempo, o que corresponde à situação de equilíbrio estático. Porém,

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Teorema de Gauss,  $\int \nabla \cdot \left( \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{B}) \right) d^3 \mathbf{r} = \oint \left( \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{B}) \right) \cdot d\mathbf{S} = 0$ 

para as TDGL, a taxa de variação temporal do parâmetro de ordem e do potencial vetor (taxa de relaxação) depende de um valor constante igual ao desvio do equilíbrio dado por

$$\frac{\hbar^2}{2m^*D}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\delta F_s(\Psi^*, \mathbf{A})}{\delta\Psi^*},\tag{2.92}$$

onde D é um coeficiente de difusão. Para a segunda equação, teremos

$$\frac{\sigma}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{\delta F_s(\Psi^*, \mathbf{A})}{\delta \mathbf{A}},\tag{2.93}$$

 $\sigma$  corresponde a condutividade elétrica.

As equações 2.92 e 2.93, não são invariantes de calibre (gauge), portante é necessário a introdução de um potencial escalar  $\phi$  o qual altera a primeira equação GL da seguinte forma

$$\frac{\hbar^2}{2m^*D} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{2ie\phi}{\hbar} \Psi \right) = -\frac{\delta F_s(\Psi^*, \mathbf{A})}{\delta \Psi^*}.$$
(2.94)

Para a segunda equação GL o campo elétrico é definido como

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi, \qquad (2.95)$$

onde  $\phi$  é um potencial escalar, e a corrente total é dada por

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\mathbf{s}} + \mathbf{j}_{\mathbf{n}}.\tag{2.96}$$

Em 2.96,  $\mathbf{j}_{\mathbf{s}}$  é a corrente supercondutora a seguir

$$\mathbf{j}_{\mathbf{s}} = \frac{2e}{m} \mathcal{R}e\left[\Psi^*\left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi\right],\tag{2.97}$$

e  $\mathbf{j_n}$  corresponde à corrente normal

$$\mathbf{j_n} = \sigma_n \mathbf{E},\tag{2.98}$$

que juntamente com 2.95 fica sendo

$$\mathbf{j_n} = \sigma_n \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right). \tag{2.99}$$

Logo, podemos escrever as equações TDGL como

$$-\frac{\hbar}{2m^*D}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{ie^*\phi}{\hbar}\Psi\right) = \alpha(T)\Psi + \beta(\Psi^*\Psi)\Psi + \frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi,\quad(2.100)$$

$$\sigma_n \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right) = \frac{e^*}{m^*} \mathcal{R}e \left[ \Psi^* \left( -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \right] - \frac{c}{4\pi} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}). \quad (2.101)$$

## 2.7 Equações TDGL adimensionais

As equações TDGL precisam ser escritas sob uma forma adimensional para facilitar os cálculos e reduzir o número de parâmetros já que as mesmas não possuem solução analítica. Faremos isso definindo as seguintes variáveis:  $\Psi = \Psi_0 \tilde{\psi}$ ,  $\mathbf{A} = H_{c2}(0)\xi(0)\tilde{\mathbf{A}}$ ,  $T = T_c \tilde{T}$ ,  $\nabla = \frac{1}{\xi(0)} \tilde{\nabla}$ ,  $t = t_0 \tilde{t}$ , onde  $t_0 = \frac{\xi_0^2}{D}$ . Substituindo essas considerações nas equações 2.100 e 2.101, obtemos<sup>7</sup>

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\phi\psi\right) = -\frac{1}{\eta} \left[ (i\nabla + \mathbf{A})^2\psi + (1 - T)(|\psi|^2 - 1)\psi \right], \qquad (2.102)$$

е

$$\Gamma\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\phi\right) = (1 - T)\mathcal{R}e\left[\psi^*(-i\nabla - \mathbf{A})\psi\right] - \kappa^2\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}), \qquad (2.103)$$

onde  $\eta = 2m^*D/\hbar^2$ ,  $\Gamma = 4\pi\sigma_n D\kappa^2/c^2$ , e os til's foram omitidos por conveniência. Para garantir a invariância de calibre (gauge) nas equações acima realizamos as seguintes transformações:

potencial vetor: 
$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi$$
, (2.104)

potencial escalar: 
$$\phi \longrightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$$
, (2.105)

parâmetro de ordem: 
$$\psi \longrightarrow \psi e^{(i\frac{2e}{hc}\chi)}$$
. (2.106)

<sup>7</sup>Apêndice A

Assim obtemos

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{\eta} \Big[ (i\nabla + \mathbf{A})^2 \psi + (1 - T)(|\psi|^2 - 1)\psi \Big], \qquad (2.107)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = (1 - T)\mathcal{R}e\Big[\psi^*(-i\nabla - \mathbf{A})\psi)\Big] - \kappa^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}), \qquad (2.108)$$

Como já dissemos, as equações 2.107 e 2.108 não possuem solução analítica, portanto se faz necessário a utilização de métodos numéricos que possam obter boas aproximações. Um deles consiste em discretizar as equações TDGL por meio do método das diferenças finitas juntamente com o método das variáveis de ligação, também chamado de, método  $\psi - U$ .

# 2.8 Formalismo TDGL para supercondutores de duas bandas (2B-TDGL)

As equações TDGL podem ser estendidas em um formalismo de duas bandas ou 2B-TDGL, para investigar materiais supercondutores de mais de uma banda como ocorre com o  $MgB_2$ . Para tanto, cada banda necessita de um potencial de interação para ligar uma banda à outra, como por exemplo, um acoplamento Josephson (outro tipos de acoplamentos podem ser encontrados em [54]). Assim, as 2B-TDGL tomam a seguinte forma

$$\sum_{i=1}^{2} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \sum_{i=1}^{2} -(i\mathbf{\nabla} + \mathbf{A})^2 \psi_i + \psi_i (1 - |\psi_i|^2) + \sum_{i=1}^{2} \sum_{i \neq j}^{2} \mathcal{O}_{i,j}, \qquad (2.109)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \sum_{i=1}^{2} \operatorname{Re} \left[ \bar{\psi}_{i} (-i\boldsymbol{\nabla} - \mathbf{A}) \psi_{i} \right] - \kappa^{2} \Big( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) \Big).$$
(2.110)

O termo  $\mathcal{O}_{i,j}$  é o acoplamento Josephson sendo dado por  $\psi_i^* \psi_j + \psi_i \psi_j^*$ , onde o parâmetro de ordem tem a forma,  $\psi_{i,j} = |\psi| e^{i\phi_{i,j}}$ , sendo que,  $\phi_{i,j}$  é a fase do i-ésimo parâmetro. Logo,

 $\mathcal{O}_{i,j}$ , torna-se

$$O_{i,j} = 2\gamma_{i,j} |\psi_i| |\psi_j| \cos(\phi_j - \phi_i), \qquad (2.111)$$

onde  $\gamma_{i,j}$  é o fator de acoplamento entre as bandas. O valor de  $\gamma_{i,j}$  pode ser positivo ou negativo, dependendo da força de interação entre as bandas ou do tipo de material, por exemplo, para o  $MgB_2$  temos que  $\gamma_{i,j} > 0$ , enquanto que supercondutores baseados em ferro  $\gamma_{i,j} < 0$  [78].

## 2.9 Equações TDGL generalizadas (G-TDGL)

As equações TDGL possuem uma forma mais completa conhecida como equações generalizadas de Ginzburg-Landau ou G-TDGL, onde conseguem abarcar uma gama maior de sistemas físicos, principalmente aqueles submetidos a uma corrente externa. A equação G-TDGL possui a seguinte forma [92, 93]

$$\frac{u}{\sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}} \left[ \frac{\partial\psi}{\partial t} + i\phi\psi + \frac{\gamma^2}{2}\psi\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} \right] =$$

$$-(-i\nabla - \mathbf{A})^2\psi + (1-T)\psi(1-|\psi|^2),$$
(2.112)

onde  $\gamma$ , é definido por

$$\gamma = \frac{2\tau_E \psi_0}{\hbar},\tag{2.113}$$

e  $\tau_E$ , corresponde ao tempo de colisão inelástica elétron-fônon. Advindo da teoria microscópica  $\gamma = 10$  e u = 5.79 para materiais com poucas impurezas paramagnéticas<sup>8</sup> [92, 93, 43]. Devido à normalização, o tempo é descrito como  $\tau_{GL} = \frac{\pi \hbar}{8k_B T_c u}$  e o potencial eletrostático  $\phi = \frac{\hbar}{2\epsilon\tau_{GL}}$ .

A equação 2.112 deve ser acoplada com o potencial escalar  $\phi$ , obtido da equação da continuidade dada abaixo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \qquad (2.114)$$

 $^{8}u = \frac{\pi^4}{14\zeta(3)} = 5,79$ , onde  $\zeta(3) = 1,202$  é uma função zeta de Riemann.

onde,  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_S + \mathbf{J}_N$ . Sabemos que

$$\mathbf{J}_{S} = \mathcal{R}e\Big[\psi^{*}(-i\nabla - \mathbf{A}\psi)\Big], \qquad (2.115)$$
$$\mathbf{J}_{N} = -\nabla\phi.$$

Considerando um estado estacionário no qual,  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ , e substituindo as equações 2.115 em 2.114, obtemos

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot \mathbf{J}_S, \tag{2.116}$$

que precisa ser resolvida simultaneamente com a equação 2.112.

Lembrando que  $|\psi|^2 = \psi \psi^*$ , podemos obter uma expressão para  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ , para isso, iremos reescrever a equação 2.112 da seguinte forma

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{2}\psi\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta}{u} - i\phi\psi, \qquad (2.117)$$

onde

$$\Delta = -\left(-i\nabla - \mathbf{A}\right)^{2}\psi + (1 - T)\psi(1 - |\psi|^{2}).$$
(2.118)

É necessário levar em conta o complexo conjugado da equação 2.117 que fica

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{2}\psi^*\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta^*}{u} - i\phi\psi^*, \qquad (2.119)$$

e considerar que  $\psi$  e  $\psi^*$  sejam independentes, desta forma, poderemos escrever um sistema simultâneo de equações que podem ser resolvidas pelo método de Cramer<sup>9</sup>. Portanto, a equação obtida é

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{1 + \gamma^2 |\psi|^2} \frac{\Delta}{u} - \frac{\gamma^2 \psi \mathcal{R}e\left(\psi^* \frac{\Delta}{u}\right)}{\sqrt{1 + \gamma^2 |\psi|^2}} - i\phi\psi.$$
(2.120)

<sup>9</sup>Apêndice B

## Método numérico: as equações GL discretas

# 3.1 Método $\psi - U$ e as equações TDGL

O método  $\psi - U$  consiste em discretizar as equações TDGL por meio do método das diferenças finitas<sup>1</sup>, dispor as equações em pontos de uma rede e utilizar um campo auxiliar, U, para ligar todos os pontos dessa rede, seja ela em duas ou três dimensões[94, 95]. Nesta Tese utilizaremos uma rede bidimensional, conforme mostrado na Figura 3.1, e uma estrutura na forma de uma fita supercondutora com contatos metálicos, veja Figura 3.2, por onde é inserido uma corrente de transporte. Nas Figuras 3.1 e 3.2;  $\Psi_{i,j}$  é a variável de vértice;  $U_{i,j}^x$ ,  $U_{i,j}^y$  são as váriaveis de ligação e  $J_{i,j}^x$  e  $J_{i,j}^y$  correspondem a densidade de corrente supercondutora nos eixos x e y respectivamente. O espaçamento de rede é definido por  $a_x$  e  $a_y$ ; a linha verde tracejada, definida por  $\Delta$ , é a rede matemática onde a G-TDGL será resolvida e  $\vec{J_m}$  é a corrente externa. Todas essas variáveis serão descritas no decorrer desta seção.

As equações de GL são dependentes de  $\Psi(x, y)$ ,  $A_x(x, y) \in A_y(x, y)$ , onde  $A_{x,y}$  são as componentes do potencial vetor. O método  $\psi - U$  relacionas essas variáveis do potencial vetor com as componentes de um campo auxiliar  $U = (\mathcal{U}^x, \mathcal{U}^y)$ , da seguinte forma

$$\mathcal{U}^{x}(x,y,t) = \exp\left(-i\int_{x_{0}}^{x} \mathbf{A}^{x}(\nu,y,t)d\nu\right),\tag{3.1}$$

$$\mathcal{U}^{y}(x,y,t) = \exp\left(-i\int_{y_{0}}^{y} \mathbf{A}^{y}(x,\eta,t)d\eta\right).$$
(3.2)

Agora utilizaremos as variáveis de ligação para discretizar as equações TDGL.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Apêndice C



Figura 3.1: Estrutura de uma rede bi-dimensional para uma única célula unitária onde,  $\psi_{i,j}$  é o parâmetro de ordem,  $U_{i,j}^x$ ,  $U_{i,j}^y$  são as variáveis de ligação nos eixos  $x \in y$  respectivamente. A soma de todas as variáveis ao redor da célula corresponde campo de indução magnético  $L_{i,j}^z$  no eixo z no centro da célula unitária.



Figura 3.2: Rede numérica para a realização da simulação computacional em uma estrutura na forma de fita supercondutora, com contatos metálicos de tamanho m.  $L \in W$  correspondem ao tamanho total da rede e dentro do quadrado tracejado verde é onde as equações G-TDGL serão resolvidas.

# 3.2 Propriedades das variáveis de ligação

As variáveis de ligação definidas pelas equações 3.1 e 3.2, podem ser definidas como

$$\mathcal{U}^x = \exp\left(-i\int_{x_0}^x \mathbf{A}^x dx\right),\tag{3.3}$$

$$\mathcal{U}^{y} = \exp\left(-i\int_{y_{0}}^{y} \mathbf{A}^{y} dy\right),\tag{3.4}$$

com seus respectivos complexos conjugados

$$\overline{\mathcal{U}}^x = \exp\left(i\int_{x_0}^x \mathbf{A}^x dx\right),\tag{3.5}$$

$$\overline{\mathcal{U}}^{y} = \exp\left(i\int_{y_{0}}^{y}\mathbf{A}^{y}dy\right).$$
(3.6)

Derivando as equações 3.3 - 3.6, teremos

$$\frac{\partial \mathcal{U}^x}{\partial x} = -i\mathbf{A}\mathcal{U}^x,\tag{3.7}$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}^y}{\partial y} = -i\mathbf{A}\mathcal{U}^y,\tag{3.8}$$

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{U}}^x}{\partial x} = i \mathbf{A}^x \overline{\mathcal{U}}^x, \tag{3.9}$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}^{y}}{\partial y} = i\mathbf{A}^{y}\overline{\mathcal{U}}^{y},\tag{3.10}$$

ou, de uma forma mais geral

$$\nabla_{\zeta} \mathcal{U}^{\zeta} = -i \mathbf{A}_{\zeta} \mathcal{U}^{\zeta}, \qquad \zeta = x, y, z.$$
(3.11)

E a derivada segunda de 3.11 fica

$$\nabla_{\zeta}^{2} \mathcal{U}^{\zeta} = -i \left( \mathcal{U}^{\zeta} \nabla_{\zeta} \mathbf{A}_{\zeta} + \mathbf{A}_{\zeta} \nabla_{\zeta} \mathcal{U}^{\zeta} \right) = -i \mathcal{U}^{\zeta} \left( \nabla_{\zeta} \mathbf{A}_{\zeta} - i \mathbf{A}_{\zeta}^{2} \right).$$
(3.12)

O análogos discretos das equações 3.3 e 3.4, podem ser escritos como

$$\mathcal{U}_{i,j}^x = \prod_{k=1}^{i-1} U_{k,j}^x, \tag{3.13}$$

$$\mathcal{U}_{i,j}^{y} = \prod_{k=1}^{j-1} U_{i,k}^{y}, \qquad (3.14)$$

o que nos dá

$$U_{i,j}^x = \overline{\mathcal{U}}_{i,j}^x \mathcal{U}_{i+1,j}^x, \qquad (3.15)$$

$$U_{i,j}^y = \overline{\mathcal{U}}_{i,j}^y \mathcal{U}_{i,j+1}^y.$$
(3.16)

Se considerarmos dois pontos adjacentes na horizontal,  $(x_i, y_j) \in (x_{i+1}, y_j)$  e na vertical  $(x_i, y_j) \in (x_i, y_{j+1})$ , teremos respectivamente

$$U_{i,j}^{x} = \exp\left(-i\int_{x_{i}}^{x_{i+1}} \mathbf{A}^{x} dx\right),\tag{3.17}$$

е

$$U_{i,j}^{y} = \exp\left(-i\int_{y_{j}}^{y_{j+1}} \mathbf{A}^{y} dy\right), \qquad (3.18)$$

onde a regra do ponto médio da integração nos permite escrever as equações acima como uma forma discreta aproximada dada por

$$U_{i,j}^x \approx \exp\left[-i\mathbf{A}^x \left(x + \frac{a_x}{2}, y_j\right) a_x\right],\tag{3.19}$$

$$U_{i,j}^{y} \approx \exp\left[-i\mathbf{A}^{y}\left(x_{i}, y_{j} + \frac{a_{y}}{2}\right)a_{y}\right].$$
(3.20)

