



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

## DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

FASES DE VÓRTICES E ANTIVÓRTICES EM FILMES

SUPERCONDUTORES COM NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS

por

**Miguel Alejandro Zorro Millán**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação  
em Física do Departamento de Física da Universidade  
Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para  
obtenção do título de Mestre em Física

**Banca Examinadora:**

Prof. Clécio Clemente de Souza Silva (Orientador-UFPE)

Prof. José Albino Oliveira de Aguiar (DF-UFPE)

Prof. Edson Sardella (DF-UNESP-Bauru)

Recife- PE, Brasil

Julho - 2008

Millán, Miguel Alejandro Zorro

Fases de vórtices e antivórtices em filmes supercondutores com nanoestruturas magnéticas / Miguel Alejandro Zorro Millán – Recife : O autor, 2008.

x, 99.f. : fig. tab.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2008.

Inclui bibliografia.

1. Física do estado sólido 2. Supercondutividade. I. Título.

530.41

CDD (22.ed.)

FQ2008-027



Universidade Federal de Pernambuco  
Departamento de Física – CCEN  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil  
Fone (+ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (+ 55 81) 3271-0359  
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: [posgrad@df.ufpe.br](mailto:posgrad@df.ufpe.br)

---

## Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

---

**Miguel Alejandro Zorro Millán**

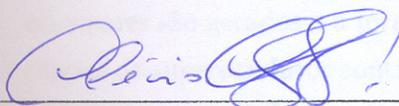
### FASES DE VÓRTICES EM FILMES SUPERCONDUTORES COM NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS

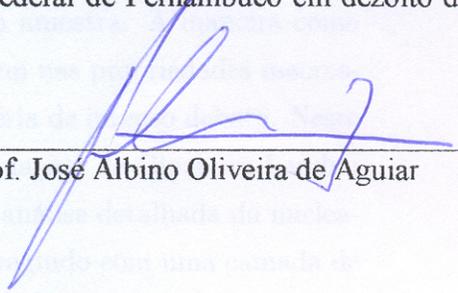
A Banca Examinadora composta pelos Professores Clécio Clemente Souza Silva (Presidente e Orientador), José Albino Oliveira de Aguiar, ambos da Universidade Federal de Pernambuco e Edson Sardella, do Departamento de Física da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Faculdade de Ciências de Bauru, Departamento de Física, consideram o candidato:

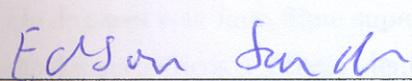
Aprovado

Reprovado

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em dezoito de julho de 2008.

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Clécio Clemente Souza Silva  
Presidente e Orientador

  
\_\_\_\_\_  
Prof. José Albino Oliveira de Aguiar

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Edson Sardella

---

## Resumo

---

Na última década tem sido mostrado que híbridos supercondutor-ferromagnéticos podem usar o ferromagnetismo para melhorar algumas propriedades dos supercondutores. Um exemplo bem-sucedido é uma bicamada formada por um filme supercondutor e um filme magnético nanoestruturado. Esse sistema se apresenta como uma maneira eficiente e altamente controlável de aprisionar e/ou manipular o movimento dos vórtices. Além disso, pode apresentar geração espontânea de pares vórtice-antivórtice (v-av), com conseqüências profundas sobre as características da amostra. A maneira como estes pares são gerados e a forma com que influem nas propriedades macroscópicas do supercondutor continuam sendo matéria de intenso debate. Neste trabalho, foram resolvidas numericamente as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo (TDGL) para fazer uma análise detalhada da nucleação de pares v-av num filme supercondutor interagindo com uma camada de dipolos magnéticos pontuais idênticos, localizados acima da superfície supercondutora e polarizados perpendicularmente ao filme. A simulação utiliza o método de variáveis de ligação com invariância de calibre adaptado para o algoritmo de diferenças finitas e foi utilizada para calcular a densidade de pares de Cooper assim como a vorticidade e a energia livre do sistema. Esse estudo é realizado em função da temperatura, a intensidade do momento magné-

tico  $m$  e parâmetros geométricos da rede de dipolos. Observamos transições abruptas no número de pares v-av estabilizados por cada dipolo em função de  $m$ , assim como transições na maneira como os antivórtices se arranjam em torno dos vórtices. Em geral, quando a distância  $d$  entre as camadas supercondutora e de dipolos é maior ou da ordem do comprimento de coerência do supercondutor  $\xi$ , observa-se que os antivórtices se arranjam em torno das posições intersticiais da rede de dipolos. A esta fase denominamos *deslocalizada*, pois os antivórtices encontram-se “desligados” dos vórtices. Para  $d \lesssim \xi$ , os antivórtices posicionam-se nas proximidades dos dipolos magnéticos, fase que chamamos *localizada* (os antivórtices estão agora “ligados” aos vórtices). Apresentamos um diagrama de fases que resume as várias configurações de vórtices e antivórtices encontradas e propomos um experimento baseado em técnicas usuais de medidas de transporte o qual poderia ser utilizado para identificar estas fases.

**Palavras Chaves:** Supercondutividade, vórtices e antivórtices, nanomagnetos, Ginzburg-Landau, Variáveis de Ligação.

---

## Abstract

---

It has been systematically shown, in the past decade, that artificially created superconductor-ferromagnet hybrids are able to use ferromagnetism to enhance some superconducting properties. One of the most successful examples is the superconducting-film/magnetic-dot-array bilayer, which offer highly controllable and efficient pinning of vortices. However, these structures are sometimes able to spontaneously generate vortex-antivortex pairs, with profound consequences on the sample characteristics. How these pairs are generated and how they interfere on the macroscopic properties of these hybrid systems are still a matter of debate. In the present work, we solve numerically the time-dependent Ginzburg-Landau equations to analyze in detail how vortex-antivortex pairs nucleate in a superconducting film interacting with an identical magnetic dipoles layer, on top of the superconducting film, in the off-plane magnetic moment situation. The simulations follow the gauge invariant link-variable method adapted for a finite difference algorithm and was used to calculate the density of Cooper pairs, as well as vorticity and the system free energy. That study is carried out as a function of temperature, magnetic moment intensity  $m$  and geometric parameters of the dipoles array. We see abrupt transitions in the number of v-av pairs stabilized by each dipole according to  $m$ , and transitions in the way that

antivortex are positioned around the vortex. In general, when the distance  $d$  between the superconductor layer and the dipoles array is greater or the order of the superconducting coherence length  $\xi$ , it is observed that the anti-vortex are positioned around the interstitial positions of the dipoles array. At this phase we named “delocalized” because the antivortex are “disconnected” from vortex. For  $d \lesssim \xi$ , the antivortex positioned itself near to the magnetic dipolos, phase we named “localized”(the antivortex are now "connected"to the vortex). We presented a phase diagram which summarizes the various vortex and antivortex configurations found and propose an experiment based on usual techniques of transport measures which could be used to identify these phases.

**Keywords:** Superconductivity, vortex and antivortex, nanomagnets, Ginzburg-Landau, Link Variable.

---

## Sumário

---

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Introdução à supercondutividade</b>	<b>7</b>
2.1	O fenômeno da supercondutividade . . . . .	7
2.2	Teorias fenomenológicas da supercondutividade . . . . .	12
2.2.1	Modelo de London . . . . .	12
2.2.2	Teoria de Ginzburg-Landau . . . . .	15
2.2.3	Comprimentos característicos . . . . .	20
2.2.4	Validade da teoria de Ginzburg-Landau . . . . .	24
2.3	Comportamento de supercondutores em campos aplicados. . .	25
2.3.1	Supercondutores do tipo-I e do tipo-II . . . . .	26
2.4	Vórtices em supercondutores macroscópicos . . . . .	29
2.4.1	Quantização de fluxóide . . . . .	30
2.4.2	Estrutura de um vórtice. . . . .	31
2.5	Supercondutividade mesoscópica . . . . .	34
2.5.1	Estados de vórtices, multi e gigante. . . . .	35
<b>3</b>	<b>Método de variáveis de ligação para as equações TDGL</b>	<b>38</b>
3.1	Equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo . . . . .	39

---

3.2	Método de variáveis de ligação . . . . .	41
3.2.1	Descrição do método para as equações TDGL . . . . .	43
3.2.2	Discretização das equações TDGL . . . . .	45
3.2.3	Discretização da energia livre . . . . .	50
3.2.4	Condição de contorno periódica . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Filme supercondutor interagindo com dipolos magnéticos</b>	<b>57</b>
4.1	Introdução . . . . .	58
4.2	Dipolos magnéticos pontuais . . . . .	60
4.2.1	Potencial vetor de um dipolo magnético isolado . . . . .	61
4.2.2	Potencial vetor devido a uma rede de dipolos . . . . .	64
4.3	Detalhes das simulações . . . . .	65
4.4	Resultados . . . . .	67
4.4.1	Criação e ancoragem de pares vórtice-antivórtice em supercondutores híbridos. . . . .	67
4.4.2	Nucleação de pares V-AV dependente da distância . . . . .	73
4.5	Fases de anti-vórtices localizados e deslocalizados . . . . .	81
4.5.1	Diagrama de fases dos pares V-AV . . . . .	82
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>88</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>92</b>

---

## Lista de Figuras

---

2.1	Resistência de uma amostra de mercúrio em função da temperatura, marcando o descobrimento da <i>supercondutividade</i> . . .	7
2.2	Expansão das propriedades críticas dos materiais supercondutores. . . . .	8
2.3	Efeito Meissner numa esfera supercondutora. . . . .	9
2.4	Respresentação da atração entre elétrons na formação dos pares de Cooper . . . . .	11
2.5	Penetração de campo magnético num supercondutor. . . . .	14
2.6	Funções da energia livre de Ginzburg-Landau para (a) $T > T_c$ ( $\alpha > 0$ ) e para (b) $T < T_c$ ( $\alpha < 0$ ). . . . .	17
2.7	Distribuição espacial do parâmetro de ordem $\psi$ e o campo magnético $H$ numa superfície limite supercondutor-normal. . .	21
2.8	Comparação entre o comportamento da penetração de fluxo em supecondutores tipo I e tipo II. . . . .	26
2.9	Dependência das características de um supercondutor semi-infinito em função do parâmetro de ordem. . . . .	27
2.10	Diagrama de fase $H - T$ para supercondutores tipo I e tipo-II. . . . .	28

---

2.11	A magnetização em função do campo magnético aplicado para supercondutores tipo-I e tipo-II. . . . .	29
2.12	Campo magnético $B(x)$ e parâmetro de ordem $\Psi(x)$ de uma linha de fluxo. . . . .	32
2.13	Rede Triangular de linhas de fluxo. . . . .	32
2.14	Estado de multi-vórtices em amostra mesoscópica. . . . .	35
2.15	Estado de vórtice gigante em amostra quadrada mesoscópica. . . . .	36
3.1	Esquema do método de variáveis de ligação. . . . .	43
4.1	Moléculas de vórtices e antivórtices devidas à presença de um disco ferromagnético. A cor vermelha corresponde a $ \psi ^2 = 1$ e a cor azul corresponde a $ \psi ^2 = 0$ . . . . .	59
4.2	Representação de uma amostra híbrida de um filme supercondutor e uma rede de micromagnetos. . . . .	61
4.3	Dipolo magnético a uma distancia $d$ de uma superfície no plano $xy$ . . . . .	62
4.4	(a)Componente $A_x$ do potencial vetor.(b) Componente $A_y$ do potencial vetor. . . . .	63
4.5	Campo magnético no plano $xy$ devido ao dipolo magnético. . . . .	63
4.6	Rede de dipolos magnéticos acima de uma superfície supercondutora. . . . .	64
4.7	Simulações do potencial vetor e campo magnético para $d = 1\xi(0)$ e $d = 10\xi(0)$ . . . . .	65
4.8	(a) Número de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) em função do momento magnético,(b) Energia livre em função do momento magnético, para uma amostra de $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ para $T = 0.9T_c$ . . . . .	67
4.9	Módulo do parâmetro de ordem para uma célula unitária de lados $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , $T = 0.9T_c$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados. . . . .	68

---

4.10	Logaritmo do parâmetro de ordem e mudança de fase para uma célula unitária de lados $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , $T = 0.9T_c$ e $d = 6\xi(0)$ . . . . .	70
4.11	(a) Número de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) em função do momento magnético,(b) Energia livre em função do momento magnético, para uma amostra de $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ para $T = 0.9T_c$ e $d = 4\xi(0)$ . . . . .	71
4.12	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma amostra de $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 4\xi(0)$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados. . . . .	72
4.13	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma amostra de $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 4\xi(0)$ , para o estado não convencional $N = 4$ . . . . .	72
4.14	Ampliação do estado $N = 4$ da amostra de lados $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 4\xi(0)$ . . . . .	73
4.15	Número de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) em função do momento magnético para uma amostra de $128\xi(0) \times 128\xi(0)$ para $T = 0.88T_c$ e $d = 12\xi(0)$ . . . . .	74
4.16	Módulo do parâmetro de ordem para uma célula unitária de lados $128\xi(0) \times 128\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 12\xi(0)$ para diferentes momentos magnéticos aplicados. . . . .	75
4.17	Região de análise para o estudo da nucleação de pares V-AV dependente da distância. . . . .	75
4.18	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma célula de lados $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 12\xi(0)$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados. . . . .	76
4.19	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma célula de lados $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ e $d = 12\xi(0)$ , para $N = 4$ e $N = 5$ . . . . .	78

---

4.20	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma célula de lados $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ , para $d = 4\xi(0)$ . . . . .	79
4.21	Módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma célula de lados $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ , para $d = 2\xi(0)$ . . . . .	80
4.22	Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem e mudança na fase para uma célula de lados $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ , $T = 0.88T_c$ , para $d = 2\xi(0)$ . . . . .	80
4.23	<i>Acima.</i> Fase <i>deslocalizada</i> dos pares de V-AV. <i>Embaixo</i> Fase <i>localizada</i> dos pares de V-AV. . . . .	81
4.24	Diagrama de Fases para os pares de V-AV numa amostra de $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ com uma rede $4 \times 4$ de dipolos magnéticos pontuais. . . . .	83
4.25	Configurações de pares V-AV para $d = 3\xi(0)$ na amostra estudada para: (a) $m = 4.2$ e (b) $m = 6.6$ . . . . .	84
4.26	Configurações de pares de V-AV para os estados de transição em: (a) $d = 1.8\xi(0)$ e $m = 2.2$ ; (b) $d = 2.4\xi(0)$ e $m = 5.6$ ; . . . . .	85
4.27	Configurações de pares de V-AV para os estados localizados em: (a) $d = 1.6\xi(0)$ e $m = 1.9$ ; (b) $d = 2.2\xi(0)$ e $m = 5$ ; . . . . .	85
4.28	Configurações de pares de V-AV para os estados localizados $N = 4$ em: (a) $d = 1.9\xi(0)$ e $m = 5.8$ ; (b) $d = 1.6\xi(0)$ e $m = 5.1$ ; . . . . .	86

# CAPÍTULO 1

---

## Introdução

---

Quando uma corrente elétrica percorre um condutor, este irradia calor em decorrência do efeito Joule. Essa irradiação representa uma perda considerável de energia. Até a primeira década do século XX, não havia qualquer expectativa para se mudar esse panorama; a resistência elétrica era algo inerente aos condutores. Porém, em 1911, o físico holandês Heike Kamerlingh Onnes (1853-1926) após de ter desenvolvido a tecnologia para a liquefação do hélio, descobriu que alguns metais apresentavam resistência nula em temperaturas inferiores a 4.2 K, exatamente a temperatura em que o hélio passa do estado gasoso para o líquido [1]. Ele deu o nome de “*supercondutividade*” ao estranho fenômeno. A partir de então, o termo *supercondutores* vem sendo usado para denotar todos os materiais que, abaixo de uma certa temperatura crítica,  $T_c$ , perdem a resistência à passagem de corrente elétrica, além de apresentar outras propriedades. Ao baixar a temperatura os materiais supercondutores experimentam uma transição de fase, passando de seu estado normal ao estado supercondutor, estado este muito sensível aos parâmetros dos quais depende: a temperatura, o campo magnético e a corrente elétrica.

Em 1933, os físicos alemães Walther Meissner e Robert Ochsenfeld descobriram o fenômeno hoje conhecido como efeito Meissner. Eles mostraram que um material no estado supercondutor é capaz de repelir um campo magnético. Dito de outra forma, um supercondutor é um diamagnético perfeito. Depois da descoberta de Meissner, observou-se que a maioria dos supercondutores com temperatura crítica acima de 10 K (ou - 263°C) não eram perfeitamente diamagnéticos. Nesses materiais, denominados *supercondutores do tipo II*, campos fracos podem ser totalmente repelidos, mas campos intensos podem penetrar no material, ainda que não completamente.

Em 1950 foi proposta a teoria de Ginzburg-Landau. Sendo ela intuitiva e de caráter fenomenológico, trazia uma visão útil das propriedades dos supercondutores ao tratá-lós a partir de uma função de onda complexa. Após desta, o estabelecimento da chamada teoria BCS<sup>1</sup>, em 1957, talvez tenha sido o fato mais importante na história da supercondutividade, depois da descoberta de Onnes e antes do advento das cerâmicas supercondutoras. O fenômeno essencial por trás dessa teoria é a formação de pares de elétrons durante o processo de condução elétrica. Embora a tendência de um elétron seja repelir um outro, para os supercondutores em temperaturas muito baixas a rede cristalina faz com que essas partículas formem pares, também conhecidos como *pares de Cooper*. A teoria BCS mostra que esses pares são os responsáveis pela supercondutividade.

O importante passo seguinte foi a descoberta das cerâmicas supercondutoras, em 1986, e se explica também pelo fato da temperatura crítica de alguns dos compostos observados ter ultrapassado a temperatura do nitrogênio líquido (77 K ou - 196°C). Atualmente se tem materiais com temperatura crítica na faixa dos 130 K (- 143°C). Com o advento dos supercondutores de alta temperatura crítica, sendo o nitrogênio um gás 10 vezes mais barato que o hélio e com uma liquefação 20 vezes mais econômica, muitas aplicações potenciais começaram a se tornar economicamente viáveis.

---

<sup>1</sup>Assim denominada pelos sobrenomes dos físicos que propuseram essa teoria: Bardeen, Cooper e Schrieffer.

---

A supercondutividade tornou-se um fenômeno muito interessante, devido em parte a suas possíveis aplicações. Entre as mais importantes temos a transmissão de energia com perdas muito baixas, assim como a fabricação de transportes massivos levitados, para os quais, sem fricção, torna-se possível atingir velocidades muito altas. Usando materiais supercondutores também é possível a produção de campos magnéticos intensos, com propósitos médicos, como a ressonância magnética; assim como a construção de potentes aceleradores de partículas e de sensores altamente sensíveis a campos magnéticos muito baixos (SQUID). Também é possível aplicá-los em outras áreas, como por exemplo a fabricação de supercomputadores de altíssima velocidade de processamento de baixo consumo energético.

Uma característica importante nos materiais supercondutores é o estado de *vórtices* que se apresenta nos supercondutores do *tipo II*. Em geral um vórtice é um escoamento giratório onde as linhas de “corrente” apresentam um padrão circular ou espiral. Ele surge devido a uma súbita diferença de pressão entre duas regiões vizinhas. Quando isso ocorre o fluido tende a equilibrar o sistema e flui de uma região para outra mudando, eventualmente, a direção original do escoamento e, com isso, gerando vorticidade. Podemos observá-los em escala macroscópica na natureza, tais como redemoinhos formados no mar, na pia doméstica, furacões, tornados e em galáxias distantes. Na supercondutividade, estes vórtices são redemoinhos quantizados de correntes supercondutoras e interagem entre si e com possíveis defeitos na amostra.

Uma forma de mudar o comportamento dos vórtices nas amostras supercondutoras é trabalhar com amostras de tamanho comparável ao tamanho característico dos vórtices. O confinamento de pares de Cooper e vórtices, causado pela redução do tamanho da amostra e a interação de supercondutores com outros materiais, tem dado origem a novos efeitos físicos e mostrado que é possível modificar fortemente os parâmetros supercondutores, o que torna interessante o estudo de amostras de tamanhos menores que os convencionais (amostras nanométricas), e da interação de amostras supercondutoras

com outros materiais. Com este tipo de amostra é possível ter armadilhas mesoscópicas de vórtices as quais permitem ter controle da densidade e/ou do movimento dos vórtices. Este controle de vórtices em escala mesoscópica pode alterar as propriedades macroscópicas de um supercondutor, como no caso de amostras com defeitos ou submersas em diferentes tipos de materiais [2, 3, 4] ou filmes nanoestruturados com redes periódicas de armadilhas [5, 6, 7, 8]. Por exemplo, mudando a forma das armadilhas é possível quebrar a simetria de inversão espacial para o movimento dos vórtices e induzir o chamado efeito catraca [9, 10, 11], efeito que corresponde à retificação do movimento de vórtices submetidos a uma força oscilante.

Outra forma de controlar os vórtices é através de amostras híbridas. Uma nanoestrutura híbrida interessante contém uma combinação de um supercondutor e um material ferromagnético. Este sistema tem mostrado diversos fenômenos físicos novos e interessantes e, mais importante, demonstrado que a supercondutividade e o ferromagnetismo podem co-existir numa escala micro e sub-micrométrica [12, 13, 14, 15]. Uma propriedade importante encontrada neste tipo de amostras é a ancoragem de vórtices em filmes supercondutores quando submetidos à presença de partículas magnéticas [16]. Neste sistema a energia de interação entre as partículas magnéticas e os vórtices irá depender da intensidade e da direção dos momentos magnéticos das partículas. Também tem sido mostrado que partículas magnéticas podem estabilizar pares de vortice-antivórtice, mesmo na ausência de campos externos [17, 18].

Uma forma de estudar o estado de vórtices nesse tipo de supercondutor são as simulações numéricas. Neste tipo de pesquisa, uma importante ferramenta é, a *teoria de Ginzburg-Landau dependente do tempo* (TDGL), onde se faz uma descrição espaço-temporal válida para supercondutores, encontrando que, se as variações do parâmetro de ordem são suaves, as equações desenvolvidas nessa teoria são válidas próximo à temperatura de transição e a  $T = 0$  [19]. Entre os métodos numéricos usados para resolver as equações TDGL, destaca-se o método de variáveis de ligação, baseado em métodos de

diferenças finitas [20].

### **Objetivos e organização da dissertação.**

O objetivo desta dissertação é estudar uma amostra supercondutora híbrida do tipo supercondutor/ferromagneto. A amostra é composta por uma superfície supercondutora interagindo com um arranjo de dipolos magnéticos pontuais acima desta, separados por uma certa distância. Os dipolos formam uma rede quadrada e o seu momento magnético está orientado *perpendicularmente* à superfície. A análise será feita de forma que se possa caracterizar o estado de vórtices presente neste tipo de amostras; estudando o número de vórtices produzidos pelo momento magnético dos dipolos, a densidade de elétrons supercondutores no sistema e a configuração que os vórtices formam na amostra.

O estudo é feito resolvendo numericamente as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo, utilizando o método de campos de calibre e a técnica de variáveis de ligação. O trabalho se apresenta da seguinte forma:

No **Capítulo 2** apresentamos um breve resumo histórico da supercondutividade, assim como as teorias desenvolvidas na tentativa de explicar este fenômeno e as propriedades do estado supercondutor. É feita uma revisão do comportamento de supercondutores na presença de campos magnéticos, apresentando o estado de vórtices e as características de um vórtice isolado. Apresentam-se generalidades a respeito da supercondutividade mesoscópica e a configuração de vórtices nesta escala.