## 3.2.1 Discretização da primeira equação GL

Vamos começar a discretização, por partes, da primeira equação GL, 2.107 abaixo

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{\eta} \Big[ (-i\nabla - \mathbf{A})^2 \psi + (1 - T)(|\psi|^2 - 1)\psi \Big].$$

O termo  $(-i\nabla - \mathbf{A})^2 \psi$  fica

$$\begin{pmatrix} -i\nabla - \mathbf{A}_{\zeta} \end{pmatrix}^{2} \psi = \begin{pmatrix} -i\nabla - \mathbf{A}_{\zeta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\nabla - \mathbf{A}_{\zeta} \end{pmatrix} \psi = -\nabla^{2} \psi + i\nabla (\mathbf{A}_{\zeta} \psi) + i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + \mathbf{A}_{\zeta}^{2} \psi = -\nabla^{2} \psi + i\psi \nabla \mathbf{A} + i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + \mathbf{A}_{\zeta}^{2} \psi = -\nabla^{2} \psi + i\psi \nabla \mathbf{A}_{\zeta} + 2i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + \mathbf{A}_{\zeta}^{2} \psi = -\nabla^{2} \psi + i\psi \nabla \mathbf{A}_{\zeta} + i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi + \mathbf{A}_{\zeta}^{2} \psi = i\psi \Big( \nabla \mathbf{A}_{\zeta} - i\mathbf{A}_{\zeta}^{2} \Big) - \nabla^{2} \psi + 2i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi.$$
(3.21)

Multiplicando 3.21 por  $-\mathcal{U}^\zeta/\mathcal{U}^\zeta$  segue que

$$\begin{pmatrix} -i\nabla_{\zeta} - \mathbf{A}_{\zeta} \end{pmatrix}^{2} \psi = -\frac{\mathcal{U}^{\zeta}}{\mathcal{U}^{\zeta}} i\psi \left( \nabla_{\zeta} \mathbf{A}_{\zeta} - i\mathbf{A}_{\zeta}^{2} \right) - \nabla^{2} \psi + 2i\mathbf{A}_{\zeta} \nabla \psi$$

$$= -\frac{1}{\mathcal{U}^{\zeta}} \left[ -i\mathcal{U}^{\zeta} \psi \left( \nabla_{\zeta} \mathbf{A}_{\zeta} - i\mathbf{A}_{\zeta}^{2} \right) - 2i\mathbf{A}_{\zeta} \mathcal{U}^{\zeta} \nabla_{\zeta} \psi + \mathcal{U}^{\zeta} \nabla_{\zeta}^{2} \psi \right] (3.22)$$

Utilizando as equações 3.11 e 3.12, obtemos

$$\left(-i\nabla_{\zeta}-\mathbf{A}_{\zeta}\right)^{2}\psi = -\frac{1}{\mathcal{U}^{\zeta}}\left[\nabla_{\zeta}^{2}\mathcal{U}^{\zeta}\psi+2\left(\nabla_{\zeta}\mathcal{U}^{\zeta}\right)\nabla_{\zeta}\psi+\mathcal{U}^{\zeta}\nabla_{\zeta}^{2}\psi\right].$$
 (3.23)

Podemos também escrever a equação 3.23 como<sup>2</sup>,

$$\left(-i\nabla_{\zeta}-\mathbf{A}_{\zeta}\right)^{2}\psi = -\overline{\mathcal{U}^{\zeta}}\nabla_{\zeta}^{2}\left(\mathcal{U}^{\zeta}\psi\right), \qquad (3.24)$$

que vamos separar em  $x \in y$ , e assim ficamos com

$$\left(-i\nabla_{\zeta}-\mathbf{A}_{\zeta}\right)^{2}\psi = -\overline{\mathcal{U}^{x}}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}\left(\mathcal{U}^{x}\psi\right)-\overline{\mathcal{U}^{y}}\frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\left(\mathcal{U}^{y}\psi\right).$$
(3.25)

Vamos substituir a equação 3.25, na primeira equação GL que fica

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{\eta} \left[ -\overline{\mathcal{U}^x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \mathcal{U}^x \psi \right) - \overline{\mathcal{U}^y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left( \mathcal{U}^y \psi \right) + \left( 1 - T \right) \left( |\psi|^2 - 1 \right) \psi \right]. \quad (3.26)$$

<sup>2</sup>Da seguinte análise matemática:  $(u \cdot v)' = u' \cdot v + u \cdot v' \Rightarrow (u' \cdot v + u \cdot v')' = u'' \cdot v + 2u' \cdot v' + u \cdot v''.$ 

Utilizando o método das diferenças finitas, descritas no apêndice C, ficamos com

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{\eta} \left[ \left( \frac{\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}} \mathcal{U}_{i+1,j}^{x} \psi_{i+1,j} - 2 \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}} \mathcal{U}_{i,j}^{x} \psi_{i,j} + \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}} \mathcal{U}_{i-1,j}^{x} \psi_{i-1,j}}{a_{x}^{2}} \right) + \left( \frac{\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i,j+1}^{y} \psi_{i,j+1} - 2 \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i,j}^{y} \psi_{i,j} + \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i,j-1}^{y} \psi_{i,j-1}}{a_{y}^{2}} \right) + \left( \frac{1 - T \right) \left( \psi_{i,j}^{*} \psi_{i,j} - 1 \right) \psi_{i,j}}{a_{y}^{2}} \right]$$
(3.27)

Utilizando então as equações 3.15 e 3.16, teremos

$$\frac{\partial \psi_{i,j}}{\partial t} = \left( \frac{U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \overline{U}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j}}{\eta a_x^2} \right) + \left( \frac{U_{i,j}^y \psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \overline{U}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1}}{\eta a_y^2} \right) + \left( \frac{1 - T}{\eta} \left( \psi_{i,j}^* \psi_{i,j} - 1 \right) \psi_{i,j} \right) + \left( 1 - T \right) \left( \psi_{i,j}^* \psi_{i,j} - 1 \right) \psi_{i,j}.$$
(3.28)

que é a primeira equação GL na sua forma discretizada.

## 3.2.2 Discretização da segunda equação GL e da G-TDGL

Discretizaremos agora a segunda equação GL abaixo

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = (1 - T)\mathcal{R}e\left[\psi^*(-i\nabla - \mathbf{A})\psi\right] - \kappa^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}.$$
(3.29)

Começaremos com o termo da corrente supercondutora  $\mathbf{j}^{\mathbf{s}}$ , que passaremos a chamar como  $\mathbf{J}^{\zeta}$ , onde  $\zeta = x, y$ , logo

$$\mathbf{J}^{\zeta} = (1 - T)\mathcal{R}e\left[\psi^*(-i\nabla_{\zeta} - \mathbf{A}_{\zeta})\psi\right],\tag{3.30}$$

onde o termo entre parênteses já foi demonstrado em 3.25. Assim a parte real fica

$$\mathbf{J}_{i,j}^{x,y} = \left(1 - T\right) \mathcal{R}e\left[\psi^*\left(-\overline{\mathcal{U}^x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\mathcal{U}^x\psi\right) - \overline{\mathcal{U}^y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\mathcal{U}^y\psi\right)\right)\right],\tag{3.31}$$

$$= \left(1-T\right)\mathcal{R}e\left[-i\psi_{i,j}^{*}\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}}\left(\frac{\partial^{2}(\mathcal{U}_{i,j}^{x}\psi_{i,j})}{\partial x^{2}}\right)-i\psi_{i,j}^{*}\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}}\left(\frac{\partial^{2}(\mathcal{U}_{i,j}^{y}\psi_{i,j})}{\partial y^{2}}\right)\right].$$
 (3.32)

Aplicando novamente as diferenças finitas

$$\begin{split} \mathbf{J}_{i,j}^{x,y} &= \left(1 - T\right) \mathcal{R}e \Bigg[ -i\psi_{i,j}^{*} \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}} \Bigg( \frac{\mathcal{U}_{i+1,j}^{x} \psi_{i+1,j} - \mathcal{U}_{i-1,j}^{x} \psi_{i-1,j}}{a_{x}} \right) \\ &- i\psi_{i,j}^{*} \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \Bigg( \frac{\mathcal{U}_{i,j+1}^{y} \psi_{i,j+1} - \mathcal{U}_{i,j-1}^{y} \psi_{i,j-1}}{a_{y}} \right) \Bigg], \\ &= \left(1 - T\right) \mathcal{R}e \Bigg[ -i\psi_{i,j}^{*} \Bigg( \frac{\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{x}} \mathcal{U}_{i+1,j}^{x} \psi_{i+1,j} - \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i-1,j}^{y} \psi_{i-1,j}}{a_{x}} \Bigg) \\ &- i\psi_{i,j}^{*} \Bigg( \frac{\overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i,j+1}^{y} \psi_{i,j+1} - \overline{\mathcal{U}_{i,j}^{y}} \mathcal{U}_{i,j-1}^{y} \psi_{i,j-1}}{a_{y}} \Bigg) \Bigg], \\ &= \left(1 - T\right) \mathcal{R}e \Bigg[ -i\psi_{i,j}^{*} \Bigg( \frac{U_{i,j}^{y} \psi_{i+1,j} - U_{i-1,j}^{x} \psi_{i-1,j}}{a_{x}} \Bigg) \\ &- i\psi_{i,j}^{*} \Bigg( \frac{U_{i,j}^{y} \psi_{i,j+1} - U_{i,j-1}^{y} \psi_{i,j-1}}{a_{y}} \Bigg) \Bigg], \end{split}$$

e separando as componentes tem-se

$$\mathbf{J}_{i,j}^{x} = \left(\frac{1-T}{a_{x}}\right) \mathcal{R}e\Big[-i\psi_{i,j}^{*}U_{i,j}^{x}\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}^{*}U_{i-1,j}^{x}\psi_{i-1,j}\Big],\tag{3.33}$$

$$\mathbf{J}_{i,j}^{y} = \left(\frac{1-T}{a_{y}}\right) \mathcal{R}e\Big[-i\psi_{i,j}^{*}U_{i,j}^{y}\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}^{*}U_{i,j-1}^{y}\psi_{i,j-1}\Big].$$
(3.34)

Aplicando a aproximação das séries de Taylor e lembrando que,  $\mathcal{R}e(-iq) = \mathcal{I}m(q)$ , chegamos em

$$\mathbf{J}_{i,j}^{x} = \left(\frac{1-T}{a_{x}}\right) \mathcal{I}m\left[\psi_{i,j}^{*}U_{i,j}^{x}\psi_{i+1,j}\right],\tag{3.35}$$

$$\mathbf{J}_{i,j}^{y} = \left(\frac{1-T}{a_{y}}\right) \mathcal{I}m\left[\psi_{i,j}^{*}U_{i,j}^{y}\psi_{i,j+1}\right].$$
(3.36)

Agora, o último termo pode ser escrito como

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{B} = \left(\frac{\partial B^z}{\partial y}, -\frac{\partial B^z}{\partial x}, 0\right).$$
 (3.37)

O fluxo magnético  $\int {\bf B} \cdot d^2 {\bf r},$ possui a seguinte relação<sup>3</sup>

$$\iint_{S} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \oint_{C} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}, \qquad (3.38)$$

<sup>3</sup>Do teorema de Stokes:  $\oint_C \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l} = \iint_S (\nabla \times \mathbf{F}) \cdot d\mathbf{S}$ 

cujo termo,  $\int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ , precisa ser discretizado. Lembrando da célula unitária de nossa malha como mostra a Figura 3.1, podemos ver que, se percorrermos toda a célula unitária da seguinte maneira:  $\psi_{i,j} \Rightarrow \psi_{i+1,j} \Rightarrow \psi_{i+1,j+1} \Rightarrow \psi_{i,j+1} \Rightarrow \psi_{i,j}$ , podemos ligar todos os pontos correspondentes ao parâmetro de ordem por meio das variáveis de ligação definidas em 3.17 e 3.18, dessa forma obtemos

$$\exp\left(-i\oint_C \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}\right) = U_{i,j}^x U_{i+1,j}^y \overline{U}_{i,j+1}^x \overline{U}_{i,j}^y = \Phi.$$
(3.39)

Logo, a equação 3.39 corresponde ao fluxo magnético  $\mathbf{B}$  que atravessa perpendicularmente a amostra. Definindo outra variável podemos escrever o fluxo como

$$L_{i,j} = U_{i,j}^{x} U_{i+1,j}^{y} \overline{U}_{i,j+1}^{x} \overline{U}_{i,j}^{y}, \qquad (3.40)$$

ou ainda

$$L_{i,j} = \exp\left(\iint_{S} -i\mathbf{B}_{z} \cdot d\mathbf{r}\right) = \exp\left(\iint_{S} -i\mathbf{B}_{z} \cdot dxdy\right),\tag{3.41}$$

discretizando e fazendo uma expansão em Taylor

$$L_{i,j} = \exp\left(-i\mathbf{B}_{i,j}^z \cdot a_x a_y\right) \approx 1 - i\mathbf{B}_{i,j}^z.$$
(3.42)

Calculando o campo magnético no centro da célula unitária vem que

$$L_{i,j} \approx 1 - iB_{i,j}^{z} \left( x_{i} + \frac{a_{x}}{2}, y_{j} + \frac{a_{y}}{2} \right) a_{x} a_{y} \left[ 1 + \mathcal{Q} \left( a_{x}^{4} + a_{y}^{4} \right) \right].$$
(3.43)

Podemos agora escrever a equação 3.37 como

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[ B^z \left( x_i + \frac{a_x}{2}, y_j \right) \right] = \frac{1}{a_x a_y^2} \left( \overline{L}_{i,j-1} L_{i,j} - 1 \right) + \mathcal{Q} \left( a_x^2 + a_y^2 \right), \tag{3.44}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ B^z \left( x_i, y_j + \frac{a_y}{2} \right) \right] = -\frac{1}{a_x^2 a_y} \left( \overline{L}_{i,j} L_{i-1,j} - 1 \right) + \mathcal{Q} \left( a_x^2 + a_y^2 \right).$$
(3.45)

Discretizando a variação temporal de,  $\partial_t \mathbf{A}^x \in \partial_t \mathbf{A}^y$ , teremos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ A^x \left( x_i + \frac{a_x}{2}, y_i, t \right) \right] = \frac{i}{a_x} \overline{U}^x_{i,j} \frac{\partial}{\partial t} U^x_{i,j} + \mathcal{Q} \left( a_x^2 \right), \tag{3.46}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ A^y \left( x_i, y_i + \frac{a_y}{2}, t \right) \right] = \frac{i}{a_y} \overline{U}^y_{i,j} \frac{\partial}{\partial t} U^y_{i,j} + \mathcal{Q} \left( a_y^2 \right).$$
(3.47)

Para discretizar a derivada temporal utilizamos o esquema de Euler dado por

$$\psi_{i,j}(t + \Delta t) = \psi_{i,j}(t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \psi_{i,j}(t).$$
(3.48)

Por fim, obtemos a segunda equação GL discretizada em termos das componentes  $x \in y$ 

$$\frac{\partial}{\partial t}U_{i,j}^x = -i\Big(1-T\Big)U_{i,j}^x\mathcal{I}m\Big(\psi_{i,j}^*U_{i,j}^x\psi_{i+1,j}\Big) - \frac{\kappa^2}{a_y^2}U_{i,j}^x\Big(\overline{L}_{i,j-1}L_{i,j}-1\Big),\tag{3.49}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}U_{i,j}^y = -i\left(1-T\right)U_{i,j}^y \mathcal{I}m\left(\psi_{i,j}^*U_{i,j}^y\psi_{i,j+1}\right) - \frac{\kappa^2}{a_y^2}U_{i,j}^y\left(\overline{L}_{i,j}L_{i-1,j}-1\right).$$
(3.50)

Após todos os cálculos já realizados anteriormente, a discretização da G-TDGL é obtida rapidamente. O termo  $\Delta$ , foi mostrado na equação 2.120 e está discretizado na equação 3.28. Logo, a equação generalizada de Ginzburg-Landau discretizada fica<sup>4</sup>

$$\frac{\partial \psi_{i,j}}{\partial t} = \sqrt{1 + \gamma^2 |\psi_{i,j}|^2} \frac{\Delta_{i,j}}{u} - \frac{\gamma^2 \psi_{i,j} \mathcal{R}e\left(\psi_{i,j}^* \frac{\Delta_{i,j}}{u}\right)}{\sqrt{1 + \gamma^2 |\psi_{i,j}|^2}} - i\phi_{i,j}\psi_{i,j}.$$
(3.51)

### 3.2.3 Condições de Contorno

As equações 3.28, 3.49 e 3.50, obtidas pelo método  $\psi - U$ , são aplicados apenas nos pontos interiores da malha de discretização, fazendo-se necessário, então, a aplicação de condições de contorno externas que circundam toda a amostra. Também é preciso levar em consideração a condições dada pela equação 2.35 mostrada abaixo, a respeito da interface

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Mais detalhes sobre os cálculos para este tipo de simulação podem ser encontrados na ref. [96]

da amostra frente outros materiais

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \left( -i\hbar\nabla - \frac{-e^*}{c} \mathbf{A} \right) \bigg|_S = \frac{i}{b} \Psi \bigg|_S.$$
(3.52)

Para a primeira situação, quando  $b \to \infty$ , a equação 3.52 se reduz à equação 2.34

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \left( -i\hbar\nabla - \frac{-e^*}{c} \mathbf{A} \right) \Big|_S = 0, \qquad (3.53)$$

a qual representa uma interface supercondutor/vácuo ou isolante, e que também implica no fato de que a supercorrente não pode atravessar o material perpendicularmente. Para um detalhamento das condições de contorno, vamos considerar uma amostra com geometria quadrada, e estabelecer suas fronteiras da seguinte forma: Fronteira oeste (face esquerda) i = 1 e fronteira oeste (face direita)  $i = N_x + 1$ ; Fronteira sul (face inferior) j = 1 e a fronteira norte (face superior)  $j = N_y + 1$ .