No **Capítulo 3** são introduzidas as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo, assim como o método numérico utilizado para solucioná-las, discutindo as condições de contorno necessárias para este sistema, a discretização levada em conta no método e a invariância de calibre das equações discretizadas.

---

No **Capítulo 4** estuda-se a nucleação da supercondutividade na amostra supercondutora híbrida, com condições de contorno periódicas e variando principalmente o momento magnético da rede de dipolos que interage com o filme supercondutor. Simulando assim um filme supercondutor com a nucleação de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) devido ao momento de dipolo da nanoestrutura ferromagnética. É estudada a dependência da configuração dos pares de V-AV com a distância de separação do filme com a rede de dipolos. Apresenta-se um diagrama de fases descrevendo a dependência da posição dos antivórtices em torno dos vórtices com a distância de separação da rede de dipolos e a superfície supercondutora.

No **Capítulo 5** apresenta-se as conclusões, considerações finais e perspectivas do desenvolvimento desta pesquisa.

---

## Introdução à supercondutividade

---

### 2.1 O fenômeno da supercondutividade

No ano de 1911, Heike Kamerlingh Onnes da Universidade de Leiden na Holanda, conseguiu resfriar o mercúrio à temperatura do hélio líquido observando uma característica neste: a resistência elétrica do mercúrio desaparecia completamente numa certa temperatura (ver figura 2.1).

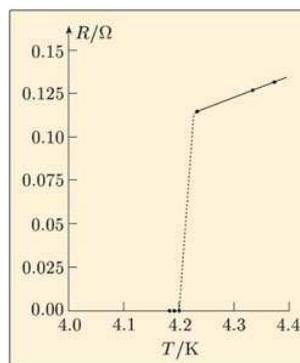


Figura 2.1: Resistência de uma amostra de mercúrio em função da temperatura, marcando o descobrimento da *supercondutividade*.

Para este novo fenômeno Onnes deu o nome de *Supercondutividade* [1], onde a perda da resistência dá origem a sua primeira característica, a *condutividade perfeita*. A temperatura na qual um material passa a ter propriedades supercondutoras é conhecida como *temperatura crítica* ( $T_c$ ), e é um dos parâmetros críticos deste fenômeno. Mais adiante se conheceria que o estado supercondutor fica limitado pela *temperatura crítica* ( $T_c$ ), pelo *campo magnético crítico* ( $H_c$ ), e por uma *densidade de corrente crítica* ( $J_c$ ), figura 2.2. Ou seja, ao se aplicar uma temperatura  $T < T_c(H, J)$ , ou um campo magnético  $H < H_c(T, J)$  ou uma densidade de corrente  $J < J_c(T, H)$ , o material entra no estado supercondutor. Nem todos os materiais são supercondutores e os valores de  $T_c$ ,  $H_c$  e  $J_c$  são próprios para cada um deles [21].

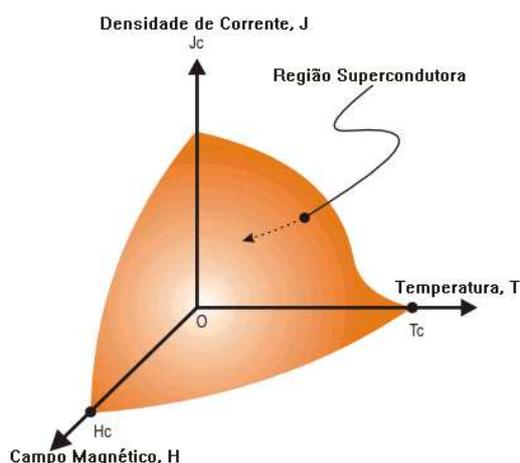


Figura 2.2: Expansão das propriedades críticas dos materiais supercondutores.

Em 1933, Walter Meissner e Robert Ochsenfeld descobriram que os materiais supercondutores, além de apresentar condutividade perfeita, têm a capacidade de repelir um campo magnético do seu interior, quando estiverem a temperaturas menores que  $T_c$ , atuando assim, como um material *diamagnético perfeito* [22].

Além de repelir o campo magnético, quando o material é resfriado a partir do estado normal ( $T > T_c$ ) na presença de um campo magnético, o material expulsa o campo do interior (figura 2.3). Tal fenômeno não pode se explicar

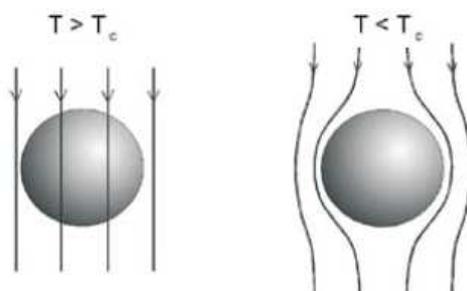


Figura 2.3: Efeito Meissner numa esfera supercondutora resfriada abaixo da temperatura crítica em um campo magnético constante. Embaixo da temperatura de transição as linhas de campo são expulsas da esfera.

a partir da condutividade perfeita, já que esta tenderia a manter o fluxo no interior do material. Assim, esta propriedade de repulsão e expulsão do fluxo magnético, independentemente da história magnética do material, é um efeito próprio do estado supercondutor. Este efeito foi chamado posteriormente de *Efeito Meissner* e é tão forte que pode fazer levitar um ímã colocado acima de um material supercondutor [21]. A existência de tal efeito dá à supercondutividade um outro parâmetro crítico, como citamos anteriormente: o campo magnético crítico ( $H_c$ ), acima do qual a supercondutividade é destruída.

Depois do descobrimento do efeito Meissner, os irmãos F. e H. London desenvolveram uma teoria fenomenológica para descrever a supercondutividade. Em 1935 eles propuseram um modelo simples de dois fluidos: o *modelo de London*. Este modelo explica o efeito Meissner e prediz o *comprimento de penetração*  $\lambda$ , que é um comprimento característico de penetração do fluxo magnético num supercondutor. Assim, eles mostraram que o campo magnético decai exponencialmente desde a superfície do supercondutor à distância  $\lambda$  [23]. Mesmo sem explicar microscopicamente os mecanismos da supercondutividade, esta foi a primeira teoria que previu o comportamento do campo magnético e das correntes dentro do supercondutor.

Em 1950 Vitaly Ginzburg e Lev Landau propuseram uma teoria intuitiva e fenomenológica da supercondutividade que é chamada, freqüentemente, de teoria macroscópica. Essa teoria foi surpreendentemente exitosa e permite uma visão detalhada das propriedades dos materiais supercondutores nas proximidades da linha de transição  $T_c(H)$  [24]. Utilizando um parâmetro de ordem supercondutor  $\psi(\vec{r})$  e um potencial vetor  $\vec{A}(\vec{r})$ , eles conseguiram prever a existência do comprimento de penetração  $\lambda$ , e do comprimento de coerência  $\xi$ , este último, relacionado à variação espacial de  $\psi(\vec{r})$ . Essa teoria também descrevia a existência de dois tipos de supercondutores, a partir do *parâmetro de Ginzburg-Landau*,  $\kappa = \lambda/\xi$ : tipo I ( $\kappa < 1/\sqrt{2}$ ) e tipo II ( $\kappa > 1/\sqrt{2}$ ), demonstrando que para  $\kappa \rightarrow \infty$  pode se obter a teoria de London.

Em 1957, Alexei Abrikosov estudou o comportamento dos supercondutores num campo magnético e descreveu o comportamento dos supercondutores do tipo I e do tipo II. Enquanto os supercondutores do tipo I repelem o fluxo magnético completamente do seu interior, os supercondutores do tipo II fazem isto, completamente, apenas para campos magnéticos pequenos. Para campos maiores, o fluxo magnético é expulso parcialmente, dando origem ao conhecido “estado misto”. Nesse estado a presença do fluxo magnético se dá na forma de *vórtices*. Esses vórtices são pacotes de fluxo magnético quantizados atravessando a amostra, os quais, num supercondutor homogêneo, se distribuem na forma de uma rede triangular [25].

A teoria microscópica que viria a explicar, satisfatoriamente, a supercondutividade a baixas temperaturas, presente nos supercondutores clássicos, apareceu somente em 1957, graças ao trabalho de John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer. Eles propuseram uma teoria microscópica completa da supercondutividade, usualmente chamada de *Teoria BCS* [26]. Essa teoria é baseada na interação de um gás de elétrons com ondas elásticas da rede cristalina. Normalmente, os elétrons se repelem pela força de Coulomb, mas no caso especial de um supercondutor à temperatura suficientemente baixa existe uma atração entre dois elétrons, mediada pelas interações com oscila-

ções da rede cristalina. Na figura 2.4, representa-se como um elétron deforma a rede cristalina. Assim, um segundo elétron é atraído pela deformação da rede. Essa atração indireta faz com que os elétrons formem um par ligado, os chamados *pares de Cooper*, os quais são constituídos de um par de elétrons de spin e momento opostos.

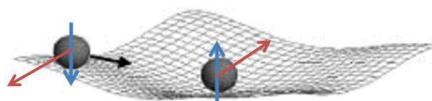


Figura 2.4: Representação da atração entre elétrons na formação dos pares de Cooper [27].

Os elétrons, assim como todas as partículas com spin fracionário, são férmions e obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, o qual proíbe que duas partículas ocupem o mesmo estado quântico. No entanto, os pares de Cooper se comportam de maneira muito diferente dos elétrons isolados. Eles atuam como bósons, partículas de spin inteiro, podendo se condensar em um mesmo nível de energia. Todos os pares de elétrons se movem num movimento simples coerente. Assim, uma perturbação local, como uma impureza, não consegue espalhar um par individual. Quando este estado coletivo e altamente coordenado de “super-elétrons” coerentes entra em movimento, o fluxo deles se apresenta sem nenhuma dissipação.

Mesmo tendo muito sucesso na explicação da supercondutividade a baixas temperaturas, a teoria BCS não explica, satisfatoriamente, o fenômeno a altas temperaturas. Em 1985, George Bednorz e Alex Müller anunciaram a descoberta da supercondutividade em amostras cerâmicas, materiais geralmente isolantes, com uma temperatura crítica em torno de  $30K$  [28]. Esses materiais têm uma estrutura cristalina de camadas dominadas por planos de óxidos de cobre, fato que serviu como base para a descoberta da maioria dos materiais sintetizados hoje em dia com  $T_c$  acima de  $40K$ , como

o  $YBa_2Cu_3O_7$ , simbolizado por  $YBCO$ , que superconduz a 93 K, isto é, a temperaturas superiores à temperatura do nitrogênio líquido (77K)[29]. Embora a supercondutividade seja um fenômeno de baixas temperaturas, esses materiais são usados em várias aplicações, a maioria delas se vale da resistividade nula, que em alguns aparelhos elétricos é sinônimo de eficiência máxima, como é o caso dos geradores de eletricidade e dos cabos de transmissão, que não têm perda de energia elétrica por calor. Outras aplicações se valem dos altos campos magnéticos que podem ser obtidos eficientemente com magnetos supercondutores, como nos aparelhos de ressonância magnética para estudos médicos ou nos trens flutuantes (Maglev) que conseguem atingir altas velocidades.

## 2.2 Teorias fenomenológicas da supercondutividade

### 2.2.1 Modelo de London

Após o descobrimento da supercondutividade, surgiram algumas tentativas para explicar esse fenômeno. A primeira teoria que surge para descrever a supercondutividade foi proposta em 1935 pelos irmãos London. A teoria começa escrevendo a segunda lei de Newton na forma:

$$m^* \frac{d\vec{v}_s}{dt} = -e^* \vec{E} = \vec{F}, \quad (2.1)$$

onde  $m^*$  e  $e^*$  são a massa e a carga elétrica dos portadores de carga na supercorrente,  $\vec{v}_s$  a velocidade da supercorrente, e  $\vec{E}$  o campo elétrico aplicado. A densidade de corrente é dada por:

$$\vec{J}_s = -e^* \vec{v}_s n_s, \quad (2.2)$$

onde  $n_s$  é a densidade de portadores de carga no material superconductor. Derivando a equação (2.2) no tempo chegamos à forma:

$$\frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = -e^* n_s \frac{d\vec{v}_s}{dt}. \quad (2.3)$$

Substituindo a equação (2.3) em (2.1) obtemos:

$$\frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = \frac{n_s (e^*)^2}{m^*} \vec{E}, \quad (2.4)$$

Agora, usando a lei de Faraday,

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.5)$$

e substituindo a equação (2.4) obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \times \vec{J}_s + \frac{(e^*)^2 n_s}{m^* c} \vec{H} \right) = 0. \quad (2.6)$$

A equação (2.6) é válida para qualquer  $\vec{J}_s$  e  $\vec{H}$  temporalmente constantes. No entanto, isso não garante a expulsão do fluxo magnético quando o material passa do estado normal ao estado supercondutor (efeito Meissner). Assim, restringe-se as soluções da equação (2.6) de modo a satisfazer:

$$\nabla \times \vec{J}_s + \frac{(e^*)^2 n_s}{m^* c} \vec{H} = 0. \quad (2.7)$$

Com o tratamento anterior, as duas equações obtidas do modelo de London são:

$$\vec{E} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{m^*}{n_s (e^*)^2} \vec{J}_s \right), \quad (2.8)$$

e

$$\nabla \times \vec{J}_s = - \frac{(e^*)^2 n_s}{m^* c} \vec{H}. \quad (2.9)$$

A primeira descreve a condutividade perfeita, pois o menor campo elétrico é capaz de acelerar os superelétrons, enquanto a segunda descreve o caráter diamagnético perfeito de um supercondutor, já que uma densidade de supercorrentes induzidas na superfície não permitiria a penetração do campo magnético externo, e qualquer fluxo magnético inicialmente no interior será expulso quando a amostra entrar no estado supercondutor.

Utilizando a equação de Maxwell concernente à lei de Ampère,  $\nabla \times \vec{H} = 4\pi \vec{J}_s / c$ , a equação (2.9) resulta em:

$$\nabla^2 \vec{H} = \frac{4\pi (e^*)^2 n_s}{m^* c^2} \vec{H},$$

que pode se escrever na forma:

$$\nabla^2 \vec{H} = \frac{1}{\lambda_l^2} \vec{H}. \quad (2.10)$$

Esta é a forma mais conhecida da equação de London, onde

$$\lambda_l^2 = \frac{m^* c^2}{8\pi (e^*)^2 n_s}, \quad (2.11)$$

sendo  $\lambda_l$  o *comprimento de penetração de London*, que é o comprimento característico no qual um campo magnético pode penetrar num cristal supercondutor. A equação (2.10) tem uma solução unidimensional para um supercondutor semi-infinito imerso num campo magnético paralelo à interface supercondutor-vácuo ( $x = 0$ ):

$$H = H_0 e^{-\frac{x}{\lambda_l}}, \quad (2.12)$$

pelo qual o campo magnético tem um decaimento exponencial com um comprimento característico  $\lambda_l$  de penetração (figura 2.5). Empiricamente este comprimento de penetração tem a seguinte dependência com a temperatura:

$$\lambda(T) = \lambda(0) \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^4 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (2.13)$$

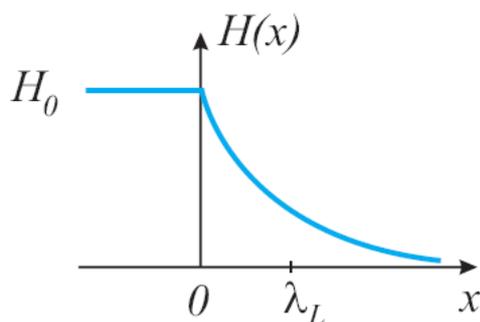


Figura 2.5: Penetração de campo magnético num supercondutor. O campo decresce a partir da superfície se tornando muito pequeno numa pequena profundidade  $\lambda_l$ .

A teoria de London explica o diamagnetismo perfeito e a perda de resistividade abaixo de  $T_c$ , os dois fenômenos fundamentais da supercondutividade, tornando-se uma teoria útil para descrever o comportamento dos supercondutores assim como o estado de vórtices. Porém, nesta teoria não é considerado o tamanho físico dos vórtices nem sua estrutura, e o estado supercondutor é descrito como um estado com uma densidade de elétrons supercondutores uniforme em toda a amostra, e com os vórtices separados consideravelmente. Assim, ela é utilizada nos casos que se tem o campo magnético muito menor que o campo crítico  $H_{c2}$  da amostra. Portanto, a teoria de London não é adequada para descrever casos mais gerais, como aqueles onde é preciso conhecer a estrutura interna dos vórtices.

### 2.2.2 Teoria de Ginzburg-Landau

A teoria de Ginzburg-Landau (GL) é de caráter fenomenológico e é baseada na teoria de Landau para as transições de fase de segunda ordem. Os portadores de carga são tratados como um fluido quântico descrito por uma função de onda macroscópica,  $\psi(\vec{r})$ , que representa o parâmetro de ordem (complexo) supercondutor. Esse parâmetro de ordem pode ser escrito como  $\psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|e^{i\varphi(\vec{r})}$ , tal que  $|\psi(\vec{r})|^2$  representa a densidade de pares de Cooper,  $n_s(\vec{r})$ .  $\psi(\vec{r})$  tem um valor nulo em  $T > T_c$  (estado normal), e diferente de zero para  $T < T_c$ . Segundo essa teoria, a energia livre pode se expandir em potências do parâmetro de ordem, perto da transição *supercondutor-normal* na temperatura  $T_c(H)$ , onde o parâmetro de ordem é pequeno. Assumindo isto a teoria GL, em princípio, é válida só na região perto de  $T_c$ . No entanto, esta teoria produz resultados satisfatórios mesmo para  $T \ll T_c$ .

#### Funcional GL para a Energia livre

A teoria começa considerando um supercondutor uniforme na ausência de um campo magnético, e supondo que  $\psi$  é independente da posição. De acordo com a teoria das transições de fase de segunda ordem de Landau, pode-se fazer uma expansão da energia livre em termos de um parâmetro arbitrário

$\Delta^1$  [30]. Então, temos para  $T$  suficientemente próximo de  $T_c$  [31]:

$$F = F_n + A(T)|\Delta|^2 + \frac{B(T)}{2}|\Delta|^4 + \dots \quad (2.14)$$

Onde  $F_n$  é a energia do estado normal, e os dois termos seguintes correspondem à expansão da diferença de energia entre os estados supercondutor e normal em potências de  $|\Delta|$ , onde  $A(T)$  e  $B(T)$  são coeficientes de expansão fenomenológicos característicos do material<sup>2</sup>. Na expansão (2.14) temos que levar em conta as variações de  $\Delta$  no cristal, em ausência de campo, pelo qual se inclui mais um termo:

$$F = F_n + A(T)|\Delta|^2 + \frac{B(T)}{2}|\Delta|^4 + C \left[ \left| \frac{\partial \Delta}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial \Delta}{\partial y} \right|^2 + \left| \frac{\partial \Delta}{\partial z} \right|^2 \right]. \quad (2.15)$$

Na presença de campos magnéticos, deve-se reescrever o termo de variações de  $\Delta$  de modo a satisfazer a invariância de calibre da energia livre e incluir um último termo correspondente à energia do campo magnético no vácuo:

$$F = F_n + A(T)|\Delta|^2 + \frac{B(T)}{2}|\Delta|^4 + C \left| \left( -i\nabla - \frac{2e\vec{A}}{\hbar c} \right) \Delta \right|^2 + \frac{b^2}{8\pi}, \quad (2.16)$$

onde  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  é a constante de Planck e  $b$  é a densidade local de fluxo magnético. Os termos seguintes resultam de uma analogia formal entre termos de ordem  $|\Delta|^2$  e a densidade de energia de uma partícula de carga  $e^* = 2e$  e massa  $m^*$  descrita por uma função de onda  $\psi(\vec{r})$ :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{(2m^*C)^{1/2}}{\hbar} \Delta(\vec{r}), \quad \alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{A}{C}, \quad \beta = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \frac{B}{C^2}.$$

Finalmente, a energia livre proposta por *Ginzburg* e *Landau*, em 1951, assume a forma:

$$F = F_n + \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left( -i\hbar\nabla - \frac{e^*\vec{A}}{c} \right) \psi \right|^2 + \frac{h^2}{8\pi}. \quad (2.17)$$

<sup>1</sup>Pode-se mostrar da teoria microscópica que só aparecem potências pares na expansão devido à solução analítica em  $\psi = 0$  [21].

<sup>2</sup> $|\Delta|$  está relacionado ao parâmetro de ordem como visto mais adiante [31].

$F$  é um funcional de  $\psi(\vec{r})$  e do potencial vetor  $\vec{A}(\vec{r})$ . Graficamente o parâmetro de potência quarta é o termo dominante em (2.17) e, portanto, o sinal de  $\beta$  determina a orientação da concavidade de  $F$ , enquanto o sinal de  $\alpha$  determina sua forma. Para  $\beta < 0$  não se pode determinar claramente os mínimos da energia, portanto  $\beta$  deve ser *positivo*.  $\alpha$  pode ser *positivo ou negativo*, para  $\alpha > 0$  temos um mínimo em  $|\psi^2| = 0$ , e como observamos anteriormente, o parâmetro de ordem na fase normal é zero. Portanto,  $\alpha > 0$  revela o fato de que o material superou seus valores críticos e está no estado normal (Figura 2.6-a). No caso  $\alpha < 0$  temos dois mínimos equivalentes (Figura 2.6-b). O mínimo de (2.17) para esse caso é aquele em que o parâmetro de ordem é uma constante diferente de zero ( $\delta F = 0$ ), isto é  $|\psi|^2 = |\psi_\infty|^2 = -\alpha/\beta$ , onde  $\psi_\infty$  é o valor do parâmetro de ordem para um supercondutor infinito na ausência de campos e gradientes.

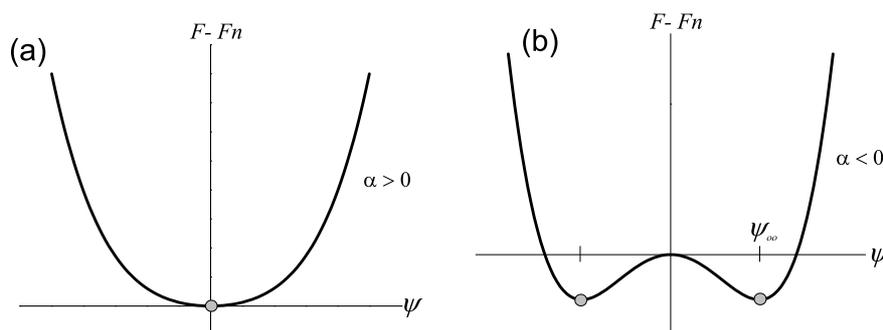


Figura 2.6: Funções da energia livre de Ginzburg-Landau para (a)  $T > T_c$  ( $\alpha > 0$ ) e para (b)  $T < T_c$  ( $\alpha < 0$ ). Os pontos indicam as posições de equilíbrio.

Analisando fisicamente cada termo do funcional de energia livre, podemos observar que: o primeiro termo corresponde à energia do estado normal; os dois próximos termos correspondem à energia de condensação do estado supercondutor; o quarto termo está relacionado à energia cinética dos pares de Cooper; e o último termo corresponde ao aumento na energia necessário para manter o fluxo fora do supercondutor, isto é, para garantir o efeito Meissner. Minimizando (2.17) em relação ao parâmetro de ordem e ao potencial vetor

chegamos às equações de Ginzburg-Landau, como será mostrado a seguir.