Mediante essas condições, a condição de contorno para o parâmetro de ordem será

$$\psi_{i,1} = U_{i,1}^{y} \psi_{i,2}, \qquad \psi_{i,N_y+1} = \overline{U}_{i,N_y}^{y} \psi_{i,N_y}, \qquad (3.54)$$
  
$$\psi_{1,j} = U_{1,j}^{x} \psi_{2,j}, \qquad \psi_{N_x+j,j} = \overline{U}_{N_x,j}^{x} \psi_{N_x,j}.$$

O campo magnético nas bordas fica

$$U_{i,1}^{x} = \overline{U}_{i+1,1}^{y} U_{i,2}^{x} U_{i,1}^{y} e^{-ia_{x}a_{y}H_{e}}, \qquad U_{i,N_{y+1}}^{x} = \overline{U}_{i,N_{y}}^{y} U_{i,N_{y}}^{x} U_{i+1,N_{y}}^{y} e^{ia_{x}a_{y}H_{e}}, \qquad (3.55)$$
$$U_{1,j}^{y} = U_{1,j}^{x} U_{2,j}^{y} \overline{U}_{i,j+1}^{x} e^{ia_{x}a_{y}H_{e}}, \qquad U_{N_{x+1},j}^{y} = U_{N_{x},j+1}^{x} U_{N_{x},j}^{y} \overline{U}_{N_{x},j}^{x} e^{-ia_{x}a_{y}H_{e}}.$$

Para uma situação no qual b > 0, que representa a interação de um supercondutor com um metal, teremos uma degradação da supercondutividade na amostra. Na condição, onde b < 0, há um aumento da supercondutividade, pois quando b é negativo teremos o contato entre dois supercondutores onde um deles possui  $T_c$  maior. Devido aos efeitos de proximidade, os elétrons do metal migram para a amostra supercondutora quando a interface é supercondutor/metal diminuindo a supercondutividade, enquanto que, para uma representação supercondutor/supercondutor, são os pares de Cooper que migram de um material para outro contribuindo com o aumento da supercondutividade [17]. Nessas condições o parâmetro de ordem tem a seguinte condição de contorno

$$\psi_{1,j} = (1 - a_y b^{-1}) U_{1,j}^x \psi_{2,j}, \qquad \psi_{N_x + 1,j} = (1 - a_y b^{-1}) \overline{U}_{N_x,j}^x \psi_{N_x,j}.$$
(3.56)

Em uma situação em que b = 0, a condição de contorno passa a ser a condição de Drichelet  $\psi_{i,j}|_s = 0$ , que representa um material com muitas impurezas (material ferromagnético por exemplo). Quando b = 0 existe uma divergência nessa situação, a simulação entende que existe uma película muito fina de um material ferromagnético ou um material no estado normal em contato com a amostra. No limite quando  $b \to 0^-$  temos uma interface com um material com  $T_c$  aumentando cada vez mais, entretanto,  $|\psi|^2 \to \infty$ , a magnetização  $M \to -\infty$  e a vorticidade  $L \to 0$ . Portanto, quando b = 0, é necessário considerar uma aproximação no limite quando  $b \to 0^+$  o qual representa a situação real para um sistema físico [97].

Em um sistema supercondutor com aplicação de uma corrente externa, existe na malha de discretização os dois contatos metálicos em cada lado por onde a corrente é injetada no sistema. O parâmetro de ordem nesses contatos fica  $\psi_{i,j} = 0$ , porém, devido às correntes e ao potencial escalar a condição de contorno nos contatos fica

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\mathbf{J}, \qquad \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0.$$
 (3.57)

Em qualquer outro local das bordas por onde não há entrada de corrente elétrica,  $\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0.$ 

### 3.2.4 Cálculo da magnetização e vorticidade

Uma das quantidades físicas mais analisadas neste tipo de simulação computacional são a magnetização e a vorticidade também chamada de fluxóide. O cálculo da magnetização vem da expressão já conhecida abaixo [16, 17].

$$M_z(t) = \frac{\langle B_z \rangle - H_e}{4\pi} \approx -\frac{\left[\frac{\sum_{\alpha} arg(U_{\alpha,n})}{a_i a_j}\right] - H_e}{4\pi}.$$
(3.58)

Para calcular a vorticidade usamos a integral da circulação do gradiente da fase do parâmetro de ordem, dada por

$$L = \frac{1}{\Phi_0} \oint \nabla \phi ds \approx \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \in \Gamma} \arg(\psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha+1}), \qquad (3.59)$$

onde  $\Gamma$ representa o domínio dentro do supercondutor no qual $\alpha$ percorre a borda exterior desse domínio no sentido positivo.

# Supercondutores mesoscópicos via teoria de Ginzburg-Landau

Neste capítulo, investigamos o estado supercondutor de uma amostra quadrada com um buraco no centro imerso em um campo magnético externo para diferentes condições de contorno. Resolvemos a 2B-TDGL e encontramos novos e interessantes configurações de vórtices onde será mostrado o efeito do comprimento de extrapolação de De Gennes (parâmetro De Gennes) e do tamanho do buraco sobre a magnetização e a vorticidade.

## 4.1 Formalismo teórico

A amostra estudada é apresentado na Figura 4.1. Ela possui lados iguais a  $L = 12\xi$ , e o defeito no centro que é aumentado para quatro valores diferentes,  $d = 1\xi, 2\xi, 3\xi, 4\xi$ , onde d representa a largura do quadrado central, sobre o qual é aplicada um campo magnético externo **H**. Em outro caso, agora sem o furo central, estudamos o efeito de interface



Figura 4.1: Representação do modelo estudado; uma amostra supercondutora quadrada com tamanho lateral igual a  $L = 12\xi$ , com um defeito central de largura d, imerso em um campo magnético perpendicular **H**.

desta amostra em contato com outro supercondutor com  $T_c$  maior e outro material tipo metálico, que será descrito com mais detalhes abaixo.

Para fazer a simulação utilizamos o funcional de Gibbs para um supercondutor de duas bandas, como é dado pelas equações 4.1 e 4.2, onde o acoplamento entre elas é mediado pelo termo  $\mathcal{O}_{i,j}$ 

$$\sum_{i=1}^{2} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \sum_{i=1}^{2} -(i\boldsymbol{\nabla} + \mathbf{A})^2 \psi_i + \psi_i (1 - |\psi_i|^2) + \sum_{i=1}^{2} \sum_{i \neq j}^{2} \mathcal{O}_{i,j},$$
(4.1)

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \sum_{i=1}^{2} \operatorname{Re} \Big[ \bar{\psi}_{i} (-i\boldsymbol{\nabla} - \mathbf{A}) \psi_{i} \Big] - \kappa^{2} \Big( \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) \Big).$$
(4.2)

Esse é o acoplamento Josephson, dado por  $\psi_i^* \psi_j + \psi_i \psi_j^*$ , onde o parâmetro de ordem tem a forma  $\psi_{i,j} = |\psi| e^{i\phi_{i,j}}$ , sendo que  $\phi_{i,j}$  é a fase do i-ésimo parâmetro. Assim o termo  $\mathcal{O}_{i,j}$ , fica igual a

$$O_{i,j} = 2\gamma_{i,j} |\psi_i| |\psi_j| \cos(\phi_j - \phi_i),$$
(4.3)

com a seguinte condição de contorno, já apresentada em 2.36

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (i\boldsymbol{\nabla} + \mathbf{A})\psi = -\frac{i}{b}\psi, \qquad (4.4)$$

porém aqui com uma modificação dada pela equação 4.5. Vamos considerar  $\gamma_{i,j} = -0.001$ baseado em trabalhos dados por [98, 99, 100]<sup>1</sup>. Na equação 4.4,  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor unitário normal à interface média, b é o comprimento de extrapolação de De Gennes que descreve essa média. Deve-se enfatizar que o supercondutor é coberto com uma camada fina de outro material. Vamos unificar a condição de contorno acima utilizando o seguinte parâmetro

$$\Gamma = 1 - \delta/b, \tag{4.5}$$

onde  $\delta$  é o tamanho da rede computacional. Convenientemente, essa relação permite obter uma análise melhor dos resultados acerca da interface da seguinte maneira: se (i)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Dependendo do valor de  $\gamma$  para supercondutores de mais de duas bandas, pode ocorrer a quebra espontânea de simetria temporal reversa. Para um sistema de duas bandas isso não acontece porque o acoplamento entre as fazes são iguais, isto é,  $\phi_i = \phi_j$  [62, 98, 101].

 $0 < \Gamma < 1$  temos uma interface supercondutor/metal  $(b > \delta)$ ; se (ii)  $\Gamma > 1$  corresponde a um supercondutor com  $T_c$  maior  $(b < \delta)$ ; (iii)  $\Gamma = 1$ , simula uma interface supercondutor/vácuo  $(b \to \infty)$ , and (iv) onde  $\Gamma = 0$  e  $(b = 0, \delta)$ , a interface corresponde a um estado normal ou condição de contorno de Dirichlet.  $\psi_{i,j}$  é o parâmetro de ordem em todo o condensado, e **A** é o potencial vetor. As equações precisam estar na forma adimensional, para isso faremos as seguintes considerações:  $|\psi_i|$  em unidades de  $\psi_{\infty} = \sqrt{-\alpha_i/\beta_i}$ , os comprimentos em unidades do comprimento de coerência  $\xi$ , **A** em unidades de  $H_{c2}\xi$ , onde  $H_{c2}$  é o segundo campo crítico, o tempo em unidades do tempo de Ginzburg-Landau, e  $t_{GL} = \pi\hbar/8k_BT_c\eta$ .

## 4.2 Resultados e discussão

Em todas as simulações o parâmetro de rede é dado por  $\Delta x = \Delta y = 0.1\xi$ , o tamanho da amostra é igual a  $L = 12\xi$ ,  $\kappa = 1.0$ , T = 0 e o tamanho do defeito é dado por d, dessa forma, faremos uma análise da primeira banda  $\psi_1$ .

#### 4.2.1 Caso (a): Amostra homogênea, d = 0 e $\Gamma = 1.0$

A figura4.2 mostra a magnetização  $-4\pi M$  e o número de vórtices (vorticidade) Ncomo uma função do campo magnético H para as duas bandas  $\psi_1, \psi_2$ , mas sem defeitos, d = 0, para uma interface supercondutor/vácuo  $\Gamma = 1.0$ . Um comportamento nãoconvencional<sup>2</sup> pode ser visto na magnetização e no número de vórtices, onde podemos ver que os primeiros vórtices penetram na amostra em um campo  $H_{c1} \simeq 0.75$  com N = 8para uma transição de vórtices  $N \rightarrow N + 2$  em altos campos magnéticos. Essa transição pode ser vista nas Figuras 4.3 e 4.4 que apresentam a densidade de pares de Cooper  $|\psi_i|^2$ . Temos então N = 8 vórtices para um campo externo variando entre  $0.75 \leq H \leq 0.98$ , N = 10 vórtices entre,  $1.04 \leq H \leq 1.24$ , e N = 12 para H = 1.38. Com isso, para baixos campos magnéticos pode-se ver que a configuração dos vórtices no sistema é diferente de um sistema de uma única banda se considerarmos um ponto de simetria no centro da amostra. Um comportamento similar é visto em sistema de 3 bandas (veja [98]), porque, em um sistema multibandas, as fases não necessariamente apresentam um mínimo para a energia, [64, 65, 66, 67, 99].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Entende-se como convencional o comportamento dos vórtices de Abrikosov que se agrupam em uma rede triangular.


Figura 4.2: (a) Magnetização e (b) vorticidade como função do campo magnético H, para d = 0 e  $\Gamma = 1.0$ .

Em H > 1.24, veja a Figura 4.4, nota-se que o movimento ordenado em relação ao pontos de simetria se perderam devido a competição entre os condensados para o controle do estado supercondutor onde, para cada gap ( $\psi_1, \psi_2$ ) existe uma energia de ativação diferente (repulsão) de curto alcance e atração de longo alcance, o que gera diferentes oscilações na rede cristalina (uma para cada gap), resultando em oscilações anarmônicas que se sobrepõem à fase (fonos ópticos) apenas para alguns pontos. Isso leva a competição entre os dois gaps e estabelece um movimento não coerente dos vórtices (e a média do parâmetro de ordem) [98, 100].



Figura 4.3: (acima) Módulo quadrado do parâmetro de ordem  $(|\psi_i|^2)$ , e (abaixo) posição central dos vórtices quando, d = 0 e  $\Gamma = 1.0$ . De (a-e)  $0.76 \le H \le 0.98$  com N = 8, em (f) H = 1.04 com N = 10.

É importante notar que os resultados da Figura 4.2(a), onde o sistema que foi considerado para a amostra no limite de filmes finos está de acordo com o estado de vórtices em um sistema de 3 bandas apresentado em [98] e proposta em [99], onde o sistema de duas bandas em filmes finos podem gerar um gap adicional devido aos fônons ópticos e o



Figura 4.4: (acima) Módulo quadrado do parâmetro de ordem  $(|\psi_i|^2)$ , e (abaixo) posição central dos vórtices quando, d = 0 e  $\Gamma = 1.0$ . De (a-e)  $1.24 \leq H \leq 1.32$  com N = 10, e (f) H = 1.38 com N = 12.

efeito de proximidade é perdido para filmes finos em uma dimensão.

# 4.2.2 Caso (b): Efeito do tamanho do defeito d sobre o estado e número de vórtices para $\Gamma = 1.0$

Vamos agora mostrar a influência do tamanho do defeito interno d, sobre a configuração de vórtices e a magnetização. Como d representa a largura do furo no centro, logo  $d^2$  é a área do buraco em  $\xi^2$ , portanto, nos gráficos abaixo a simulação é feita em relação ao aumento da área do defeito. A Figura 4.5(a-b), mostra a magnetização e a vorticidade respectivamente, para  $d/\xi = 1, 2, 3, 4$ , o que implica em  $d^2 = 1, 4, 9, 16(\xi^2)$ e  $\Gamma = 1.0$ . Podemos observar que  $H_{c1}$  e o máximo da magnetização aumenta quando d



Figura 4.5: (a) Magnetização para diferentes valores do defeito central. Nota-se a diminuição gradativa do campo  $H_{c1}$  conforme d diminui, no entanto,  $H_{c2}$  permanece constante. Em (b) a vorticidade para  $d^2 = 1, 4, 9, 16(\xi^2)$ , e  $\Gamma = 1.0$ , que apresenta o número de vórtices e a variação de  $H_{c1}$  com o aumento do defeito.

aumenta, mas a transição para o estado normal/supercondutor, campo  $H_{c2}$  se mantém constante. Portanto os defeitos ancoram os vórtices na amostra e a amostra permanece mais diamagnética quando d aumenta.

A Figura 4.6, apresenta a densidade de pares de Cooper e a posição do centro de vórtices para diversos valores de H e para  $d = 1\xi$ . Podemos notar que para baixos



Figura 4.6: (acima)  $(|\psi_i|^2)$ , e (abaixo) posição central dos vórtices quando,  $d/\xi = 1$  e  $\Gamma = 1.0$ , para  $0.88 \leq H \leq 1.24$  (a-f).

campos, o estado de vórtices exibe simetria ao redor da posição central da amostra, e como o sistema muda a partir do campo externo, os vórtices se reagrupam em grupos locais(um novo efeito para sistemas multi-bandas, veja [99]) próximo aos cantos dos defeitos. Isto ocorre por causa das oscilações da rede que exibem sobreposição construtiva perto dos vértices desses defeitos e, com um aumento do campo externo, a simetria tende a se perder, como pode ser visto nas Figuras 4.2 e 4.3, mas o efeito devido a inclusão do "pinning"(ancoramento) na posição de simetria causa uma barreira de energia que tende a ser simétrica nesses pontos.

Na Figura 4.7, fizemos o gráfico da  $|\psi|^2$  e da posição dos centros dos vórtices  $\psi = 0$ para  $d = 2\xi$  e  $\Gamma = 1.0$ . Podemos observar que o tamanho do defeito causa influência na configuração dos vórtices e do campo  $H_{c1}$ , como mostrada na Figura 4.5(a), adicionando ao fato de que os estados de equilíbrio para os campos magnéticos externos são diferentes. A Figura 4.8, mostra o estado de vórtices e a posição dos centros dos vórtices para  $d = 3\xi$ . A diferença dos casos anteriores no estado de vórtices  $H_{c1}$  e a posição dos vórtices pode ser observada. Finalmente, na Figura 4.9, o estado de vórtice e a posição dos centros dos vórtices para o maior defeito,  $d = 4\xi$ , pode ser vista e, como esperado, o número de vórtices na região supercondutora é muito menor, dado que o tamanho do defeito é comparável ao tamanho da amostra, isso deixa o espaço para a nucleação dos vórtices bastante reduzido.



Figura 4.7: (acima) ( $|\psi_i|^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando,  $d/\xi = 2$  e  $\Gamma = 1.0$ , para  $0.88 \leq H \leq 1.24$  (a-f).



Figura 4.8: (acima) ( $|\psi_i|^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando,  $d/\xi = 3$  e  $\Gamma = 1.0$ , para  $0.96 \le H \le 1.42$  (a-f).



Figura 4.9: (acima) ( $|\psi_i|^2$ ), e (abaixo) posição central dos vórtices quando,  $d/\xi = 4$  e  $\Gamma = 1.0$ , para  $1.08 \le H \le 1.34$  (a-f).

Na Figura 4.10 temos um fit que apresenta a dependência de  $H_{c_1}$  em função do buraco central na forma  $d^2 = 147.45H_{c_1} - 99.4$ .



Figura 4.10: "fit"do buraco central d em função do campo crítico  $H_{c_1}$ , o qual encontramos  $d^2 = 147.45H_{c_1} - 99.4$ .

## 4.2.3 Caso (c): Efeito das condições de contorno sobre o estado e o número de vórtices para d = 0

Vamos estudar agora a influência do efeito das condições gerais de contorno  $\Gamma$  sobre o sistema supercondutor. Lembrando que  $0 < \Gamma < 1$ , simula uma interface supercondutor/metal e  $\Gamma > 1$ , a interface é supercondutor/supercondutor com  $T_c$  maior.

A Figura 4.11(a) mostra a magnetização para diferentes valores de  $\Gamma$ , onde se observa que o campo  $H_{c_1}$  aumenta substancialmente quando  $\Gamma$  também aumenta. A Figura 4.11(b) mostra o número de vórtices quando  $\Gamma = 0.90, 0.98, N = 8$  vórtices entram no material para  $H_{c_1} = 0.88$ , e para valores de  $\Gamma = 1.02, 1.04, N = 4$  vórtices entram na amostra para



Figura 4.11: (a) O comportamento da magnetização nesta situação é bem diferente da anterior. Há uma campo  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  para casa valor de  $\Gamma$ , onde se observa também a diminuição (quando  $\Gamma < 1$ ), e aumento (quando  $\Gamma > 1$ ), desses dois campos críticos. (b) apresenta a vorticidade para d = 0 e  $\Gamma = 0.90, 0.98, 1.02, 1.04$ .

um campo igual a  $H_{c_1} = 0.72, 0.76.$ 

A Figura 4.12 mostra o estado de vórtices e a posição do centro dos vórtices para diferentes valores de H. Nesse sistema, podemos ver que os dois gaps estão em competição pelo controle do estado supercondutora para baixos valores do campo, e há um comportamento diferente daqueles mostrados nas Figuras 4.2-4.9, e que, como o sistema é levado a um estado normal, há estados em que o sistema parece estar em equilíbrio (observe os cantos da amostra).



Figura 4.12: Estado de vórtices e posição para  $\Gamma = 0.90$  e d = 0 para diferentes valores do campo externo.

Os estados de vórtices e a posição dos centros dos vórtices são apresentados na Figura 4.13, e que pode ser visto para um valor particular do campo H < 1.10, o sistema é similar ao mostrado na Figura 4.2, apenas para valores mais altos do campo o comprimento de coerência entre as fases é perdida e a dinâmica de cada gap começa a misturar e interagir fora de fase. Esse movimento pode ser entendido através da visualização de dois fluidos não-miscíveis para sistemas fechados.

As Figuras 4.14 e 4.15, mostram as mesmas variações das figuras anteriores, e como esperávamos existe mais de uma dependência perceptível sobre a dinâmica do estado de



Figura 4.13: Estado de vórtices e posição para  $\Gamma = 0.99$  e d = 0 para diferentes valores do campo externo.

vórtices de  $\Gamma$  nos casos de altos campos. Para campos maiores do que H > 1.10, o sistema inicia a disputa pelo estado supercondutor, isto é, provavelmente para energias maiores do que este estado, as oscilações dos fônons mecânicos no sistema exibe uma ativação anômala, i.e, as oscilações na rede vão ficando cada vez mais anarmônica devido as fato de que os deslocamentos dos pontos aumentam e os pares de Cooper envolvidos nos vórtices começam a interagir um com o outro, abrindo caminho para oscilações intermediárias da rede, onde os vórtices fracionários podem coexistir [64, 67, 71, 74].



Figura 4.14: Estado de vórtices e posição para  $\Gamma=1.02$  e d=0, para diferentes valores do campo externo.



Figura 4.15: Estado de vórtices e posição para  $\Gamma=1.04$  e d=0, e diferentes valores o campo externo.

### 4.3 Conclusões

Por meio da solução das equações TDGL Bi-dimensionais para um sistema de duas bandas (2B-TDGL), estudamos a densidade, magnetização, vorticidade e campos críticos dos elétrons supercondutores como função do campo magnético externo para diferentes valores do comprimento de extrapolação De Gennes sobre a superfície da amostra e para deferentes tamanhos de um defeito interno d. Mostramos a influência do tamanho do defeito d e as condições de contorno  $b \propto \Gamma^{-1}$  sobre o estado supercondutor de um sistema de duas bandas com acoplamento do tipo Josephson.

Observamos que as configurações dos vórtices são distintas em sistemas de 1 e 2 bandas, além da permanência dos vórtices na zona central do material, podemos ver também que a geometria da amostra não exerceu influência sobre a configuração dos vórtices. Os vórtices são disputados pelas duas bandas e seu movimento é quase circular ao redor do buraco. Entretanto, quando o buraco aumenta de tamanho temos uma área supercondutora menor e apenas 4 vórtices entram na amostra. Um exemplo seria um material sem defeito em contato com outro tipo de material simulado por  $\Gamma$ , o comportamento padrão dos vórtices é completamente diferente daqueles de uma única banda por causa dos dois gaps que tentam manter seu estado supercondutor o que leva a um comportamento não convencional. Encontramos também que  $H_{c_1}$  exibe uma dependência linear com  $d^2$  como  $d^2 = 0.9H_{c_1} - 0.1$ , e que a configuração dos vórtices e a magnetização depende fortemente de  $\Gamma$  e d.

# Propriedades supercondutoras de uma amostra retangular com defeitos e sob a ação de corrente e campo externo

Neste capítulo, nós estudamos a dinâmica de vórtices, energia livre de Gibbs, o diagrama de fases e a curva corrente-voltagem de uma estrutura tipo loop feito de um material supercondutor tipo-II na presença de um campo magnético externo H e uma corrente dc. Este estudo foi desenvolvido através da solução das equações G-TDGL (equações generalizadas de GL dependente do tempo com corrente elétrica aplicada) e o método das variáveis de ligação.

### 5.1 Formalismo teórico

A dinâmica de vórtices e as propriedades supercondutoras foram estudadas em um filme fino supercondutor com defeitos nos cantos e um defeito central no qual foi aplicado um campo externo H e uma corrente J. Dentro da aproximação de filmes finos ( $d \ll \xi$ ), podemos desprezar os efeitos do campo magnético produzido pela própria corrente de transporte. Portanto, pode-se tratar esse problema como bi-dimensional. Em unidades adimensionais, as equações c-TDGL podem ser escritas como [102, 103, 96, 104, 92, 93]:

$$\frac{u}{\sqrt{1+\Gamma^2|\psi|^2}} \left[\frac{\partial}{\partial t} + i\varphi + \frac{\Gamma^2}{2}\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}\right]\psi = (\boldsymbol{\nabla} - i\mathbf{A})^2\psi + (\tau - |\psi|^2)\psi , \qquad (5.1)$$

que é acoplada com a equação para o potencial escalar,  $\Delta \varphi = \text{div} \{ \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - i\mathbf{A})\psi] \}$ . As distâncias são dadas em termos de  $\xi$ , o tempo em unidades do tempo característico GL,  $t_{GL} = \pi \hbar/8k_B T_c u$ , o potencial escalar,  $\varphi$ , é dado em unidades de,  $\varphi_0 = \hbar/2et_{GL}$ , e



Figura 5.1: A amostra é composta de um loop retangular com dimensões  $e + 2f = 9.20\xi$ ,  $c + 2d = 22.71\xi$ , com um buraco interno com  $a = b = 3.2\xi$ . O tamanho dos eletrodos é  $m = 1\xi$ , através da qual é injetada uma densidade de corrente dc uniforme J. O campo magnético externo H é perpendicular ao plano da amostra. No primeiro caso (a) temos um material com um buraco (defeito) no centro e nos cantos. No caso (b) existe uma material supercondutor com temperatura crítica mais baixa no lugar dos defeitos, simulado por  $\tau = 0$ .

o potencial vetor,  $\mathbf{A}$ , é dado por  $H_{c2}\xi$ , onde  $H_{c2}$  é o segundo campo crítico. A partir da teoria microscópica obtemos os parâmetros, u = 5.79 e  $\Gamma = t_E \psi_0/\hbar$  (o qual é dependente do material,  $t_E$  é o tempo de espalhamento inelástico) [92, 93].  $\tau(x, y)$  é uma função da temperatura crítica local. A seguinte condição de contorno de Neumann  $\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi = 0$ , é tomada em todos os lados, exceto nos eletrodos, onde é usado  $\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi = -J$ . Aqui J é a densidade de corrente aplicada em unidade de  $J_0 = c\sigma\hbar/2et_{GL}$ , e  $\sigma$  é a condutividade elétrica no estado normal. Para o parâmetro de ordem, usamos as condições de contorno de Neumann em todos os lados do filme,  $\mathbf{n} \cdot (i\nabla + \mathbf{A})\psi = 0$ , com exceção dos eletrodos, onde se utilizou a condição de contorno de Dirichlet  $\psi = 0$ .

O tamanho da rede computacional é  $N_x \times N_y$ , com  $a_x = a_y = 0.1\xi$ . As dimensões da nossa amostra de nióbio foram escolhidas, de maneira que fiquem tão próximas quanto possíveis do trabalho feito por Berdiyorov [105]. Dessa forma, as dimensões na Figura 5.1, são:  $e + 2f = 9.20\xi$ ,  $c + 2d = 22.71\xi$ ,  $a = b = 3.2\xi$ . Na presente simulação, temos para o comprimento de coerência,  $\xi(0) = 10 \ nm$ , a profundidade de penetração de London  $\lambda(0) = 200 \ nm$ , e o parâmetro GL  $\kappa = 2 \ [106]$ , cujos valores são típicos para um filme fino de Nb. Para realizar nossa simulação as equações GL precisam ser discretizadas usando método das variáveis de ligação ou método  $\Psi - U$ . Desta forma, o parâmetro, o potencia vetor e o campo magnético externo podem ser arranjados em uma rede discreta cujos pontos podem ser ligado pelas variáveis  $U_x$ , e  $U_y$ . A característica importante deste método é a invariância de gauge das TDGL, as quais já são bastante usadas na literatura. A discretização dessas equações podem ser vistas neste trabalho bem como nas referências [95, 107, 108].

### 5.2 Resultados e discussão

# 5.2.1 Caso (a). Propriedades supercondutoras de uma amostra retangular com defeitos e sob a ação de campo magnético externo.

Na Figura 5.2 apresentamos o diagrama de fases H - T para o caso (a). Essas curvas apresentam um típico comportamento de uma supercondutor tipo-II. Pode-se observar que abaixo do campo crítico  $H_{c1}$ , (o campo no qual o primeiro vórtice ocorre), a amostra permanece no estado Meissner, enquanto que para  $H_{c1} < H < H_{c2}$  (acima do segundo campo crítico  $H_{c2}$  ou campo de transição do estado normal-supercondutor), existe estado de vórtices e em  $H \sim H_{c2}$  a amostra está se aproximando do estado normal. Foi feita uma simulação para várias temperaturas, e para cada temperatura o campo crítico  $H_{c1}$ foi obtido, indicando o momento em que o material supercondutor é atravessado pelo campo magnético externo, i.e., quando o primeiro vórtice penetra na amostra. A curva delimita a região no espaço H - T, em que a amostra supercondutora apresenta o efeito Meissner o estado normal e o estado de vórtices. Como a temperatura aumenta, o valor do campo magnético necessário para entrar no material diminui devido à grande agitação térmica crescente na rede, tornando mais difícil a existência do estado supercondutor e, desta forma, facilitando a destruição dos pares de Cooper. A curva superior delimita uma região onde a supercondutividade e o estado de vórtices co-existem. Essa região está entre a linha  $H_{c1}$  e a linha superior  $H_{c2}$ . Ainda sobre a Figura 5.2, a curva mostra que o aumento na temperatura corresponde à diminuição do campo  $H_{c1}$ , o que indica que a



Figura 5.2: O diagrama de fases H - T quando J = 0, para o caso (a).

elevação da temperatura facilita a penetração do campo magnético externo, produzindo os vórtices e destruindo o estado supercondutor. Acima da curva  $H_{c2}$  o material se encontra no estado completamente normal.

A Figura 5.3 mostra em a magnetização (a), e a energia livre de Gibbs (b) como uma função do campo magnético aplicado para T = 0.5; 0.6; 0.7, 0.8, 0.9. A magnetização cai abruptamente no campo crítico  $H_{c1}$ , onde a transição de fase do estado supercondutor para o estado normal acontece com a penetração de um ou mais vórtices ao mesmo tempo. Como esperado o campo crítico  $H_{c1}$  diminui com o aumento da temperatura e os vórtices penetram no material para campos cada vez mais baixos, o que pode ser visto por meio das descontinuidades mais próximas de  $T_c$ . A Figura 5.4 (a,b) apresenta a curva da magnetização e da histerese para T = 0.4 e T = 0.60, no qual se observa o comportamento diamagnético do supercondutor quando o campo aumenta porém, a amostra apresenta um comportamento paramagnético com a diminuição do campo. Quando se aplica um campo externo, a corrente supercondutora impede a sua entrada que só consegue penetrar depois de um certo valor  $H_{c1}$  sob a forma dos vórtices. Entretanto, quando o campo começa a diminuir, a corrente de blindagem que antes não deixava o campo entrar agora não deixa os vórtices saírem resultando no comportamento paramagnético da histerese. O resultado dessa histerese está de acordo com a ref. [109]. Na figura 5.4(c) a energia livre de Gibbs como uma função do campo magnético aplicado H para T = 0.90; 0.92; 0.94; 0.95, mostra que as descontinuidades da energia livre continuam para valores ainda mais próximos de



Figura 5.3: (a) temos a magnetização  $-4\pi M$  e (b) energia livre de Gibbs G como uma função do campo magnético externo aplicado para T = 0.5; 0.6; 0.7, 0.8, 0.9 para o caso (a).

 $T_c$ .

Na Figura 5.5, apresentamos o comportamento oscilatório da susceptibilidade magnética para diferente valores de temperatura. Podemos observar que  $H_1 \approx 0.22$  para T = 0.6 e  $H_{c1} \approx 0.12$  para T = 0.9, com o aumento da temperatura  $H_1$  diminui, e como era esperado , a susceptibilidade magnética, definida como,  $\chi_m = \partial M/\partial H = 0$ , também diminui em  $H \gg H_{c2}$ . Nossos resultados estão de acordo com os encontrado por J. Barba e C. Aguirre em [110], que mostra a susceptibilidade magnética em uma amostra com defeitos sob a ação de um campo externo.

Nas Figuras 5.6 e 5.7, foi feito o gráfico do módulo quadrado do parâmetro de ordem  $|\Psi|^2$  para T = 0.5 e T = 0.6, para vários campos magnéticos. Nessas figuras podemos observar que para H = 0.410, quatro vórtices N = 4 entram na amostra. Com o aumento do campo externo os vórtices se agrupam ao redor do furo central onde podemos observar que eles acabam entrando no buraco em H = 0.396 para T = 0.6, (veja a Figura 5.7d). Observa-se que a nucleação dos vórtices é dada pela maior área supercondutora. Em ambas as figuras, os vórtices se agrupam ao redor do furo central formando um estado



Figura 5.4: (a) e (b) Magnetização e a curva da histerese para T=0.40 e T=0.60. (c) Energia livre de Gibbs G como uma função do campo magnético externo H para T = 0.90; 0.92; 0.94; 0.95, mostrando que as descontinuidades continuam a ocorrer mesmo em temperaturas perto de  $T_c$ .