### Primeira equação de Ginzburg-Landau

Integrando (2.17) em todo o espaço, obtemos a energia livre total de um supercondutor:

$$F = \int dV \left\{ \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left( -i\hbar \nabla - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right) \psi \right|^2 + \frac{\hbar^2}{8\pi} \right\} \quad (2.18)$$

Variamos esta expressão em relação a  $\psi^*$ :

$$\int \left\{ \alpha |\psi| \delta\psi^* + \beta \psi |\psi|^2 \delta\psi^* + \frac{1}{2m^*} \vec{\varphi} \cdot \left( i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right) \delta\psi^* \right\} dV = 0 \quad (2.19)$$

onde

$$\vec{\varphi} = \left( -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right) \psi, \quad (2.20)$$

e  $V$  é o volume da amostra<sup>3</sup>. Usando a relação  $\vec{\nabla} \cdot (\delta\psi^* \vec{\varphi}) = \vec{\varphi} \cdot \vec{\nabla} \delta\psi^* + \delta\psi^* \vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi}$ , o último termo da equação (2.19) pode ser escrito como:

$$\frac{i\hbar}{2m^*} \left[ - \int \delta\psi^* \vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi} dV + \int \vec{\nabla} \cdot (\delta\psi^* \vec{\varphi}) dV \right] - \frac{e^*}{2m^* c} \int \vec{\varphi} \cdot \vec{A} \delta\psi^* dV. \quad (2.21)$$

Substituindo (2.21) na Eq. (2.19) e usando o teorema de Gauss  $\int \vec{\nabla} \cdot \vec{T} dV = \oint \vec{n} \cdot \vec{T} dS$  obtemos:

$$\int \left\{ \alpha |\psi| \delta\psi^* + \beta \psi |\psi|^2 \delta\psi^* - \frac{i\hbar}{2m^*} \delta\psi^* \vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi} - \frac{e^*}{2m^* c} \vec{\varphi} \cdot \vec{A} \delta\psi^* \right\} dV + \frac{i\hbar}{2m^*} \oint_S \vec{n} \cdot \delta\psi^* \vec{\varphi} dS = 0, \quad (2.22)$$

onde  $S$  é a superfície da amostra. Finalmente, substituindo a função  $\vec{\varphi}$ , a solução da equação (2.22) é dada pelas equações:

$$\int \left\{ \alpha \psi \delta\psi^* + \beta \psi |\psi|^2 \delta\psi^* + \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e^* \vec{A}}{c} \right)^2 \psi \delta\psi^* \right\} dV = 0, \quad (2.23)$$

<sup>3</sup>Fora da amostra  $\psi = 0$ .

e

$$\frac{i\hbar}{2m^*} \oint_S \vec{n} \cdot \delta\psi^* \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\vec{A} \right) \psi dS = 0. \quad (2.24)$$

As equações (2.23) e (2.24) devem ser válidas para qualquer valor arbitrário (porém pequeno) de  $\delta\psi^*$ , donde obtemos a *primeira equação da teoria de Ginzburg-Landau* e a sua *condição de contorno*:

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\vec{A} \right)^2 \psi = 0, \quad (2.25)$$

$$\vec{n} \cdot \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\vec{A} \right) \psi = 0, \quad (2.26)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor normal à superfície do supercondutor. Essa condição expressa que nenhuma supercorrente pode passar perpendicular ao limite da amostra e é aplicada a amostras supercondutoras finitas. Exceto pelo termo não linear, a eq. (2.25) tem a forma da equação de Schrödinger para partículas de massa  $m^*$ , carga  $e^*$  e função de onda  $\psi(\vec{r})$ , com autovalor de energia  $-\alpha$ . O termo não linear atua como um potencial repulsivo de  $\psi$ .

### Segunda equação de Ginzburg-Landau

Para obter a segunda equação de Ginzburg-Landau minimizamos a energia livre, equação (2.17) com respeito a  $\vec{A}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m^*} \int \left( -\frac{e^*}{c} \delta\vec{A} \psi^* \right) \cdot \left( -i\hbar\vec{\nabla} \psi - \frac{e^*}{c} \vec{A} \psi \right) dV \\ & + \frac{1}{2m^*} \int \left( i\hbar\vec{\nabla} \psi^* - \frac{e^*}{c} \vec{A} \psi^* \right) \cdot \left( -\frac{e^*}{c} \delta\vec{A} \psi \right) dV \\ & + \frac{1}{4\pi} \int \left( \nabla \times \vec{A} - \vec{H}_0 \right) \cdot \nabla \times \delta\vec{A} dV = 0, \quad (2.27) \end{aligned}$$

onde  $H = \nabla \times \vec{A}$ , e a integração é sobre o espaço completo. A primeira e segunda integral podem ser reunidas como:

$$\int \left[ \frac{i\hbar e}{m^* c} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) + \frac{4e^2}{m^* c^2} |\psi|^2 \vec{A} \right] \cdot \delta\vec{A} dV, \quad (2.28)$$

Usando a propriedade  $\nabla \cdot [\vec{a} \times \vec{b}] = \vec{b} \cdot \nabla \times \vec{a} - \vec{a} \cdot \nabla \times \vec{b}$  onde  $(\vec{b} = \nabla \times \vec{A} - \vec{H}_0$  e  $\vec{a} = \delta \vec{A})$ , pode-se escrever a terceira integral em (2.27) como:

$$\frac{1}{4\pi} \int \left\{ \delta \vec{A} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{A} + \nabla \cdot \left[ \delta \vec{A} \times (\nabla \times \vec{A} - \vec{H}_0) \right] \right\} dV, \quad (2.29)$$

Pelo teorema de Gauss, a última parte da equação (2.29) pode ser escrita na forma:

$$\int \nabla \left[ \delta \vec{A} \times (\nabla \times \vec{A} - \vec{H}_0) \right] dV = \oint_S d\vec{S} \cdot \left[ \delta \vec{A} \times (\nabla \times \vec{A} - \vec{H}_0) \right]. \quad (2.30)$$

Na superfície,  $\nabla \times \vec{A} = \vec{H} = \vec{H}_0$  para um supercondutor finito, pelo qual a equação (2.30) é nula. Finalmente, a equação (2.27) torna-se:

$$\int \left[ \frac{i\hbar e}{m^*c} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) + \frac{4e^2}{m^*c^2} |\psi|^2 \vec{A} + \frac{1}{4\pi} \nabla \times \nabla \times \vec{A} \right] \cdot \delta \vec{A} dV = 0. \quad (2.31)$$

Esta equação só é válida se a expressão entre os colchetes é nula. Finalmente, de (2.31) obtemos uma equação para a corrente conhecida como a *segunda equação de Ginzburg-Landau*<sup>4</sup>

$$\vec{j}_s = \frac{\hbar e}{m^*i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \frac{4e^2}{m^*c} \vec{A} |\psi|^2. \quad (2.32)$$

### 2.2.3 Comprimentos característicos

A teoria de Ginzburg-Landau introduz dois importantes comprimentos característicos: o comprimento de coerência  $\xi(T)$  e o comprimento de penetração  $\lambda(T)$ . O primeiro indica o comprimento típico sobre o qual o parâmetro de ordem pode variar, e o segundo indica o comprimento típico sobre o qual o campo magnético  $\vec{H}$  pode variar (ver figura 2.7).

<sup>4</sup>Pela lei de Ampere a densidade de corrente no supercondutor é dada por  $\vec{j}_s = (c/4\pi) \nabla \times \nabla \times \vec{A}$ .

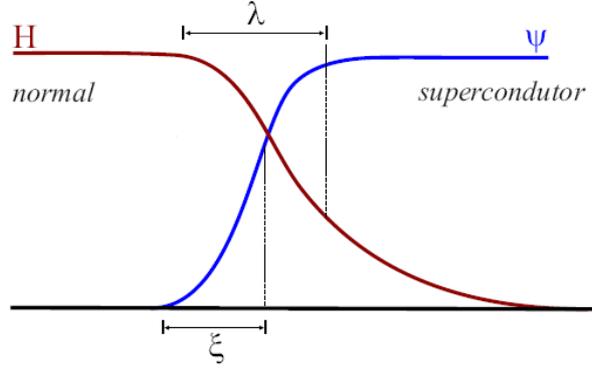


Figura 2.7: Distribuição espacial do parâmetro de ordem  $\psi$  e o campo magnético  $H$  numa interface supercondutor-normal.

$\xi(T)$  e  $\lambda(T)$  podem ser derivados da primeira e segunda equações de Ginzburg-Landau:

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e^*}{c}\vec{A} \right)^2 \psi = 0, \quad (2.33)$$

$$\vec{j}_s = \frac{\hbar e}{m^*i} \left( \psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^* \right) - \frac{4e^2}{m^*c} \vec{A}|\psi|^2. \quad (2.34)$$

Para obter  $\lambda(T)$  considera-se um campo magnético fraco aplicado a um supercondutor, com dimensões maiores que o comprimento de penetração. Nesta aproximação, pode-se considerar a densidade de pares de Cooper como sendo uniforme e igual ao valor de equilíbrio calculado a campo nulo, isto é:

$$|\psi| = \psi_0 = \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}. \quad (2.35)$$

Tomando o rotacional nos dois lados da equação (2.34), obtemos:

$$\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = -\frac{4e^2}{m^*c} |\psi|^2 \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (2.36)$$

Usando a lei de Ampere  $\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_s$ , e lembrando que  $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{H}$  obtemos

$$\frac{m^*c^2\beta}{16\pi e^2|\alpha|} \nabla^2 \vec{H} + \vec{H} = 0. \quad (2.37)$$

Pode-se comparar a equação (2.37) com a equação (2.10) da teoria de London, obtendo para o *comprimento de penetração* do campo magnético:

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{m^*c^2}{16\pi e^2|\psi_0|^2}} = \sqrt{\frac{m^*c^2\beta}{16\pi e^2|\alpha|}} = \sqrt{\frac{m^*c^2}{8\pi e^2 n_s}}, \quad (2.38)$$

onde a densidade de elétrons supercondutores  $n_s = 2|\psi_0|^2 = 2|\alpha|/\beta$  e a massa de um par de Cooper é duas vezes a massa do elétron,  $m^* = 2m$ .  $\lambda(T)$  coincide com o comprimento de penetração de London a  $T = 0$ , isto é, onde todos os elétrons são supercondutores.

A dependência com a temperatura de  $\lambda(T)$  fica mais clara relacionando esta com o comprimento  $\lambda(0)$  obtido da teoria microscópica [21]:

$$\lambda^2(T) \simeq \frac{\lambda^2(0)}{1-t}, \quad (2.39)$$

onde  $t = T/T_c$ . Dentro da teoria microscópica é possível derivar dois limites para esta dependência:

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{2(1-t)}} \quad l_{el} \gg \xi_0, \quad (2.40a)$$

$$\lambda(T) = 0.64\lambda(0)\sqrt{\frac{\xi_0}{l_{el}(1-t)}} \quad l_{el} \ll \xi_0, \quad (2.40b)$$

onde  $l_{el}$  é o caminho livre meio dos elétrons normais. As expressões (2.40) são válidas somente para temperaturas próximas a  $T_c$ . Estes limites são conhecidos como o limite “limpo” para  $l_{el} \gg \xi_0$ , e limite “sujo” para  $l_{el} \ll \xi_0$ .  $\xi_0$  é o comprimento de coerência obtido a partir da teoria microscópica.

Para obter o comprimento de coerência, consideramos um exemplo onde  $\psi$  varia só na direção  $z$ , na ausência de um campo magnético aplicado, pelo qual a equação (2.33) se expressa por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi + \alpha\psi + \beta\psi^3 = 0. \quad (2.41)$$

Assumindo que  $\psi$  é real, pode-se usar um parâmetro de ordem adimensional  $\psi = f\psi_0$ , onde  $\psi_0$  corresponde ao estado com a energia livre mais baixa, e

está dado pela equação (2.35). De acordo com essas considerações a equação (2.41) fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|} \frac{d^2}{dz^2} f - f + f^3 = 0. \quad (2.42)$$

Então, uma escala de comprimento para variações espaciais do parâmetro de ordem é

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}}, \quad (2.43)$$

a qual é conhecida como o *comprimento de coerência* de Ginzburg-Landau, e mede a extensão de coerência do parâmetro de ordem  $\psi$ . Esse comprimento diverge para uma temperatura  $t = T/T_c = 1$ . Pode-se entender melhor o significado físico deste comprimento característico quando se considera uma forma linearizada de (2.42). Assim, substituindo nessa equação  $f = 1 + g$ , onde  $g \ll 1$ , obtemos:

$$\frac{d^2g}{dz^2} - \frac{2}{\xi^2} g = 0, \quad (2.44)$$

donde temos que:

$$g(z) \sim e^{\pm\sqrt{2}z/\xi(T)}. \quad (2.45)$$

Então, para uma pequena variação de  $\psi$ , se tem um decaimento num comprimento característico da ordem  $\xi(T)$  [21]. Dentro da teoria microscópica podem-se apresentar os resultados para o comprimento de coerência nos limites “limpo” e “sujo”:

$$\xi(T) = 0.74 \frac{\xi_0}{\sqrt{(1-t)}} \quad l_{el} \gg \xi_0, \quad (2.46a)$$

$$\xi(T) = 0.855 \sqrt{\frac{\xi_0 l_{el}}{(1-t)}} \quad l_{el} \ll \xi_0. \quad (2.46b)$$

Aqui,  $\xi_0$  é o comprimento de coerência obtido a partir da teoria microscópica. É importante observar que para os comprimentos característicos no limite “sujo”, (2.40b) e (2.46b), se  $l_{el}$  decresce (supercondutor menos puro),  $\lambda(T)$  cresce, enquanto  $\xi(T)$  decresce. Logo, independentemente da temperatura, temos para os materiais impuros em geral que  $\lambda(T) \gg \xi(T)$ .

Pode-se observar que tanto o comprimento de penetração como o comprimento de coerência apresentam a mesma dependência com a temperatura, já que são proporcionais a  $(1 - T/T_c)^{-1/2}$ , divergindo com a temperatura crítica  $T_c$ . A razão entre os dois comprimentos característicos define o *parâmetro de Ginzburg-Landau*  $\kappa$ :

$$\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)}. \quad (2.47)$$

Esse parâmetro adimensional é independente da temperatura devido ao comportamento de  $\lambda$  e  $\xi$  em torno de  $T_c$ . Seu valor é específico de cada material e é importante para definir o tipo de supercondutor.

#### 2.2.4 Validade da teoria de Ginzburg-Landau

Para verificar a validade da teoria de Ginzburg-Landau, deve ser levado em conta que:

- A teoria é baseada na teoria de transições de segunda ordem de Landau. Assim, a energia livre pode ser expandida em potências pares de  $|\psi|$ , já que próximo de  $T_c$ , a magnitude do parâmetro de ordem é pequena. Os coeficientes nessa expansão são assumidos de tal maneira que  $\alpha$  é positivo na fase de temperatura alta, e muda para negativo abaixo da temperatura crítica ( $\alpha \propto (T - T_c)$ );  $\beta$  é uma constante positiva independente da temperatura. Essas suposições não são aplicáveis de maneira geral. Porém, Gor'kov mostrou teoricamente que a expansão de Landau é válida para  $T \approx T_c$ , e que as equações GL são um caso limite da teoria BCS.
- $\psi$  deve ser uma função que varia suavemente no espaço para distâncias da ordem de  $\xi(0)$ . Assim, a condição necessária para a validade da teoria é  $\xi(T) \gg \xi(0)$ . Da dependência com a temperatura do comprimento de coerência temos a condição:

$$\frac{T_c - T}{T_c} \ll 1, \quad (2.48)$$

logo essa condição é satisfeita só para temperaturas perto da temperatura crítica,  $T \approx T_c$ .

- A relação entre a corrente e o potencial vetor, através das equações de Ginzburg-Landau, deve ser igualmente válida somente se  $\vec{H}$  e  $\vec{A}$  são funções com variações suaves no espaço para distâncias da ordem de  $\xi(0)$ . Para satisfazer esta condição, é necessário que  $\lambda(T) \gg \xi(0)$ . Portanto

$$\frac{T_c - T}{T_c} \ll \kappa^2, \quad (2.49)$$

que nos leva novamente à condição que a temperatura deve ser próxima da temperatura crítica do material.

Cabe destacar que a teoria de Ginzburg-Landau foi deduzida para ser válida somente perto da transição entre os estados supercondutor/normal ( $T/T_c \approx 1$ ), porém, ela é aplicável em um intervalo de temperaturas muito maior. De Gennes demonstrou que a teoria de GL é válida para qualquer temperatura em campos magnéticos fortes [31]. Além disso, comparações de medidas da corrente crítica em filmes finos de alumínio com as previsões teóricas usando os formalismos BCS e GL, tem mostrado que as duas teorias concordam nos resultados para temperaturas abaixo de  $0.1T_c$ . Assim, a teoria GL tem um domínio de validade maior que aquele para o qual foi concebida [21].

## 2.3 Comportamento de supercondutores em campos aplicados.

Em 1957, Alexei Abrikosov mostrou que os supercondutores se comportam de duas formas distintas na presença de um campo magnético [25]. Ele chamou *supercondutores do tipo I* aqueles que na presença de um campo magnético têm uma transição de primeira ordem num ponto de descontinuidade, conhecido como  $H_c$ . E *supercondutores do tipo II* aqueles que têm um incremento contínuo na penetração de fluxo começando num campo crítico inferior  $H_{c1}$  e chegando a  $B = H$  num campo crítico superior  $H_{c2}$  (ver Figura 2.8). Nestes

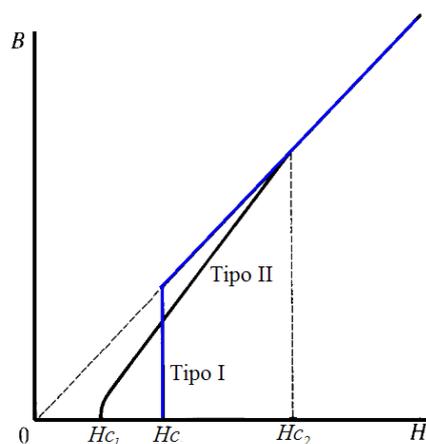


Figura 2.8: Comparação entre o comportamento da penetração de fluxo em supercondutores tipo I e tipo II.

supercondutores do tipo II, devido à penetração parcial de fluxo magnético, a energia do estado diamagnético para manter o campo magnético no exterior do supercondutor é menor. Então,  $H_{c2}$  pode ser muito maior que o campo crítico  $H_c$ . Essa propriedade permite materiais supercondutores que podem ser submetidos a campos e correntes bem mais intensos que os materiais do tipo I.

### 2.3.1 Supercondutores do tipo-I e do tipo-II

O valor do parâmetro de GL  $\kappa$  determina o comportamento de um supercondutor num campo aplicado ( $H_o$ ). Dependendo do valor de  $\kappa$  ser maior ou menor que  $1/\sqrt{2}$ , se tem a distinção entre supercondutores do tipo-I e do tipo-II, como dito anteriormente. A dependência das características supercondutoras com  $\kappa$  é ilustrada na figura 2.9. Amostras semi-infinitas com  $\kappa < 0.42$  são supercondutores puros do tipo I. Para campos menores que o campo crítico  $H_c$  o supercondutor encontra-se no estado Meissner e todo o fluxo magnético é expelido da amostra. No campo crítico, o campo magnético penetra na amostra, a supercondutividade é destruída e a amostra fica no estado normal. Para  $0.42 < \kappa < 1/\sqrt{2} \simeq 0.71$  ainda considera-se o

supercondutor do tipo I, porém, o estado Meissner não muda imediatamente ao estado normal com o aumento de campo. No campo  $H_c$  o fluxo pode penetrar a parte interna da amostra, perto da superfície da amostra numa camada supercondutora remanescente, ficando num estado de *supercondutividade superficial* [32]. Para campos maiores que o campo crítico  $H_{c3}$  a amostra toda fica no estado normal.

Para os supercondutores do tipo II ( $\kappa > 0.71$ ) se tem um comportamento diferente, descrito abaixo:

- O efeito Meissner em supercondutores do tipo II se apresenta para campos magnéticos fracos,  $H_0 < H_{c1}$ . O campo crítico  $H_{c1}$  é, em geral, muito menor que o campo crítico termodinâmico  $H_c$ .
- Para  $H_0 > H_{c1}$  as linhas de campo magnético penetram o supercondutor. Porém, ainda no estado de equilíbrio a penetração não é completa. O fluxo magnético  $\phi$  é menor que no estado normal, isto é, ainda existem correntes de blindagem na amostra. Nesse estado, o fluxo magnético aparece quantizado em unidades do quantum de fluxo  $\phi_0 = hc/2e$ , penetrando a amostra em forma de *vórtices*. Essa situação

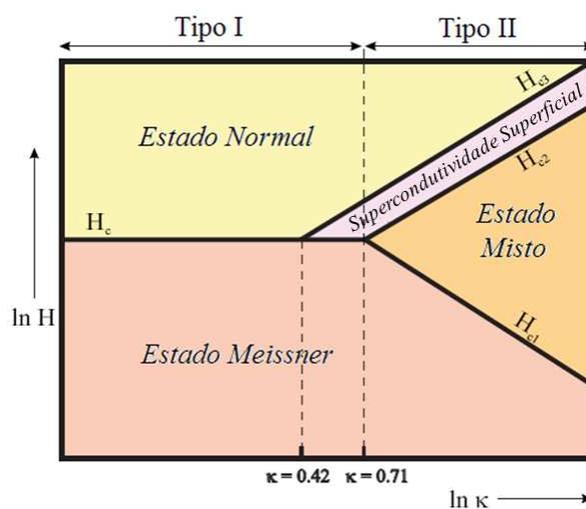


Figura 2.9: Dependência das características de um supercondutor semi-infinito em função do parâmetro de ordem.

se mantém enquanto  $H_{c1} < H_0 < H_{c2}$  onde  $H_{c2}$  é um campo crítico superior, maior que  $H_c$ . Essa região é chamada de *estado de vórtices de Abrikosov*, também conhecida como o *estado misto*.

- Para  $H_0 > H_{c2}$  a amostra não repele o fluxo, então  $B \equiv H$ . Acima do campo magnético  $H_{c2}$  nos supercondutores do tipo II encontra-se mais um campo magnético crítico. Esse campo surge de uma condição de fronteira das equações GL com campo paralelo à superfície. Nessa condição um campo magnético pode existir numa porção da superfície de espessura  $\approx \xi(T)$  até se alcançar o valor  $H_{c3}$  (para supercondutores semi-infinitos  $H_{c3} = 1.69H_{c2}$ ). Acima de  $H_{c3}$ , a supercondutividade é destruída completamente e a amostra inteira fica no estado normal.