Figura 5.5: Susceptibilidade magnética  $\chi_m$  como uma H função para a) T = 0.6, b) T = 0.7, c) T = 0.8 e d) T = 0.9.

multi-vórtice, diversas configurações ocorrem ao redor do furo. Eles se agrupam em um arranjo triangular na tentativa de minimizar a energia até atingir uma configuração estável. Então, o número de vórtices aumentam com a aplicação do campo magnético externo até a destruição do estado supercondutor.



Figura 5.6: Módulo quadrado do parâmetro de ordem  $|\Psi|^2$  para T = 0.5 com a indicação dos campos magnéticos.



Figura 5.7: Módulo quadrado do parâmetro de ordem  $|\Psi|^2$  para T=0.6 com a indicação dos campos magnéticos.

## 5.2.2 Caso (b). Propriedades supercondutoras de uma amostra retangular com defeitos e sob a ação de corrente elétrica externa.

Para a análise da resposta supercondutora da amostra em função de uma densidade de corrente dc, calculamos as curvas características da corrente-voltagem (I - V), correnteresistência (I - R), a média da velocidades dos pares vórtices-antivórtices  $(V - A_v)$  e a densidade eletrônica supercondutora para várias temperaturas para o caso (b) (veja a Figura 5.1 (b)).

Na Figura 5.8(a) temos o tempo médio da voltagem V como uma função da densidade de corrente aplicada J para T = 0.0, 0.25, 0.50, 0.75, e em (b) fizemos o logaritmo do parâmetro de ordem,  $ln|\psi|$  (a curva amarelo/vermelho corresponde ao parâmetro de ordem maior/zero  $|\psi|$ ) e a supercorrente  $J_s$  em T = 0. Como podemos ver nessa Figura  $J_{c1} =$ 0.44, 0.97, 1.65, 2.40 para T = 0.75, 0.50, 0.25, 0.0, respectivamente ( $J_{c1}$  é a corrente no qual o primeiro par vórtice-antivórtice penetra na amostra).



Figura 5.8: (a) Curva da voltagem V como uma função da densidade de corrente aplicada J para várias temperaturas. (b) Logaritmo do parâmetro de ordem,  $ln \mid \psi \mid$  (ama-relo/vermelho correspondendo ao maior/zero respectivamente  $\mid \psi \mid$ ) com a supercorrente  $J_s$  em T = 0.

Note que uma nova  $J_c$  aparece quando T decresce, o que faz aparecer novos valores de  $J_c$ , como  $J_{c2} = 2.74$  e  $J_{c3} = 3.17$  em T = 0;  $J_{c2} = 1.91$  em T = 0.25. Podemos mostrar também que o máximo local na resistividade aumenta com o aumento de T devido aos vórtices cinemáticos ou pares V - Av no material. Esse aumento na resistividade ocorre devido à presença de uma corrente externa J no condensado tornando-o instável e fazendo

com que  $\psi \to 0$ . Note também que  $J_{c1}$  diminui quando a temperatura aumenta como era esperado. Ainda assim, observa-se que em T > 0.50 temos uma lenta transição para o estado normal. A amostra estudada apresenta apenas um tipo de dinâmica V - Av, onde todos os pares são formados no centro perpendicular à direção da corrente J e aniquilamse na borda da amostra. Quando atinge-se a  $J_{c1}$ , o par V - Av surge no centro da amostra (I), eles se afastam em direção às bordas, perpendicularmente à corrente aplicada, distanciando-se cada vez mais (II-III), até saírem da amostra pelas bordas superior e inferior (IV), (veja a Figura 5.8(b, I-IV). Este comportamento é fisicamente coerente, uma vez que a supressão da supercondutividade sobre o defeito central desencadeia a nucleação do estado normal.

E importante notar que, a presença de regiões abaixo de  $T_c$  ( $\tau = 0$ ) não afeta o perfil da supercorrente na nossa amostra. A supercorrente circunda toda a borda do material, cumprindo a condição de contorno de Newnann sobre a superfície externa  $J_s \cdot \mathbf{n} = 0$ e continua sobre a borda entre os dois materiais. A resistência para  $J < J_{c1}$  é devido somente aos eletrodos, o sistema entra em um estado resistivo com um salto finito na tensão de saída, assinalada pela descontinuidade na resistência  $\partial V/\partial J$ , como uma função da corrente aplicada J. Esses resultados aparecem na Figura 5.9 para T = 0.0; 0.25. Esse estado resistivo é caracterizado pelo movimento em alta velocidade dos vórtices cinemáticos como reportado nos trabalhos [111, 112].



Figura 5.9: (a) Resistividade  $\partial V/\partial J$  em função da corrente aplicada J para T = 0 e T = 0, 25. Velocidade média dos pares de vórtices-anti-vórtices V - Av, para (b)T = 0.25 e (c) T = 0.

No inset da Figura 5.9, observamos que a média da velocidade do processo de aniquilação dos vórtices-antivórtices V - Av, para T = 0 e T = 0.25, onde vemos que com o aumento de T, a velocidade também aumenta. Como dissemos anteriormente, na nossa amostra todos os pares são formados no centro e aniquilados nas bordas. Na Figura 5.10, apresentamos o logaritmo de  $|\psi|$  quando se aplica um campo externo junto à corrente. Apresenta-se na Figura 5.10(a) um gráfico com dois valores de campo externo H = 0 e H = 0.4, na presença de diferentes correntes externas. Através da aplicação do campo externo, notamos que a barreira energética da superfície diminui causando um decaimento drástico no valor de  $J_{c1}$ , e causando um aumento nas inomogeneidades das linhas de corrente que podem ser observadas nas Figuras 5.10(b-c). Encontramos também dois vórtices de Abrikosov N = 1 em J = 0.62, cuja nucleação também ocorre no centro, veja a Figura 5.10(b-I) e um segundo  $V_{Ab}$ , N = 2 quando J = 0.92, para T = 0.25 e H = 0.4, mostrado na Figura 5.10(b-II).



Figura 5.10: (a) Voltagem V em função da densidade de corrente aplicada J para H = 0, 0.4 e T = 0.25. (b) Logaritmo do parâmetro de ordem,  $ln \mid \psi \mid$  (amarelo/vermelho correspondendo ao maior/zero respectivamente  $\mid \psi \mid$ ) com a super-corrente  $J_s$  para J = 0.62, 0.92 para H = 0.4.

### 5.2.3 Conclusões

Nesta seção, obtivemos os campos críticos, susceptibilidade magnética, magnetização, energia livre de Gibbs e a curva I - V para diferentes valores de temperatura. O diagrama de fase H - T, próximo de  $T_c$  mostra uma oscilação periódica com uma amplitude diminuindo rapidamente quando  $T \rightarrow T_c$ . Analisamos também, a resistividade sob uma corrente de transporte dc aplicada, onde verificamos que a corrente crítica  $J_{c1}$ , que marca o início do estado resistivo e os saltos no gráfico da curva I-V, correspondentes a diferentes correntes crítica, mostram uma forte dependência com a temperatura. Encontramos que os pares V - Av se formam no centro e aniquilam nas bordas da amostra, e essa dinâmica independe da temperatura. Finalmente, quando um campo magnético externo é aplicado no material, o campo crítico  $J_{c1}$  diminui devido à diminuição da barreira energética da superfície, possibilitando assim a formação de estados de vórtice de Abrikosov.

### Conclusões e Perspectivas

Nesta Tese, obtivemos, via simulação computacional, resultados tais como a magnetização, energia livre, susceptibilidade magnética, parâmetro de ordem e vorticidade para um material supercondutor mesoscópico no âmbito de uma e duas bandas, com e sem defeitos no limite de filmes finos. Também investigamos o comportamento de uma amostra supercondutora quando em contato com um material ferromagnético ou supercondutor com  $T_c$  maior. Para entender esses efeitos de interface sobre a magnetização e a configuração dos vórtices, utilizamos valores do comprimento de extrapolação de De Gennes. Utilizamos a teoria de Ginzburg-Landau para supercondutores mesoscópicos, o método das variáveis de ligação ( $\psi - U$ ), e por meio da discretização, resolvemos as equações GL numericamente para todas as simulações computacionais. Nossos resultados permitiram observar e compreender melhor o comportamento da matéria de vórtices em materiais supercondutores.

No Capítulo IV, estudamos uma amostra via teoria de Ginzburg-Landau de duas bandas (2B-TDGL), pelas quais foram obtidas propriedades físicas como magnetização, vorticidade e o parâmetro de ordem. Primeiramente, caso (a) realizamos nossas simulações para uma amostra homogênea (sem defeitos) no vácuo (interface supercondutor/vácuo), de onde obtivemos a magnetização, a vorticidade e o parâmetro de ordem que serviu para comparar com os outros dois casos: (b) amostra com defeito central, de tamanhos variados e, (c) amostra em contato com outro tipo de material.

No caso (b), a amostra com defeitos, o aumento do furo central provocou a diminuição do campo  $H_{c1}$  mas não do  $H_{c2}$ , o que sugere um ancoramento dos vórtices pelo defeito. Em um sistema de mais de uma banda, como foi realizado neste trabalho, é necessário um acoplamento do tipo Josephson para ligar uma banda na outra, isso leva à competição entre elas pelo estado supercondutor e a uma configuração não convencional dos vórtices na amostra.

O estudo dos efeitos de interface, caso (c), mostrou o que ocorre quando nossa amostra supercondutora se encontra em contato com outro material. Numa situação onde a vizinhança é de origem ferromagnética/supercondutora, ocorreu a diminuição/aumento dos campos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$ , comparado às magnetizações obtidas anteriormente para uma interface supercondutor/vácuo. As consequências dos efeitos de interface também podem ser vistos no parâmetro de ordem; para um material supercondutor em contato com um material ferromagnético, os elétrons saltam do metal para o supercondutor, aumentado a quantidade de elétrons e causando uma acentuada degradação do estado supercondutor. No entanto, para uma vizinhança supercondutora com  $T_c$  maior, são os pares de Cooper que passam a amostra, aumentando a densidade dos pares e mantendo por mais tempo a supercondutividade. Esses efeitos causado pela contaminação de um supercondutor por outros materiais é importante para entendermos quais deles, possivelmente, poderão colaborar para manter um estado supercondutor em temperaturas além de  $T_c$ .

No Capítulo V, utilizamos uma amostra com defeitos nas bordas e no centro, agora para um sistema de uma banda pela teoria GL. No caso (a), aplicamos um campo magnético externo onde podemos ver o decaimento dos campos  $H_{c1}$ , devido ao aumento da temperatura, nos gráficos da energia livre, magnetização, e na susceptibilidade magnética. Como a supercondutividade é um fenômeno de baixas temperaturas, o aumento da temperatura causa a degradação dos pares de Cooper, e a consequente diminuição dos campos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$ , como pode ser visto no diagrama H - T. Por meio da plotagem do parâmetro de ordem, constamos que os vórtices entram na amostra pelas laterais e agrupam-se ao redor do furo central na tentativa formar uma rede triangular semelhante à rede de Abrikosov.

Ainda no Capitulo V, agora caso (b), aplicamos uma corrente externa onde analisamos a destruição do estado supercondutor, e o surgimento da primeira corrente crítica  $J_{c1}$ , a qual mostra o início do estado resistivo do sistema, também conhecido como *phase slip*. Após  $J_{c1}$ , ocorre a nucleação do par vórtice-antivórtice cinemático no meio da amostra e sua saída pelas bordas superior e inferior do material, perpendicularmente à corrente de transporte. Aplicou-se um campo externo juntamente com a corrente para uma temperatura igual T = 0.25K, o que ocasionou numa drástica diminuição do valor de  $J_{c1}$ , isso porque esses três fatores (temperatura, campo magnético e corrente) são os responsáveis pela destruição do pareamento eletrônico e a supressão do estado supercondutor. A aplicação do campo externo na amostra com corrente possibilitou a nucleação de dois vórtices de Abrikosov, que são distintos dos vórtices cinemáticos. Os resultados apresentados nesta seção estão de acordo com os resultados encontrados em [25, 36, 42, 47, 113, 114, 115].

Ainda há muito a ser feito, por exemplo, visto que a geometria do material interfere na forma e comportamento dos vórtices, pode-se investigar geometrias diferentes tais como, discos ou retângulos com ou sem defeitos, em contato com outros tipos de material. Um sistema de duas ou mais bandas com aplicação de corrente de transporte pode ser estudado para saber se ocorrem nucleação de vórtices cinemáticos, Abrikosov ou algum outro tipo de vórtice ainda não conhecido. A utilização de outros tipos de acoplamentos entre bandas seria uma forma muito interessante de comparação com os resultados aqui obtidos.

A

## Equações TDGL adimensionais

Lembrando das seguintes considerações feitas no capítulo 2:  $\Psi = \psi_0 \tilde{\psi}, \mathbf{A} = H_{c2}(0)\xi(0)\tilde{\mathbf{A}},$  $T = T_c \tilde{T}, \nabla = \frac{1}{\xi(0)}\tilde{\nabla}, t = t_0 \tilde{t}, \text{ onde } t_0 = \frac{\xi_0^2}{D}.$ 

# A.1 Adimensionalização da 1º equação

Vamos multiplicar ambos os lados da equação (2.100) por  $\psi_0$ ,

$$\psi_0 \frac{\hbar^2}{2m^* D} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{ie^* \phi}{\hbar} \Psi \right) = \psi_0 \left[ \alpha \Psi + \beta (\Psi^* \Psi) \Psi + \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi \right], \quad (A.1)$$

e fazer os cálculos separadamente. Começando pelo termo do lado esquerdo da equação A.1, teremos,

$$\psi_0 \frac{\hbar^2}{2m^* D} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{ie^* \phi}{\hbar} \Psi \right) =$$

$$\psi_0 \frac{\hbar^2}{2m^* D} \left[ \frac{\partial (\psi_0 \tilde{\psi})}{\partial (t_0 \tilde{t})} \right] = \psi_0^2 \frac{\hbar^2}{2m^* D t_0} \left( \frac{\alpha_0 T_c}{\alpha_0 T_c} \right) \left[ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} \right] = \left( \frac{\hbar^2}{2m^* \alpha_0 T_c} \right) \frac{\psi_0^2 \alpha_0 T_c}{D} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}}.$$
(A.2)

Lembrando que  $\xi^2(T) = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha(T)|}$ . e que  $\alpha(T) = \alpha_0(T - T_c) \longrightarrow \alpha(0) = \alpha_0 T_c$ , vem que,

$$\psi_{0} \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}D} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi_{0} \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}D} \frac{\partial(\psi_{0}\tilde{\psi})}{\partial(t_{0}\tilde{t})} = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}D} \psi_{0}^{2} \left(\frac{D}{\xi^{2}(0)}\right) \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}} = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \left[\frac{\psi_{0}^{2}}{\left(\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}|\alpha(T)|}\right)}\right] \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}} = \psi_{0}^{2}\alpha_{0}T_{c}\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}}.$$
(A.3)

Continuando com o primeiro termo,

$$\psi_0 \frac{\hbar^2}{2m^* D} \left(\frac{ie^* \phi}{\hbar}\right) \Psi = \psi_0 \frac{\hbar ie^*}{2m^* D} \left(\frac{H_{c2}(0)D}{c}\tilde{\phi}\right) (\psi_0 \tilde{\psi}). \tag{A.4}$$

Precisaremos do fluxóide  $\Phi_0 = \frac{hc}{2e}$ , da definição do segundo campo crítico  $H_{c2} = \frac{2\pi}{\xi^2(0)}$ , e de  $\xi^2(0) = \alpha_0 T_c$ . Resolvendo separadamente, teremos,

$$H_{c2}(0) = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2(0)} = \left\lfloor \frac{\frac{\hbar c}{2e}}{2\pi \left(\frac{\hbar^2}{2m^*\alpha_0 T_c}\right)} \right\rfloor = \frac{2m^*c}{e^*\hbar} \alpha_0 T_c.$$
(A.5)

Substituindo A.5 em A.4, chegamos em,

$$\frac{\hbar e^*}{2m^* c} \left(\frac{2m^* c}{e^* \hbar}\right) \left(\alpha_0 T_c \psi_0^2\right) i \tilde{\phi} \tilde{\psi} = \alpha_0 T_c \psi_0^2 (i \tilde{\phi} \tilde{\psi}).$$
(A.6)

Substituindo agora A.3 e A.6 em A.2, tem-se,

$$\psi_0 \frac{\hbar^2}{2m^* D} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{i e^* \phi}{\hbar} \Psi \right) = \psi_0^2 \alpha_0 T_c \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} + i \tilde{\phi} \tilde{\psi} \right) \tag{A.7}$$

Agora o termo do condensado,

$$-\psi_0 \Big( \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi \Big) = -\psi_0 \alpha \psi_0 \tilde{\psi} + -\psi_0 \beta |\psi_0|^2 |\tilde{\psi}|^2 (\psi_0 \tilde{\psi}) = \\ -\psi_0^2 \alpha \tilde{\psi} + \beta \psi_0^2 \tilde{\psi} |\psi_0|^2 |\tilde{\psi}|^2 = \psi_0^2 \Big( -\alpha \tilde{\psi} - \beta \Big(\frac{-\alpha}{\beta}\Big) \tilde{\psi} |\tilde{\psi}|^2 \Big),$$

onde usamos  $\psi_0^2 = \frac{-\alpha}{\beta}$ , logo,

$$\psi_0^2 \bigg( -\alpha \tilde{\psi} + \alpha \tilde{\psi} |\tilde{\psi}|^2 \bigg) = \psi_0^2 \bigg[ -\alpha \tilde{\psi} \bigg( 1 - |\tilde{\psi}|^2 \bigg) \bigg].$$

Usando também,  $\alpha = \alpha_0 (T - t_c)$  e  $T = T_c \tilde{T}$ , temos,

$$\psi_0^2 \left[ -\alpha_0 \left( T - T_c \right) \tilde{\psi} \left( 1 - |\tilde{\psi}|^2 \right) \right] = \psi_0^2 \alpha_0 \left[ \left( T_c - T \right) \tilde{\psi} \left( 1 - |\tilde{\psi}|^2 \right) \right] = \psi_0^2 \alpha_0 \left[ \left( T_c - T_c \tilde{T} \right) \tilde{\psi} \left( 1 - |\tilde{\psi}|^2 \right) \right] = \psi_0^2 \alpha_0 T_c \left[ \left( 1 - \tilde{T} \right) \tilde{\psi} \left( 1 - |\tilde{\psi}|^2 \right) \right].$$
(A.8)

Terminado com o termo cinético.

$$\psi_0 \left[ \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi \right] = \psi_0^2 \left[ \frac{\hbar}{2m^*} \left( -i\nabla - \frac{e^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \tilde{\psi} \right] =$$
$$\psi_0^2 \left[ \frac{\hbar}{2m^* \xi^2(0)} \left( -i\tilde{\nabla} - \frac{e^*}{\hbar c} \xi(0) \mathbf{A} \right)^2 \tilde{\psi} \right] = \psi_0^2 \left[ \frac{1}{2m^* \xi^2(0)} \left( -i\tilde{\nabla} - \frac{e^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \tilde{\psi} \right]. \quad (A.9)$$

Cálculos auxiliares: Precisaremos do fluxóide  $\Phi_0 = \frac{hc}{2e}$ , e da definição do segundo campo crítico  $H_{c2} = \frac{2\pi}{\xi^2(0)}$ .