Os campos críticos  $H_c, H_{c1}, H_{c2}$  e  $H_{c3}$  dependem da temperatura. Num diagrama de fase  $H - T$  pode-se observar, da mesma forma, a distinção entre os tipos de supercondutores, ficando clara a diferença nos campos críticos presentes em cada um deles, ver figura 2.10. Num supercondutor do tipo-I o efeito Meissner se apresenta em campos abaixo do único campo crítico  $H_c$ . Acima deste valor do campo, o fluxo penetra completamente na amostra. Nos supercondutores do tipo-II o efeito Meissner se apresenta em campos abaixo do primeiro campo crítico  $H_{c1}$ , sendo este menor que o campo  $H_c$ . Acima de  $H_{c1}$  o campo penetra na amostra, mas penetra na forma de *vórtices*, ou

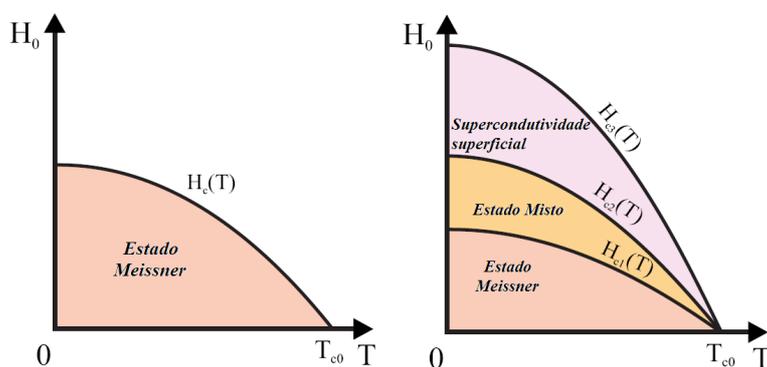


Figura 2.10: Diagrama de fase  $H - T$  para supercondutores tipo I (esquerda) e tipo-II (direita).

seja o fluxo magnético aparece de forma quantizada. Nos supercondutores semi-infinitos esses vórtices constroem um arranjo triangular. Essa situação se mantém enquanto  $H_{c1} < H_0 < H_{c2}$ . Num campo maior que  $H_{c2}$  o campo penetra a amostra e só resta uma pequena camada supercondutora na superfície, até o campo crítico  $H_{c3}$ . Acima desse campo o material entra no estado normal. A diferença entre os dois tipos de supercondutores pode ser vista no comportamento da magnetização. A magnetização de um material é definida como  $\vec{M} = (\vec{B} - \vec{H}_0)/4\pi$ . Num supercondutor do tipo I, abaixo de  $H_c$  o campo todo é expelido da amostra, então temos  $B = 0$  e  $-4\pi\vec{M} = \vec{H}_0$ . Acima de  $H_c$  o campo penetra o supercondutor todo,  $\vec{B} = \vec{H}_0$  e  $\vec{M} = 0$ . Nos supercondutores do tipo-II só abaixo de  $H_{c1}$  temos que  $-4\pi\vec{M} = \vec{H}_0$ . No estado misto o valor da magnetização  $|\vec{M}|$  decresce com o incremento do campo até desaparecer no campo crítico  $H_{c2}$ , esse comportamento pode ser visto na figura 2.11.

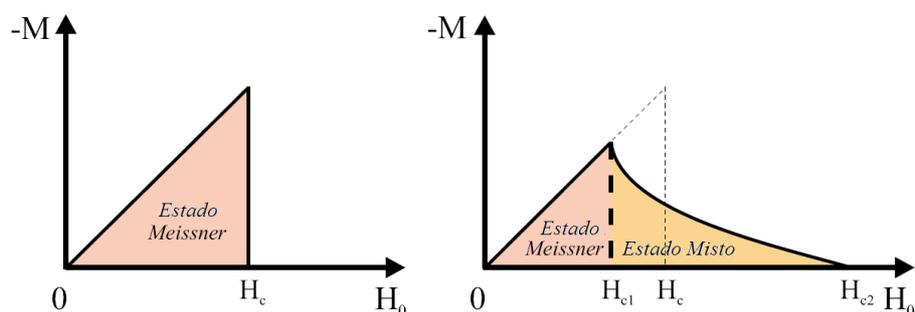


Figura 2.11: A magnetização em função do campo magnético aplicado para supercondutores do tipo-I e do tipo-II.

## 2.4 Vórtices em supercondutores macroscópicos

Outro resultado encontrado por Abrikosov foi que no *estado misto*, entre os campos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$ , o fluxo não penetra no supercondutor em um único domínio. Ele penetra num arranjo de tubos de fluxo, onde cada um deles

carrega um *quantum de fluxo*:

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e} = 2.07 \times 10^{-7} G - cm^2. \quad (2.50)$$

Em cada célula unitária do arranjo, se tem um *vórtice* de supercorrente concentrando o fluxo através dele. Abrikosov previu dois arranjos, quadrado e triangular. Porém, posteriormente, foi mostrado que o arranjo numa forma triangular seria o mais estável, ou seja, o que minimiza energia livre do sistema. A rede triangular de vórtices foi demonstrada mais adiante por técnicas experimentais de decoração magnética com o auxílio de microscopia eletrônica [33].

### 2.4.1 Quantização de fluxóide

A quantização de fluxóide diz que o fluxo magnético total que passa através de um supercondutor é quantizado e só pode ser um múltiplo inteiro do quantum de fluxo  $\Phi_0$ , dado pela equação (2.50).

Pode-se obter essa condição a partir do formalismo de Ginzburg-Landau, introduzindo a magnitude  $|\psi|$  e a fase  $\phi(r)$  do parâmetro de ordem na forma:

$$\psi = |\psi|e^{i\phi(r)}. \quad (2.51)$$

Substituindo na segunda equação de GL, equação (2.32), temos:

$$\vec{j}_s = \frac{2e\hbar}{m^*} |\psi|^2 \vec{\nabla} \phi(r) - \frac{4e^2}{m^*c} \vec{A} |\psi|^2. \quad (2.52)$$

Calcula-se uma integral de contorno do potencial vetor numa trajetória fechada  $C$ . Desta forma temos:

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_S \vec{h} \cdot d\vec{S} = \Phi. \quad (2.53)$$

Esta integral dá o fluxo magnético através da trajetória fechada  $C$ . Reescrevendo (2.52) na forma:

$$\vec{A} = \frac{c\hbar}{2e} \vec{\nabla} \phi(r) - \frac{m^*c\vec{j}_s}{4e^2|\psi|^2}, \quad (2.54)$$

obtemos:

$$\frac{c\hbar}{2e} \oint_C \vec{\nabla}\phi(r) \cdot d\vec{l} - \frac{m^*c}{4e^2} \oint_C \frac{\vec{j}_s}{|\psi|^2} \cdot d\vec{l} = \Phi, \quad (2.55)$$

A fase de  $\psi$  varia de  $2\pi n$  ao longo da trajetória  $C$ , pelo qual temos:

$$\Phi = n \frac{c\hbar}{2e} - \frac{m^*c}{4e^2} \int_C \frac{\vec{j}_s}{|\psi|^2} \cdot d\vec{l}. \quad (2.56)$$

Tomando uma trajetória onde  $j_s = 0$ , ou seja, longe das bordas da amostra ou de domínios normais na amostra, temos:

$$\Phi = n \frac{c\hbar}{2e} = n\Phi_0, \quad (2.57)$$

onde  $n = \text{inteiro}$  e pode ser chamado de *número quântico de fluxóide*, determinando o número de quanta de fluxo  $\Phi_0$  que atravessam uma determinada área. A equação (2.57) mostra que o fluxo confinado no supercondutor é *quantizado*. Essa quantização do fluxo magnético permite a medida precisa de campos magnéticos e suas variações através da contagem de fluxóides em SQUIDS.

### 2.4.2 Estrutura de um vórtice.

A penetração de vórtices foi prevista por Abrikosov com a descoberta da solução periódica das equações de Ginzburg-Landau (GL). Abrikosov interpretou essa solução como um arranjo periódico de linhas de fluxo. Cada linha de fluxo (vórtices) carrega um quantum de fluxo  $\Phi_0 = h/2e$ , que é causado pelas supercorrentes que circulam esse vórtice. O campo magnético tem um valor máximo no centro do vórtice. O núcleo do vórtice é um tubo onde a supercondutividade é enfraquecida. A posição do vórtice é definida pelo local onde o parâmetro de ordem supercondutor se anula (ver Figura 2.12). Para vórtices separados e isolados, o raio do tubo de fluxo magnético é dado pelo comprimento de penetração  $\lambda$ , e o raio do núcleo é da ordem do comprimento de coerência  $\xi$ .

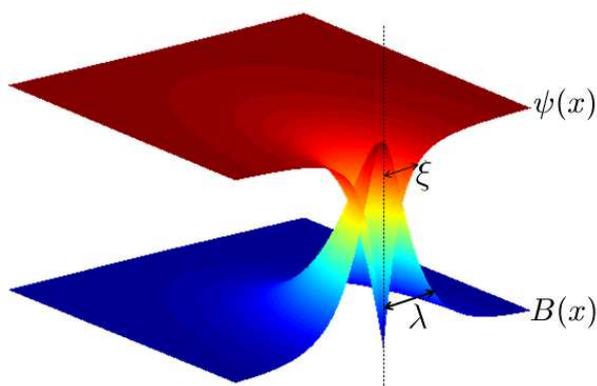


Figura 2.12: Campo magnético  $B(x)$  e parâmetro de ordem  $\psi(x)$  de uma linha de fluxo.

Aumentando o campo magnético, é mais fácil observar a rede de vórtices que Abrikosov previu. No seu trabalho original [25], ele encontrou a formação de uma rede periódica, mas foi W. H. Kleiner [34] quem mostrou que o mínimo da energia é alcançado com uma rede triangular (rede de Abrikosov), ver figura 2.13. É energeticamente mais propício o aparecimento destes vór-

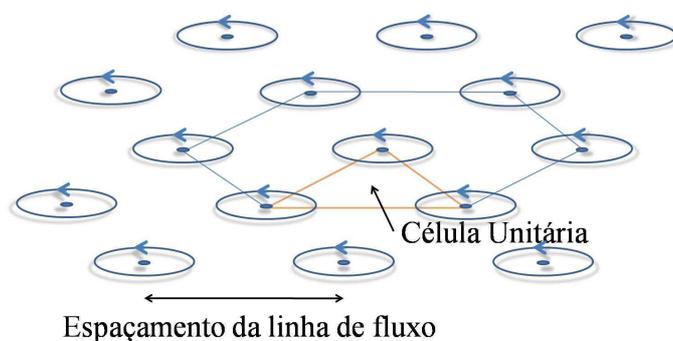


Figura 2.13: Rede Triangular de linhas de fluxo.

tices, no estado supercondutor, quando o campo aplicado atinge o valor do primeiro campo crítico  $H_{c1}$ . Ao aumentar a intensidade do campo, os tubos de fluxo têm uma sobreposição, até quando o campo magnético atinge o valor crítico  $H_{C2}$ . Nesse valor o campo magnético penetra no supercondutor todo destruindo a supercondutividade.

Pode-se determinar a forma com que o campo magnético varia em torno de um vórtice partindo do chamado limite de London<sup>5</sup>. Nesse limite  $\xi \ll \lambda$ , pode-se considerar que  $|\psi|^2$  é constante em todo o espaço, exceto no núcleo do vórtice, onde só a fase é relevante na variação espacial de  $\psi$ . Assim, tomando o rotacional da segunda equação de GL (2.32), para  $\psi(r) = |\psi(r)|e^{i\phi(r)}$  temos:

$$\nabla \times \vec{j}_s = \frac{e^*}{m^*} |\psi|^2 \left( \hbar \nabla \times \nabla \phi - \frac{e^*}{c} \nabla \times \vec{A} \right) \quad (2.58a)$$

$$= \frac{c^2 \Phi_0}{8\pi^2 \lambda^2} (\nabla \times \nabla \phi) - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \vec{H}. \quad (2.58b)$$

Considera-se a presença do vórtice  $i$  paralelo ao eixo  $z$ , e localizado em  $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$  no plano  $xy$ . Então, integrando a equação (2.58b), obtemos [35]:

$$\int d^2 r \hat{n} \cdot \nabla \times \vec{j}_s = \frac{c^2 \Phi_0}{8\pi^2 \lambda^2} \int d^2 r \hat{n} \cdot (\nabla \times \nabla \phi) - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \hat{n} \cdot \vec{H} \quad (2.59a)$$

$$= \frac{c^2 \Phi_0}{8\pi^2 \lambda^2} \oint d\vec{l} \cdot \nabla \phi - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \hat{n} \cdot \vec{H} \quad (2.59b)$$

$$= \frac{c^2 \Phi_0}{8\pi^2 \lambda^2} 2\pi n - \frac{c}{4\pi \lambda^2} \int d^2 r \hat{n} \cdot \vec{H}. \quad (2.59c)$$

Nessa última relação (2.59c),  $n$  representa o número de quanta de fluxo magnético carregado pelos vórtices. Assim, a vorticidade ou função fonte  $\mathbf{v}(\vec{r}, \vec{r}_i)$  de um vórtice é definida como:

$$\mathbf{v}(\vec{r}, \vec{r}_i) = \hat{z} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) n. \quad (2.60)$$

Usando a relação  $4\pi \vec{j}_s / c = \nabla \times \vec{H}$ , a equação de London para a vorticidade pode ser escrita como:

$$\lambda^2 \nabla^2 \vec{H} - \vec{H} = \hat{z} \Phi_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) n. \quad (2.61)$$

A equação (2.61) é a equação de London com a adição de mais um termo, devido a um vórtice localizado em  $\vec{r}_i$ . Portando, um fluxo  $n\Phi_0$  e com um

<sup>5</sup>Esse limite corresponde a supercondutores do tipo II extremos.

raio infinitesimal representado pela função  $\delta$ . A solução dessa equação no espaço real também pode ser resolvida por meio da transformada de Fourier, em coordenadas cilíndricas, considerando  $\vec{H}(\vec{r}) = \hat{z}h$ , e a função de Bessel modificada de ordem zero  $K_0$ . Temos:

$$\vec{H}_z(\vec{r}) = \frac{n\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{\lambda}\right) \hat{z}. \quad (2.62)$$

A função  $K_0(r/\lambda)$  decai como  $e^{-r/\lambda}/\sqrt{r}$  para  $r \gg \lambda$  e diverge logicamente na forma  $\ln(\lambda/r)$  para  $r \rightarrow 0$ . Verifica-se então que  $H_z$  diverge no núcleo do vórtice, essa divergência tem origem na suposição que  $\xi \rightarrow 0$  na teoria de London. Fisicamente, para uma distância da ordem do raio do núcleo  $\xi$ ,  $|\psi| \rightarrow 0$ . Assim, a equação (2.62) descreve a estrutura do vórtice no limite de London em  $r > \xi$  e  $\lambda \gg \xi$ .