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}} \Longrightarrow \xi^2(T) = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha_0(T - T_c)|} \Longrightarrow \xi^2(0) = \frac{\hbar^2}{2m^*\alpha_0 T_c}.$$
 (A.10)

$$\frac{e^*}{\hbar c}\xi(0)\mathbf{A} = \frac{2e}{\frac{\hbar c}{2\pi}}\xi(0)\mathbf{A} = \frac{2\pi}{\frac{\hbar c}{2e}}\xi(0)\mathbf{A} = \frac{2\pi}{\Phi_0}\xi(0)\mathbf{A}.\left(\frac{\xi(0)}{\xi(0)}\right) = \frac{2\pi}{\Phi_0}\xi^2(0)\frac{\mathbf{A}}{\xi(0)} = \frac{1}{\left(\frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2(0)}\right)}\frac{\xi(0)}{\mathbf{A}} = \frac{1}{H_{c2}(0)\xi(0)}\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{A}}.$$
(A.11)

Substituindo A.10 e A.11 em A.9, chegamos em,

$$\frac{\psi_0^2 \hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2}{2m^* \alpha_0 T_c}\right)} \left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)^2 \tilde{\psi} = \psi_0^2 \alpha_0 T_c \left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)^2 \tilde{\psi}.$$
(A.12)

Juntando, A.7, A.8 e A.12 em A.1, tem-se,

$$\frac{\hbar^2}{2m^*D}\psi_0^2\alpha_0 T_c\left(\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}} + i\tilde{\phi}\tilde{\psi}\right) = \psi_0^2\alpha_0 T_c\left[\left(1 - \tilde{T}\right)\tilde{\psi}\left(1 - |\tilde{\psi}|^2\right)\right] + \psi_0^2\alpha_0 T_c\left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)^2\tilde{\psi},$$
$$\frac{\hbar^2}{2m^*D}\left(\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}} + i\tilde{\phi}\tilde{\psi}\right) = \left[\left(1 - \tilde{T}\right)\tilde{\psi}\left(1 - |\tilde{\psi}|^2\right)\right] + \left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)^2\tilde{\psi},$$

finalmente, omitindo-se os til's, chegamos em,

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\phi\psi\right) = \frac{1}{\eta} \Big[ \left(-i\nabla - \mathbf{A}\right)^2 \psi + (1 - T)(1 - |\psi|^2)\psi \Big], \tag{A.13}$$

onde  $\eta = \frac{2m^*D}{\hbar^2}$ .

## A.2 Adimensionalização da $2^{\underline{0}}$ equação

Vamos reescrever a equação (2.101) da seguinte forma,

$$\frac{4\pi\sigma_n}{c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi\right) = \frac{4\pi\sigma_n}{c}\left\{\frac{e^*}{m^*}\mathcal{R}e\left[\Psi^*\left(-i\hbar\nabla-\frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)\Psi\right]-\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}\right\},(A.14)$$

e resolver os termos separadamente. Para o primeiro termos do lado esquerdo, teremos,

$$\frac{4\pi\sigma_n}{c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi\right) = \frac{4\pi\sigma_n}{c^2}\left[\frac{\partial\left(H_{c2}(0)\xi(0)\tilde{\mathbf{A}}\right)}{\partial\left(t_0\tilde{t}\right)} - \frac{1}{\xi(0)}\tilde{\nabla}\left(\frac{H_{c2}D}{c}\right)\tilde{\phi}\right] =$$

$$=\frac{4\pi\sigma_n}{c^2}\left[\left(\frac{H_{c2}\xi(0)}{t_0}\right)\frac{\partial\tilde{\mathbf{A}}}{\partial\tilde{t}} - \left(\frac{H_{c2}D}{\xi(0)c}\right)\tilde{\nabla}\tilde{\phi}\right] = \frac{4\pi\sigma_n}{c^2}\left[\left(\frac{H_{c2}\xi(0)}{\xi^2(0)/D}\right)\frac{\partial\tilde{\mathbf{A}}}{\partial\tilde{t}} - \left(\frac{H_{c2}D}{\xi(0)c}\right)\tilde{\nabla}\tilde{\phi}\right] =$$

$$= \frac{4\pi\sigma_n D}{c^2} \left(\frac{H_{c2}}{\xi(0)}\right) \left[\frac{\partial\tilde{\mathbf{A}}}{\partial\tilde{t}} - \tilde{\nabla}\tilde{\phi}\right].$$
 (A.15)

Agora, para o primeiro termo da direita, tem-se,

$$\frac{4\pi\sigma_n}{c} \left\{ \frac{e^*}{m^*} \mathcal{R}e\left[\Psi^*\left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)\Psi\right] \right\} = \frac{4\pi\sigma_n}{c} \left\{ \frac{e^*}{m^*} \mathcal{R}e\left[\psi_0^*\tilde{\psi}^*\left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)\psi_0\tilde{\psi}\right] \right\} = \frac{4\pi\sigma_n}{c} \frac{4\pi\sigma_n}{m^*c} \psi_0^2 \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^*\left(-i\hbar\frac{1}{\xi(0)}\tilde{\nabla} - \frac{e^*}{c}H_{c2}\xi(0)\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] = \frac{4\pi\sigma_n}{c} \frac{4\pi\sigma_n}{m^*c} \frac{4\pi\sigma_n}{m^*c} \frac{1}{m^*c} \left[\tilde{\psi}^*\left(-i\hbar\frac{1}{\xi(0)}\tilde{\nabla} - \frac{e^*}{c}H_{c2}\xi(0)\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] = \frac{4\pi\sigma_n}{c} \frac{4\pi\sigma_n}{m^*c} \frac{1}{m^*c} \frac{1}{m^*c}$$

$$\frac{4\pi\sigma_n e^*}{m^* c} \psi_0^2 \frac{\hbar}{\xi(0)} \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^* \left(-i\tilde{\nabla} - \frac{e^*}{\hbar c} H_{c2}\xi^2(0)\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] = \frac{4\pi\sigma_n e^*}{m^* c} \psi_0^2 \frac{\hbar}{\xi(0)} \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^* \left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right].$$

Vamos multiplicar e dividir por  $e^*/c$ , e utilizar as definições de  $\Phi_0$ ,  $H_{c2}$  e  $\lambda^2(T) = \frac{m^*c^2}{4\pi\psi_0^2 e^*}$ , nos passos abaixo. Assim, teremos,

$$\frac{\hbar c}{e^*} \frac{1}{\lambda^2(T)\xi(0)} \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^*\left(-i\tilde{\nabla}-\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] = \frac{\hbar c}{2\pi 2e} \frac{1}{\lambda^2(0)\xi(0)} \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^*\left(-i\tilde{\nabla}-\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right].$$

Multiplicando por  $\frac{\xi(0)}{\xi(0)}$ , utilizando  $\lambda(T) = \sqrt{\frac{\lambda(0)}{1 - T/T_c}}$ , e  $T = T_0 \tilde{T}$ , segue que,

$$\left(\frac{\Phi_{0}}{2\pi\xi^{2}(0)}\right)\frac{\xi(0)}{\left(\frac{\lambda(0)^{2}}{1-T/T_{c}}\right)}\mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^{*}\left(-i\tilde{\nabla}-\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] = H_{c2}\frac{\xi(0)}{\lambda^{2}(0)}\left(1-\tilde{T}\right)\mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^{*}\left(-i\tilde{\nabla}-\tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right].$$
(A.16)

Agora, o último termo,

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{\xi^2} H_{c2}(0) \xi(0) \Big( \tilde{\nabla} \times \tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{A}} \Big).$$
(A.17)

Substituindo as equações A.15, A.16 e A.17 em A.14 chegamos em,

$$\frac{4\pi\sigma_n D}{c^2} \left(\frac{H_{c2}}{\xi(0)}\right) \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{A}}}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\nabla}\tilde{\phi}\right] = H_{c2}\frac{\xi(0)}{\lambda^2} \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^*\left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] \\ -\frac{1}{\xi^2}H_{c2}(0)\xi(0)\left(\tilde{\nabla}\times\tilde{\nabla}\times\tilde{\mathbf{A}}\right).$$

Eliminando o  $H_{c2}$  e multiplicando ambos os lados por  $\lambda^2(0)/\xi(0)$ , teremos,

$$\frac{4\pi\sigma_n D}{c^2} \left(\frac{\lambda^2(0)}{\xi^2(0)}\right) \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{A}}}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\nabla}\tilde{\phi}\right] = \frac{\xi(0)}{\lambda^2} \left(\frac{\lambda^2}{\xi(0)}\right) \mathcal{R}e\left[\tilde{\psi}^*\left(-i\tilde{\nabla} - \tilde{\mathbf{A}}\right)\tilde{\psi}\right] \\ -\frac{1}{\xi^2}\xi(0)\left(\frac{\lambda^2(0)}{\xi(0)}\right)\left(\tilde{\nabla}\times\tilde{\nabla}\times\tilde{\mathbf{A}}\right),$$

finalmente, deixando os til's de lado, chegamos em,

$$\Gamma\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi\right) = \left(1 - T\right) \mathcal{R}e\left[\psi^*\left(-i\nabla - \mathbf{A}\right)\psi\right] - \kappa^2\left(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}\right).$$
(A.18)

onde  $\Gamma = 4\pi\sigma_n D\kappa^2/c^2$ .

# В

# Obtenção da forma explícita para $\partial \psi / \partial t$ da G-TDGL utilizando o método de Cramer

Considerando que as  $\psi$  e  $\psi^*$ , são independentes, nas equações 2.117 e 2.119 abaixo,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{2}\psi\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta}{u} - i\phi\psi, \tag{B.1}$$

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{2}\psi^*\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta^*}{u} - i\phi\psi^*,\tag{B.2}$$

e lembrando que  $|\psi|^2{=}\,\psi\psi^*,$ e que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \psi \psi^* \right] = \left[ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \psi^* + \psi \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right],\tag{B.3}$$

podemos reescreve-las o lado esquerdo da equação B.1 da seguinte forma,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\gamma^2}{2} \left[ \psi\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right] = \frac{\partial\psi}{\partial t} \left[ 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 \right] + \frac{\gamma^2}{2} \psi^2 \frac{\partial\psi^*}{\partial t}.$$
 (B.4)

De forma análoga a equação B.2 também é obtida logo, as equações B.1 e B.2, ficam,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}\left[1+\frac{\gamma^2}{2}|\psi|^2\right] + \frac{\gamma^2}{2}\psi^2\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta}{u} - i\phi\psi,\tag{B.5}$$

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\left[1+\frac{\gamma^2}{2}|\psi|^2\right] + \frac{\gamma^2}{2}\psi^{*2}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta^*}{u} - i\phi\psi^*.$$
 (B.6)

Utilizando o método de Cramer, podemos escrever o seguinte sistema de equações como,

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 & \frac{\gamma^2}{2} \psi^2 \\ \frac{\gamma^2}{2} \psi^{*2} & 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \gamma^2 |\psi|^2} \frac{\Delta}{u} - i\phi\psi \\ \sqrt{1 + \gamma^2 |\psi|^2} \frac{\Delta^*}{u} - i\phi\psi^* \end{pmatrix}.$$
 (B.7)

Resolvendo o determinante do sistema, obtemos,

$$\begin{bmatrix} 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 & \frac{\gamma^2}{2} \psi^2 \\ \frac{\gamma^2}{2} \psi^{*2} & 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\gamma^2}{2} |\psi|^2 \end{bmatrix}^2 - \frac{\gamma^4}{4} |\psi|^4 = 1 + \gamma^2 |\psi|^2.$$
(B.8)

Portanto a solução  $\partial \psi / \partial t$  será,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \begin{bmatrix} \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta}{u} - i\phi\psi & \frac{\gamma^2}{2}|\psi|^2\\ \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}\frac{\Delta^*}{u} - i\phi\psi^* & 1+\frac{\gamma^2}{2}|\psi|^2 \end{bmatrix} /1 + \gamma^2|\psi|^2, \tag{B.9}$$

onde finalmente,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2} \frac{\Delta}{u} - \frac{\gamma^2 \psi \mathcal{R}e\left(\psi^* \frac{\Delta}{u}\right)}{\sqrt{1+\gamma^2|\psi|^2}} - i\phi\psi.$$
(B.10)

## Método das diferenças finitas

C

A expansão de uma função v, em séries de Taylor à direita e esquerda de um ponto  $x_0$ , respectivamente, é dada por

$$v(x_0 + \Delta x) = v(x_0) + \frac{d}{dx}v(x_0)\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dx^2}v(x_0)\Delta x^2 + \dots$$
(C.1)

e

$$v(x_0 - \Delta x) = v(x_0) - \frac{d}{dx}v(x_0)\Delta x - \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dx^2}v(x_0)\Delta x^2 + \dots$$
(C.2)

Isolando a primeira derivada nas duas equações acima, teremos

$$\frac{d}{dx}v(x_0) \approx \frac{v(x_0 + \Delta x) - v(x_0)}{\Delta x},\tag{C.3}$$

$$\frac{d}{dx}v(x_0) \approx \frac{v(x_0) - v(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}.$$
(C.4)

Somando as equações C e C chegamos em

$$2\frac{d}{dx}v(x_0) = \frac{v(x_0 + \Delta x) - v(x_0 - \Delta x)}{\Delta x},$$

ou então

$$\frac{d}{dx}v(x_0) = \frac{v(x_0 + \Delta x) - v(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}.$$
(C.5)

Para a segunda derivada teremos

$$\frac{d^2}{dx^2}v(x_0) = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left[ \frac{(v(x_0 + \Delta x) - v(x_0))}{\Delta x} \right] - \left[ \frac{v(x_0) - v(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} \right] \right\},$$

a qual se torna

$$\frac{d^2}{dx^2}v(x_0) = \frac{v(x_0 + \Delta x) - 2v(x_0) + v(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2}.$$
 (C.6)

As expressões C.5 e C.6, correspondem à representações discretas das derivadas de primeira e segunda ordem utilizadas na discretização das TDGL.

# $\mathcal{D}$

Artigo publicado no The European Physical Journal B (EPJ B)



Eur. Phys. J. B (2020) 93: 69

DOI: 10.1140/epjb/e2020-100418-4

# Two-band superconducting square with a central defect: role of the deGennes extrapolation length

Thiago Nunes Jorge, Cristhian Aguirre, Alberto de Arruda, and José Barba-Ortega





Springer

# Artigo submetido ao Journal of Superconductivity and Novel Magnetism (JOSC)

### Superconducting properties of a thin square loop

| ARTICLE INFO           | ABSTRACT  |
|------------------------|---|
| Keywords:              | In this work we investigate the vortex dynamics, magnetization, Gibbs free energy, the phase diagram              |
| Phase diagram          | and current-voltage curve of a loop structure made of a type II superconducting material in presence              |
| Ginzburg-Landau theory | of a external applied field H and current dc. This study was carried out solving the well knows time-             |
| Magnetization          | dependent Ginzburg-Landau equations using the popular link variable method. The phase diagram H                   |
| Order parameter        | as a temperature function T close the critical temperature Tc show a periodic oscillations, similarly             |
|                        | to the Little-Parks effect. We found that the critical current for the transition to the resistive state $J_{c1}$ |
|                        | and the number of jumps in the $I - V$ curve, exhibits a strong dependence on the temperature of the              |
|                        | sample. Finally, When a Lorentz force is applied, is appreciate a decrease in the critical current and            |
|                        | also. Abrikosov vortex state is present in the sample   |

#### 1. Introduction

Over the past years, superconductivity has been one of the topics that most aroused interest, both from an academic and application point of view. From the academic point of view, superconductivity has presented several novelties. The first superconductorat high critical temperature  $(T_c)$ , was Ln-based perovskite ceramic sample LaBaCuO or LBCO with  $T_c = 35K$ , and was reported in the refrence [1]. Later, some compounds were synthesized, one in which Ln was replaced by yttrium YBCO with Tc = 92K [2] and another, BiSrCaCuO with  $T_c = 107K$  [3], with a large increase in critical temperature. In the following years new materials with interesting superconducting properties were synthesized, such as  $MgB_2$ , Fe and C based superconducting materials. In addition, ultra-fine superconducting films have been successfully synthesized, showing that superconductivity may exist at the extreme two-dimensional limit. On other hand, the superconductivity have been reliably used in a variety of areas, as for example, in medicine for very early diagnosis of various diseases and magnetic activity analysis of different regions of the human body through magnetic resonance imaging, magnetic resonance spectroscopy, magne-toencephalography, biotechnology, image processing technology [4]. More recently, other sophisticated applications of the superconductivity phenomenon have been employed. as for example, the detection of very weak magnetic field through the known superconducting quantum interference device [5, 6]. The appearance of the electronic superconductors (also known as supertronics) has made possible the exchange of semiconductors by superconductor in the elaboration of several devices that are used to perform measurements and detection of high precision and other applications in telecommunications [7]. Still from the academic point of view, the Ginzburg-Landau (GL) theory has been used with great success to explain the properties of superconductors and also of several other subjects [8, 9]. In this theory the constituent particles of the material being studied are being ordered continuously as the temperature drops to zero. Due to the phenomenological character, the GL theory only be-

\*J. Barba-Ortega \*\*jjbarbao@unal.edu.co ORCID(s):

came important after the publication of Gorkov [10], which showed that the GL theory is a particular case of BCS at temperatures near to the critical temperature, establishing a connection of the order parameter of GL with Cooper pairs of BCS, and now it is currently the most powerful theory to study the macroscopic properties of superconductors [11]. Thus GL theory has become one of the most studied phys ical theories and widely used to describe a wide variety of phenomena in several areas of physics. For example, in superconductivity is used to treat various properties of the su-perconductors, such as single band samples or multi-band samples [12, 13, 14, 15], finite or semi infinite samples and other applications [16]. Directly experiments have showed magnetization is dependent of temperature, size of the sample and external applied magnetic field, moreover, vortex dynamics like multi-vortex state or giant-vortex state in mesoscopics samples was found [17, 18, 19, 20]. A similar geom etry was studied by Berdiyorov et al, he studied the effect of sample geometry on the magnetic response of a circular and square loops of Nb. They found that the H-T phase diagrams close to  $T_c(0)$  show periodic oscillations on top of a parabolic back ground [21]. J. Barba-Ortega et al studied the resistive state of a superconducting strip with an engineered defect at the center, they show that the critical current density depend on the critical temperature, the position, the geometry of the defect, and on the boundary conditions [22, 23]. In summary, this theory (GL) is very general and is being applied in physics and engineering even in the case of the symmetry breaking phase transitions that occurred in the primordial universe as matter cooled after the Big Bang. This paper is organized as follows: In section 2 we describe eoretical formalism used to study a mesoscopic superthe th conductor using GL theory. Then in section 3, we presented the results about phase diagram, magnetization, free energy and the order parameter. In section 4, we present our con

#### 2. Theoretical Formalism

In this work we investigated the vortex dynamics and the superconducting properties of a superconducting thin film with a central and corner defect in the presence of an exter-nal magnetic field H and current J. Within the thin film

T. N. Jorge, C. A. Aguirre, A. S. de Arruda, J. Barba-Ortega: Preprint submitted to Elsevier

Page 1 of 6

# Artigo não relacionado à tese publicado no Physical Review B

PHYSICAL REVIEW B 97, 115149 (2018)

#### Spin-selective electronic reconstruction in quantum ferromagnets: A view from the spin-asymmetric Hubbard model

J. Faúndez,<sup>1</sup> T. N. Jorge,<sup>1,2</sup> and L. Craco<sup>1,3,\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, 78060-900 Cuiabá, MT, Brazil
<sup>2</sup>Campus Floresta, Universidade Federal do Acre, 69980-000 Cruzeiro do Sul, AC, Brazil
<sup>3</sup>IFW Dresden, Institute for Solid State Research, P.O. Box 270116, D-01171 Dresden, Germany

(Received 6 September 2017; revised manuscript received 8 November 2017; published 26 March 2018)

Using the tight-binding treatment for the spin-asymmetric Hubbard model we explore the effect of electronic interactions in the ferromagnetic, partially filled Lieb lattice. As a key result we demonstrate the formation of correlation satellites in the minority spin channel. In addition, we consider the role played by transverse-field spin fluctuations in metallic ferromagnets. We quantify the degree of electronic demagnetization, showing that the half-metallic state is rather robust to local spin flups. Not being restricted to the case of a partially filled Lieb lattice, our findings are expected to advance the general understanding of spin-selective electronic reconstruction in strongly correlated quantum ferromagnets.

DOI: 10.1103/PhysRevB.97.115149

#### I. INTRODUCTION

Metallic ferromagnetism results from the existence of permanent magnetic moments in correlated electron bands [1]. Historical examples in this class of metallic quantum systems are three-dimensional, monoatomic chains of elemental transition-metal ferromagnets like iron, cobalt, and nickel [2]. The microscopic mechanism underlying band ferromagnetism is known to be one of the most fundamental many-particle problems in condensed matter physics [3]. It is believed to be due to the interplay between Coulomb, Hund, or double-exchange interactions and kinetic energy as determined by the Pauli principle. In other words, itinerant quantum ferromagnetism results from a nontrivial interplay between the kinetic energy of itinerant electrons and manybody interactions (on-site and intersite components) as well as disorder in the solid [4]. Microscopic many-particle models for understanding the origin of itinerant ferromagnetism have been proposed independently by Hubbard [5]. Kamori [6], and Gutzwiller [7] but this remains a major unsolved and open debate problem[1]. On general grounds, ferromagnetic ground states might occur if one of the several bands of the Coulomb correlated model is dispersionless, determining the so-called Lieb (or flat-band) ferromagnetism [8,9]. The Hubbard model is, hown to be the canonical description of strongly correlated electron systems. It was introduced to

The Hubbard model is known to be the canonical description of strongly correlated electron systems. It was introduced to explain ferromagnetism in transition metals [5], and since then, it has been considered a model for antiferromagnetism, unconventional superconductivity, and fractionalized phases of quantum matter. In spite of its apparent simple form, the Hubbard model encodes nontrivial many-body physics that can only be treated exactly at particular one-dimensional [10] and high-lattice-dimensional [11] limits. Importantly, this model is now considered to be one of the most fundamental

2469-9950/2018/97(11)/115149(6)

115149-1

test frame for approximate theories. The Nagaoka theorem [16], for example, states that a saturated ferromagnetic order is the ground state for the  $U = \infty$  Hubbard model when one hole/electron is introduced into the half-filled band for the simple cubic lattice in three dimensions. The Mermin-Wagner theorem [17], on the other hand, rules out at finite temperatures both the ferromagnetic and the antiferromagnetic ordered state in the one-hand Hubbard model below two dimensions [18]. Moreover, in addition to many-particle interaction effects, important details of the noninteracting electronic structure induced by lattice topologies, e.g., the asymmetry of the local density of states (DOS) [19] as well the existence of van Hove singularities near the Fermi energy,  $E_F$ , must be considered in some cases [20]. Thus, based on extant studies, it seems that two main ingredients favor ferromagnetism in the Hubbard model: an asymmetric DOS with singularities eart by generated by introducing next-nearest-neighbor hopping terms [20]. In this work we focus our attention on the effect of electron-electron interactions on the partially filled Lieb lattice, which, in addition to the two cases above, possesses intrinsic flat-band ferromagnetism [8]. It is noteworthy, however, that our theory and results are not restricted to the Lieb lattice and

among various microscopic theories for understanding hidden

properties of correlated electron systems, including as shown

here the formation of Hubbard satellites in fully polarized oneband ferromagnets. However, even for this one-band model

Hamiltonian, a comprehensive picture of the mechanism that drives ferromagnetic order is still missing [12]. The difficulty in understanding the origin of itinerant or half-metallic ferro-

magnetism [13] is mainly due to the fact that the ordering and the formation of local moments are a strong-coupling, multiorbital [14,15] phenomenon and thus in general the ferromagnetic magnetic ground state is not easily described by purely perturbative techniques. Nonetheless, some exactly known results for the Hubbard model have been used as a

©2018 American Physical Society

<sup>&</sup>quot;lcraco@fisica.ufmt.br

### Referências Bibliográficas

- D. B. de Araujo and O. Baffa, "Contribuições da supercondutividade na medicina," *Revista USP*, no. 92, pp. 176–187, 2012.
- [2] A. Bergen, R. Andersen, M. Bauer, H. Boy, M. Ter Brake, P. Brutsaert, C. Bührer, M. Dhallé, J. Hansen, H. Ten Kate, *et al.*, "Design and in-field testing of the world's first rebco rotor for a 3.6 mw wind generator," *Superconductor science and technology*, vol. 32, no. 12, p. 125006, 2019.
- [3] A. Cassat and M. Jufer, "Maglev projects technology aspects and choices," *IEEE Transactions on applied superconductivity*, vol. 12, no. 1, pp. 915–925, 2002.
- [4] M. J. Martínez-Pérez and D. Koelle, "Nanosquids: Basics & recent advances," *Physical Sciences Reviews*, vol. 2, no. 8, 2017.
- [5] W. Roger, M. Victor, B. Simon, and T. Francesco, "Superconductors at the nanoscale," 2017.
- [6] H. Kamerlingh Onnes, "The resistance of pure mercury at helium temperatures," Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden, b, vol. 120, 1911.
- [7] D. van Delft and P. Kes, "The discovery of superconductivity," *Europhysics News*, vol. 42, no. 1, pp. 21–25, 2011.
- [8] W. Meissner and R. Ochsenfeld, "Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit," *Naturwissenschaften*, vol. 21, no. 44, pp. 787–788, 1933.
- [9] F. London and H. London, "The electromagnetic equations of the supraconductor," Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences, vol. 149, no. 866, pp. 71–88, 1935.
- [10] L. Shubnikov, V. Khotkevich, Y. D. Shepelev, and Y. N. Ryabinin, "Magnetic properties of superconducting metals and alloys," *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 7, pp. 221– 237, 1937.
- [11] J. Rjabinin and L. Shubnikow, "Magnetic properties and critical currents of supraconducting alloys," *Nature*, vol. 135, no. 3415, pp. 581–582, 1935.
- [12] A. Shepelev, "The discovery of type ii superconductors (shubnikov phase)," AM Luiz, pp. 17–46, 2010.
- [13] W. Buckel, "Supraleitung grundlagen und anwengen," in *Physik Verlag GmbH*, Weinheim Bergstr, 1972.
- [14] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, "On the theory of superconductivity," in On Superconductivity and Superfluidity, pp. 113–137, Springer, 2009.
- [15] V. L. Ginzburg, "Nobel lecture: On superconductivity and superfluidity (what i have and have not managed to do) as well as on the "physical minimum" at the beginning of the xxi century," *Reviews of Modern Physics*, vol. 76, no. 3, p. 981, 2004.
- [16] P.-G. De Gennes, Superconductivity of metals and alloys. CRC Press, 2018.
- [17] M. Tinkham, Introduction to superconductivity. Courier Corporation, 2004.
- [18] A. Abrikosov, "Soviet phys," JETP, vol. 5, no. 117, p. 4, 1957.
- [19] U. Essmann and H. Träuble, "The direct observation of individual flux lines in type-ii superconductors," *Physics letters A*, vol. 24, no. 10, pp. 526–527, 1967.
- [20] M. Miloševic, "Vortex matter in mesoscopic superconductor/ferromagnet heterosystems," PhD thesis, Universiteit Antwerpen, 2004.
- [21] J. Bardeen, "Ln cooper, and jr schrieffer," Phys. Rev. vol. 108, no. 1175, p. 5, 1957.

- [22] L. P. Gor'kov, "Microscopic derivation of the ginzburg-landau equations in the theory of superconductivity," Sov. Phys. JETP, vol. 9, no. 6, pp. 1364–1367, 1959.
- [23] J. G. Bednorz and K. A. Müller, "Possible hight c superconductivity in the ba- la- cuo system," Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, vol. 64, no. 2, pp. 189–193, 1986.
- [24] J. G. Bednorz and K. A. Müller, "Perovskite-type oxides—the new approach to high-t c superconductivity," *Reviews of Modern Physics*, vol. 60, no. 3, p. 585, 1988.
- [25] E. Sardella, A. L. Malvezzi, P. N. Lisboa-Filho, and W. A. Ortiz, "Temperaturedependent vortex motion in a square mesoscopic superconducting cylinder: Ginzburg-landau calculations," *Physical Review B*, vol. 74, no. 1, p. 014512, 2006.
- [26] A. Shanenko, M. Milošević, F. Peeters, and A. Vagov, "Extended ginzburg-landau formalism for two-band superconductors," *Physical review letters*, vol. 106, no. 4, p. 047005, 2011.
- [27] M. Silaev and E. Babaev, "Microscopic derivation of two-component ginzburglandau model and conditions of its applicability in two-band systems," *Physical Review B*, vol. 85, no. 13, p. 134514, 2012.
- [28] A. Vagov, A. Shanenko, M. Milošević, V. M. Axt, and F. Peeters, "Two-band superconductors: Extended ginzburg-landau formalism by a systematic expansion in small deviation from the critical temperature," *Physical Review B*, vol. 86, no. 14, p. 144514, 2012.
- [29] T. N. Jorge, C. Aguirre, A. de Arruda, J. Barba-Ortega, et al., "Two-band superconducting square with a central defect: role of the degennes extrapolation length," *The European Physical Journal B: Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 93, no. 4, pp. 1–7, 2020.
- [30] N. Orlova, A. Shanenko, M. Milošević, F. Peeters, A. Vagov, and V. M. Axt, "Ginzburg-landau theory for multiband superconductors: Microscopic derivation," *Physical Review B*, vol. 87, no. 13, p. 134510, 2013.

- [31] Y. Kuramoto, Chaos and Statistical Methods: Proceedings of the Sixth Kyoto Summer Institute, Kyoto, Japan September 12–15, 1983, vol. 24. Springer Science & Business Media, 2012.
- [32] A. Kanda, B. Baelus, F. Peeters, K. Kadowaki, and Y. Ootuka, "Experimental evidence for giant vortex states in a mesoscopic superconducting disk," *Physical review letters*, vol. 93, no. 25, p. 257002, 2004.
- [33] B. Baelus, A. Kanda, N. Shimizu, K. Tadano, Y. Ootuka, K. Kadowaki, and F. Peeters, "Multivortex and giant vortex states near the expulsion and penetration fields in thin mesoscopic superconducting squares," *Physical Review B*, vol. 73, no. 2, p. 024514, 2006.
- [34] M. Morelle, J. Bekaert, and V. V. Moshchalkov, "Influence of sample geometry on vortex matter in superconducting microstructures," *Physical Review B*, vol. 70, no. 9, p. 094503, 2004.
- [35] A. Andronov, I. Gordion, V. Kurin, I. Nefedov, and I. Shereshevsky, "Kinematic vortices and phase slip lines in the dynamics of the resistive state of narrow superconductive thin film channels," *Physica C: Superconductivity and its Applications*, vol. 213, no. 1-2, pp. 193–199, 1993.
- [36] G. Berdiyorov, M. Milošević, and F. Peeters, "Kinematic vortex-antivortex lines in strongly driven superconducting stripes," *Physical Review B*, vol. 79, no. 18, p. 184506, 2009.
- [37] G. Berdiyorov, A. Elmurodov, F. Peeters, and D. Vodolazov, "Finite-size effect on the resistive state in a mesoscopic type-ii superconducting stripe," *Physical Review B*, vol. 79, no. 17, p. 174506, 2009.
- [38] G. Berdiyorov, K. Harrabi, J. Maneval, and F. Peeters, "Effect of pinning on the response of superconducting strips to an external pulsed current," *Superconductor Science and Technology*, vol. 28, no. 2, p. 025004, 2014.
- [39] A. He, C. Xue, H. Yong, and Y. Zhou, "The guidance of kinematic vortices in a mesoscopic superconducting strip with artificial defects," *Superconductor Science* and *Technology*, vol. 29, no. 6, p. 065014, 2016.

- [40] C. Xue, A. He, C. Li, and Y. Zhou, "Stability of vortex rotation around a mesoscopic square superconducting ring under radially injected current and an external magnetic field," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 29, no. 13, p. 135401, 2017.
- [41] A. He, C. Xue, and Y.-H. Zhou, "Dynamics of vortex-antivortex pair in a superconducting thin strip with narrow slits," *Chinese Physics B*, vol. 26, no. 4, p. 047403, 2017.
- [42] J. Barba-Ortega, M. R. Joya, and E. Sardella, "Resistive state of a thin superconducting strip with an engineered central defect," *The European Physical Journal B*, vol. 92, no. 7, p. 143, 2019.
- [43] B. Ivlev and N. Kopnin, "Theory of current states in narrow superconducting channels," *Soviet Physics Uspekhi*, vol. 27, no. 3, p. 206, 1984.
- [44] A. Sivakov, A. Glukhov, A. Omelyanchouk, Y. Koval, P. Müller, and A. Ustinov,
  "Josephson behavior of phase-slip lines in wide superconducting strips," *Physical review letters*, vol. 91, no. 26, p. 267001, 2003.
- [45] M. D. Eisaman, J. Fan, A. Migdall, and S. V. Polyakov, "Invited review article: Single-photon sources and detectors," *Review of scientific instruments*, vol. 82, no. 7, p. 071101, 2011.
- [46] C. M. Natarajan, M. G. Tanner, and R. H. Hadfield, "Superconducting nanowire single-photon detectors: physics and applications," *Superconductor science and technology*, vol. 25, no. 6, p. 063001, 2012.
- [47] G. Berdiyorov, K. Harrabi, F. Oktasendra, K. Gasmi, A. Mansour, J. Maneval, and F. Peeters, "Dynamics of current-driven phase-slip centers in superconducting strips," *Physical Review B*, vol. 90, no. 5, p. 054506, 2014.
- [48] A. Presotto, E. Sardella, A. Malvezzi, and R. Zadorosny, "Dynamical regimes of ultrafast kinematic vortices in the resistive state of mesoscopic superconductors," arXiv preprint arXiv:1910.04893, 2019.
- [49] R. Doll and M. Näbauer, "Experimental proof of magnetic flux quantization in a superconducting ring," *Physical Review Letters*, vol. 7, no. 2, p. 51, 1961.

- [50] B. S. Deaver Jr and W. M. Fairbank, "Experimental evidence for quantized flux in superconducting cylinders," *Physical Review Letters*, vol. 7, no. 2, p. 43, 1961.
- [51] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, "Superconductivity at 39 k in magnesium diboride," *nature*, vol. 410, no. 6824, p. 63, 2001.
- [52] A. Leggett, "Number-phase fluctuations in two-band superconductors," Progress of Theoretical Physics, vol. 36, no. 5, pp. 901–930, 1966.
- [53] D. Tilley, "The ginzburg-landau equations for pure two band superconductors," Proceedings of the Physical Society, vol. 84, no. 4, p. 573, 1964.
- [54] A. R. d. C. Romaguera and K. Silva, "Variational method applied to two-component ginzburg-landau theory," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 54, no. 9, p. 093501, 2013.
- [55] A. Y. Liu, I. Mazin, and J. Kortus, "Beyond eliashberg superconductivity in mgb 2: anharmonicity, two-phonon scattering, and multiple gaps," *Physical Review Letters*, vol. 87, no. 8, p. 087005, 2001.
- [56] F. Giubileo, D. Roditchev, W. Sacks, R. Lamy, D. Thanh, J. Klein, S. Miraglia, D. Fruchart, J. Marcus, and P. Monod, "Two-gap state density in mgb 2: a true bulk property or a proximity effect?," *Physical review letters*, vol. 87, no. 17, p. 177008, 2001.
- [57] S. Bud'Ko, G. Lapertot, C. Petrovic, C. Cunningham, N. Anderson, and P. Canfield,
  "Boron isotope effect in superconducting mgb 2," *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 9, p. 1877, 2001.
- [58] H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, and S. G. Louie, "The origin of the anomalous superconducting properties of mgb 2," *Nature*, vol. 418, no. 6899, pp. 758–760, 2002.
- [59] M. Iavarone, G. Karapetrov, A. Koshelev, W. Kwok, D. Hinks, G. Crabtree, W. Kang, E.-M. Choi, H. J. Kim, and S.-I. Lee, "Mgb2: directional tunnelling and two-band superconductivity," *Superconductor Science and Technology*, vol. 16, no. 2, p. 156, 2002.

- [60] L. Komendová, Y. Chen, A. Shanenko, M. Milošević, and F. Peeters, "Two-band superconductors: Hidden criticality deep in the superconducting state," *Physical Review Letters*, vol. 108, no. 20, p. 207002, 2012.
- [61] J. Garaud, J. Carlström, E. Babaev, and M. Speight, "Chiral c p 2 skyrmions in three-band superconductors," *Physical Review B*, vol. 87, no. 1, p. 014507, 2013.
- [62] J. Garaud, J. Carlström, and E. Babaev, "Topological solitons in three-band superconductors with broken time reversal symmetry," *Physical review letters*, vol. 107, no. 19, p. 197001, 2011.
- [63] C. Platt, R. Thomale, C. Honerkamp, S.-C. Zhang, and W. Hanke, "Mechanism for a pairing state with time-reversal symmetry breaking in iron-based superconductors," *Physical Review B*, vol. 85, no. 18, p. 180502, 2012.
- [64] Y. Tanaka, "Soliton in two-band superconductor," *Physical review letters*, vol. 88, no. 1, p. 017002, 2001.
- [65] Y. Tanaka, "Emergence of an interband phase difference and its consequences in multiband superconductors," in *Vortices and Nanostructured Superconductors*, pp. 185– 218, Springer, 2017.
- [66] Y. Tanaka, "Phase instability in multi-band superconductors," Journal of the Physical Society of Japan, vol. 70, no. 10, pp. 2844–2847, 2001.
- [67] Y. Tanaka, "Multicomponent superconductivity based on multiband superconductors," Superconductor Science and Technology, vol. 28, no. 3, p. 034002, 2015.
- [68] E. Babaev, "Vortices with fractional flux in two-gap superconductors and in extended faddeev model," *Physical review letters*, vol. 89, no. 6, p. 067001, 2002.
- [69] E. Babaev and N. W. Ashcroft, "Violation of the london law and onsager-feynman quantization in multicomponent superconductors," *nature physics*, vol. 3, no. 8, p. 530, 2007.
- [70] M. Silaev, "Stable fractional flux vortices and unconventional magnetic state in twocomponent superconductors," *Physical Review B*, vol. 83, no. 14, p. 144519, 2011.

- [71] Y. Tanaka, H. Yamamori, T. Yanagisawa, T. Nishio, and S. Arisawa, "An unconventional vortex state in a superconducting bilayer where one layer has a hole," *Solid State Communications*, vol. 277, pp. 39–44, 2018.
- [72] E. Babaev and J. Carlström, "Type-1.5 superconductivity in two-band systems," *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, no. 19, pp. 717–721, 2010.
- [73] L. Komendová, M. Milošević, A. Shanenko, and F. Peeters, "Different length scales for order parameters in two-gap superconductors: Extended ginzburg-landau theory," *Physical Review B*, vol. 84, no. 6, p. 064522, 2011.
- [74] V. Moshchalkov, M. Menghini, T. Nishio, Q. Chen, A. Silhanek, V. H. Dao, L. Chibotaru, N. Zhigadlo, and J. Karpinski, "Type-1.5 superconductivity," *Physical re*view letters, vol. 102, no. 11, p. 117001, 2009.
- [75] L. Y. Vinnikov, J. Karpinski, S. Kazakov, J. Jun, J. Anderegg, S. Bud'ko, and P. Canfield, "Vortex structure in mgb 2 single crystals observed by the bitter decoration technique," *Physical Review B*, vol. 67, no. 9, p. 092512, 2003.
- [76] E. Babaev and M. Speight, "Semi-meissner state and neither type-i nor type-ii superconductivity in multicomponent superconductors," *Physical Review B*, vol. 72, no. 18, p. 180502, 2005.
- [77] E. Babaev and M. Silaev, "Comment on "ginzburg-landau theory of two-band superconductors: Absence of type-1.5 superconductivity"," *Physical Review B*, vol. 86, no. 1, p. 016501, 2012.
- [78] S.-Z. Lin and X. Hu, "Vortex states and the phase diagram of a multiple-component ginzburg-landau theory with competing repulsive and attractive vortex interactions," *Physical Review B*, vol. 84, no. 21, p. 214505, 2011.
- [79] T. Nishio, V. H. Dao, Q. Chen, L. F. Chibotaru, K. Kadowaki, and V. V. Moshchalkov, "Scanning squid microscopy of vortex clusters in multiband superconductors," *Physical review B*, vol. 81, no. 2, p. 020506, 2010.
- [80] Y. Harada, K. Kobayashi, M. Yoshizawa, and Y. Grigorashvili, "Mgb2 squid for magnetocardiography," *Superconductors—Properties, Technology, and Applications*, 2012.

- [81] D. Cunnane, E. Galan, K. Chen, and X. Xi, "Planar-type mgb2 squids utilizing a multilayer process," *Applied Physics Letters*, vol. 103, no. 21, p. 212603, 2013.
- [82] L. Lolli, T. Li, C. Portesi, E. Taralli, N. Acharya, K. Chen, M. Rajteri, D. Cox, E. Monticone, J. Gallop, et al., "Micro-squids based on mgb2 nano-bridges for nems readout," *Superconductor Science and Technology*, vol. 29, no. 10, p. 104008, 2016.
- [83] K.-P. Bohnen, R. Heid, and B. Renker, "Phonon dispersion and electron-phonon coupling in mgb 2 and alb 2," *Physical review letters*, vol. 86, no. 25, p. 5771, 2001.
- [84] R. Kremer, B. Gibson, and K. Ahn, "Heat capacity of mgb\_2: Evidence for moderately strong coupling behavior," arXiv preprint cond-mat/0102432, 2001.
- [85] H. Yang, J.-Y. Lin, H. Li, F. Hsu, C.-J. Liu, S.-C. Li, R.-C. Yu, and C.-Q. Jin, "Order parameter of mgb 2: a fully gapped superconductor," *Physical review letters*, vol. 87, no. 16, p. 167003, 2001.
- [86] P. C. Canfield, G. W. Crabtree, et al., "Magnesium diboride: better late than never," Phys. Today, vol. 56, no. 3, pp. 34–40, 2003.
- [87] R. Wördenweber, Superconductors at the Nanoscale: From Basic Research to Applications. de Gruyter, 2017.
- [88] L. Landau, "Em lifshitz in statistical physics, ed. em lifshitz and lp pitaevskii," 1980.
- [89] A. Schmid, "A time dependent ginzburg-landau equation and its application to the problem of resistivity in the mixed state," *Physik der kondensierten Materie*, vol. 5, no. 4, pp. 302–317, 1966.
- [90] E. Abrahams and T. Tsuneto, "Time variation of the ginzburg-landau order parameter," *Physical Review*, vol. 152, no. 1, p. 416, 1966.
- [91] N. B. Kopnin, "Introduction to ginzburg-landau and gross-pitaevskii theories for superconductors and superfluids," *Journal of low temperature physics*, vol. 129, no. 5-6, pp. 219–262, 2002.
- [92] L. Kramer and R. Watts-Tobin, "Theory of dissipative current-carrying states in superconducting filaments," *Physical Review Letters*, vol. 40, no. 15, p. 1041, 1978.

- [93] R. Watts-Tobin, Y. Krähenbühl, and L. Kramer, "Nonequilibrium theory of dirty, current-carrying superconductors: Phase-slip oscillators in narrow filaments near t/sub c," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 42, no. 5, pp. 459–501, 1981.
- [94] G. C. Buscaglia, C. Bolech, and A. López, "On the numerical solution of the timedependent ginzburg-landau equations in multiply connected domains," in *Connectivity and Superconductivity*, pp. 200–214, Springer, 2000.
- [95] W. D. Gropp, H. G. Kaper, G. K. Leaf, D. M. Levine, M. Palumbo, and V. M. Vinokur, "Numerical simulation of vortex dynamics in type-ii superconductors," *Journal of Computational Physics*, vol. 123, no. 2, pp. 254–266, 1996.
- [96] C. A. A. Téllez, Q. da Silva Martins, and J. J. B. Ortega, "Desarrollo analítico de las ecuaciones ginzburg-landau para películas delgadas superconductoras en presencia de corrientes," *Revista UIS Ingenierías*, vol. 18, no. 2, pp. 213–220, 2019.
- [97] J. B. Ortega, "Configuração de vórtices e efeitos de interface em supercondutores mesoscópicos," Tese de doutorado, UFPE, 2007.
- [98] S. Gillis, J. Jäykkä, and M. V. Milošević, "Vortex states in mesoscopic three-band superconductors," *Physical Review B*, vol. 89, no. 2, p. 024512, 2014.
- [99] J. Bekaert, S. Vercauteren, A. Aperis, L. Komendova, R. Prozorov, B. Partoens, and M. Milošević, "Anisotropic type-i superconductivity and anomalous superfluid density in osb 2," *Physical Review B*, vol. 94, no. 14, p. 144506, 2016.
- [100] E. Babaev, J. Carlström, M. Silaev, and J. Speight, "Type-1.5 superconductivity in multicomponent systems," *Physica C: Superconductivity and its Applications*, vol. 533, pp. 20–35, 2017.
- [101] B. V. Svistunov, E. S. Babaev, and N. V. Prokof'ev, Superfluid states of matter. Crc Press, 2015.
- [102] M. Milošević and R. Geurts, "The ginzburg–landau theory in application," *Physica C: Superconductivity*, vol. 470, no. 19, pp. 791–795, 2010.
- [103] A. D. Hernández and D. Dominguez, "Surface barrier in mesoscopic type-i and typeii superconductors," *Physical Review B*, vol. 65, no. 14, p. 144529, 2002.

- [104] C. A. Aguirre, M. R. Joya, and J. J. Barba-Ortega, "Dados como centro de anclaje topológico en una muestra superconductora," *Revista UIS Ingenierías*, vol. 19, no. 1, pp. 109–116, 2020.
- [105] G. Berdiyorov, S. Yu, Z. Xiao, F. Peeters, J. Hua, A. Imre, and W. Kwok, "Effect of sample geometry on the phase boundary of a mesoscopic superconducting loop," *Physical Review B*, vol. 80, no. 6, p. 064511, 2009.
- [106] A. Gubin, K. Il'in, S. Vitusevich, M. Siegel, and N. Klein, "Dependence of magnetic penetration depth on the thickness of superconducting nb thin films," *Physical Review B*, vol. 72, no. 6, p. 064503, 2005.
- [107] G. Berdiyorov, B. Baelus, M. Milošević, and F. Peeters, "Stability and transition between vortex configurations in square mesoscopic samples with antidots," *Physical Review B*, vol. 68, no. 17, p. 174521, 2003.
- [108] J. Berger and J. Rubinstein, Connectivity and superconductivity, vol. 62. Springer Science & Business Media, 2001.
- [109] C. Aguirre, H. Achic, and J. Barba-Ortega, "Inhomogeneous ginzburg-landau parameter in a 2d mesoscopic superconductor," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 195, no. 1-2, pp. 124–137, 2019.
- [110] C. Aguirre, M. R. Joya, and J. Barba-Ortega, "Effect of anti-dots on the magnetic susceptibility in a superconducting long prism," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 186, no. 3-4, pp. 250–258, 2017.
- [111] A. Silhanek, M. Milošević, R. Kramer, G. Berdiyorov, J. Van de Vondel, R. Luccas, T. Puig, F. Peeters, and V. Moshchalkov, "Formation of stripelike flux patterns obtained by freezing kinematic vortices in a superconducting pb film," *Physical review letters*, vol. 104, no. 1, p. 017001, 2010.
- [112] L. N. Bulaevskii, M. J. Graf, and V. G. Kogan, "Vortex-assisted photon counts and their magnetic field dependence in single-photon superconducting detectors," *Physical Review B*, vol. 85, no. 1, p. 014505, 2012.
- [113] B. Baelus and F. Peeters, "Dependence of the vortex configuration on the geometry of mesoscopic flat samples," *Physical Review B*, vol. 65, no. 10, p. 104515, 2002.

- [114] J. Barba-Ortega, E. Sardella, and J. A. Aguiar, "Superconducting properties of a parallelepiped mesoscopic superconductor: A comparative study between the 2d and 3d ginzburg–landau models," *Physics Letters A*, vol. 379, no. 7, pp. 732–737, 2015.
- [115] F. Rogeri, R. Zadorosny, P. N. Lisboa-Filho, E. Sardella, and W. Ortiz, "Magnetic field profile of a mesoscopic squid-shaped superconducting film," *Superconductor Science and Technology*, vol. 26, no. 7, p. 075005, 2013.