## 2.5 Supercondutividade mesoscópica

Os progressos na microfabricação e técnicas de medida tornaram possível o estudo das propriedades de amostras supercondutoras com tamanhos comparáveis ao comprimento de penetração  $\lambda$  e o comprimento de coerência  $\xi$ . Nessas amostras, que são chamadas *mesoscópicas*, as propriedades de um supercondutor são influenciadas consideravelmente por efeitos de confinamento.

Na supercondutividade mesoscópica a nucleação do estado supercondutor depende fortemente das condições de fronteira impostas pela forma e tamanho da amostra. O comportamento da supercondutividade nessa escala é diferente dos supercondutores macroscópicos. Nos supercondutores mesoscópicos a distinção entre supercondutividade do tipo-I e do tipo-II não depende só do parâmetro de Ginzburg-Landau  $\kappa$ , mas também da espessura da amostra [4]. Devido ao fato que o comprimento de penetração efetivo, definido como:

$$\Lambda = \frac{\lambda^2}{d}, \quad (2.63)$$

aumenta bastante em filmes com espessura  $d < \lambda$ . O estado de vórtices pode aparecer em amostras de filmes finos ainda com  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ . Nesse caso temos que definir o *parâmetro de Ginzburg-Landau efetivo*

$$\kappa^* = \frac{\Lambda}{\xi}, \quad (2.64)$$

o qual define o tipo de supercondutividade na escala mesoscópica: tipo-I quando  $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$  e tipo-II quando  $\kappa^* > 1/\sqrt{2}$ .

Em amostras mesoscópicas confinadas em duas dimensões, a distinção entre tipo-I e tipo-II é determinada por  $\kappa$ , a espessura  $d$ , e as dimensões laterais da amostra. Nessas amostras existe uma competição entre a distribuição de vórtices triangular de Abrikosov e a distribuição de vórtices que a própria geometria da amostra impõe, apresentando-se diferentes estados de vórtices [36].

### 2.5.1 Estados de vórtices, multi e gigante.

Para as amostras mesoscópicas o fluxo magnético penetra em formas distintas de acordo com a geometria, o tamanho, o campo aplicado e a temperatura, conforme tem sido verificado teórica e experimentalmente [37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44].

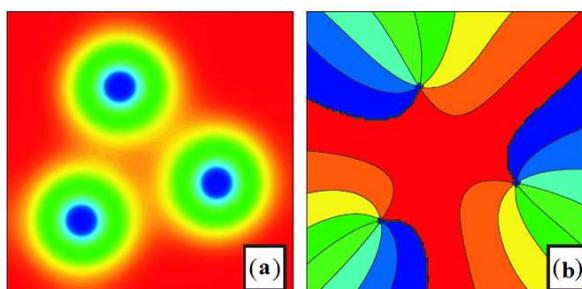


Figura 2.14: Estado de multi-vórtices numa amostra quadrada com vorticidade  $n = 3$ , (a) Densidade de pares de Cooper, *vermelho* densidade alta, *azul* densidade baixa. (b) Mudança de  $6\pi$  na fase SC [45].

No estado de **multi-vórtice**, o fluxo magnético penetra na amostra mesoscópica nas posições onde os vórtices individuais são criados. Pode-se comparar com o estado de vórtices de Abrikosov em supercondutores volumétricos e filmes finos. Esses vórtices são definidos localmente cada qual por uma singularidade na densidade de pares de Cooper, além de uma mudança da fase supercondutora de  $2\pi$  ao redor de cada um deles.

A figura 2.14 mostra a densidade de pares de Cooper e a mudança de fase num quadrado supercondutor de lado  $a = 7.0\xi$  [45]. As regiões vermelhas correspondem a uma alta densidade de pares de Cooper, as regiões azuis a uma baixa densidade. Então os pontos azuis correspondem aos vórtices.

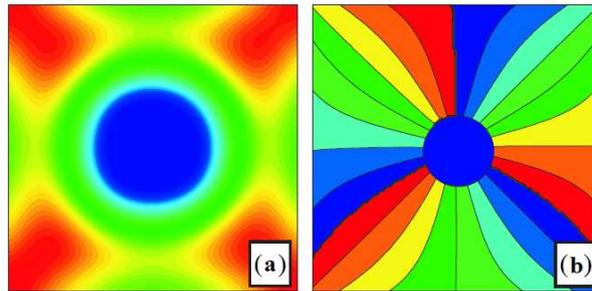


Figura 2.15: Estado de vórtice gigante em amostra quadrada com  $n = 3$ , (a) Densidade de pares de Cooper, *vermelho* densidade alta, *azul* densidade baixa. (b) Mudança de  $6\pi$  na fase SC [45].

Quando a amostra é suficientemente pequena, os vórtices podem se sobrepor de uma forma tão forte que é mais favorável formar somente um **vórtice gigante** com mais de um quantum de fluxo, caracterizado por *um mínimo* na densidade dos pares de Cooper e uma *múltipla* mudança da fase supercondutora de  $2\pi$ . A figura 2.15 mostra o estado de vórtice gigante numa amostra de igual tamanho à amostra da figura 2.14. Observa-se que, embora a vorticidade total da amostra seja  $n = 3$ , há apenas um único vórtice triplamente quantizado.

Nos supercondutores mesoscópicos há uma grande variedade de comportamentos da matéria de vórtices, já que o aparecimento destes depende da geometria, do tamanho, do campo aplicado e da temperatura como observado anteriormente. Estados como *vórtices gigantes*, *multi-vórtices* ou combinações deles (com polaridades iguais ou opostas) são observados, tornando atrativo o estudo do estado de vórtices nessa escala.

## CAPÍTULO 3

---

### Método de variáveis de ligação para as equações TDGL

---

Como um método para resolver o problema da superfície supercondutora interagindo com o arranjo de dipolos magnéticos, usamos o modelo de Ginzburg-Landau dependente do tempo (TDGL). Esse sistema de equações provenientes da teoria microscópica fornece uma descrição aceitável do estado supercondutor. As equações TDGL são equações diferenciais parciais não lineares acopladas para o parâmetro de ordem  $\psi$  (complexo) e para o potencial vetor eletromagnético  $\vec{A}^1$ , assim como suas variações temporais e espaciais. Para resolver esse sistema de equações é usado um método numérico de diferenças finitas conhecido como o método de *variáveis de ligação* [46]. Este método introduz uma aproximação discreta das equações TDGL, na qual, mediante variáveis de ligação, a invariância de calibre é intrinsecamente preservada. Neste capítulo apresentamos as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo e o método numérico usado para resolvê-las.

---

<sup>1</sup>O potencial escalar é normalmente eliminado mediante uma escolha apropriada de calibre.

### 3.1 Equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo

As equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo (TDGL) foram deduzidas da teoria BCS por L. P. Gor'kov e G. M. Éliashberg [47]. O modelo de Ginzburg-Landau dependente do tempo serve, além de estudar a dinâmica dos supercondutores, também para encontrar o estado de equilíbrio termodinâmico partindo de uma situação fora de equilíbrio. Pode-se escrever as equações TDGL na forma [48]:

$$\frac{1}{D} \left( \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{2e}{\hbar} \mu \right) \psi + \frac{1}{\xi^2(T)} (|\psi|^2 - 1) \psi + \left( -i \nabla - \frac{2e}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \psi = 0, \quad (3.1)$$

$$\vec{j} = \sigma \left( -\nabla \mu - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) + \frac{\hbar c^2}{8\pi e \lambda^2(T)} \text{Re} \left[ \bar{\psi} \left( -i \nabla - \frac{2e}{\hbar c} \vec{A} \right) \psi \right], \quad (3.2)$$

$$\rho = \frac{\mu - \phi}{4\pi \lambda_F^2}. \quad (3.3)$$

Estas equações são complementadas pelas equações de Maxwell, que acoplam os potenciais escalar  $\phi(\vec{r})$  e vetor  $\vec{A}$  à densidade de corrente  $\vec{j}$  e à densidade de carga  $\rho$ , descritos nas equações acima.  $\mu$  é o potencial eletroquímico devido à carga eletrônica  $e$ , e  $\lambda_F$  é o comprimento de Fermi para a blindagem das cargas estáticas. Desprezamos agora a diferença entre  $\mu$  e  $\phi$  assim como as correntes de deslocamento<sup>2</sup>. O parâmetro de ordem  $\psi$  e seu conjugado  $\bar{\psi}$  estão normalizados por seu valor de equilíbrio na ausência de campos,  $\psi_\infty(T) = [mc^2/8\pi e^2 \lambda^2(T)]^{1/2}$ .  $D$  e  $\sigma$  são a constante de difusão e a condutividade no estado normal, respectivamente, e são dadas na teoria microscópica por [49]:

$$\frac{4\pi \lambda^2(T) \sigma}{c^2} = \frac{\xi^2(t)}{12D} = \frac{\pi \hbar}{96 K_B T_c} \left[ 1 - \frac{T}{T_c} \right]^{-1} \equiv t_0 \left[ 1 - \frac{T}{T_c} \right]^{-1}, \quad (3.4)$$

onde  $t_0$  é o tempo de relaxação característico do parâmetro de ordem.

Com a finalidade de preservar a invariância de calibre nas equações TDGL

<sup>2</sup>Supondo que  $\mu$  e  $\phi$  são ambos pequenos e tomando  $\nabla \times \nabla \times \vec{A} = 4\pi \vec{j}/c$  para as correntes de deslocamento.

introduzimos uma transformação de calibre para o parâmetro de ordem, o potencial vetor e o potencial escalar [50]:

$$\begin{aligned}\psi &\rightarrow \psi e^{i\frac{2e}{\hbar c}\chi}, \\ \vec{A} &\rightarrow \vec{A} + \nabla\chi, \\ \phi &\rightarrow \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi,\end{aligned}\tag{3.5}$$

onde  $\chi$  é um campo escalar arbitrário. Com o calibre de potencial elétrico zero para todos os tempos,  $\phi = 0$ , o eliminamos das equações TDGL. Para fazer uma melhor análise de resultados tomamos a forma adimensional das equações (3.1) e (3.2), isto é: o parâmetro de ordem  $\psi$  em unidades de  $\psi_\infty(T)$ ; as distâncias em unidades de  $\xi(0) = \sqrt{\hbar^2/4m\alpha(0)T_c}$ ; o tempo em unidades de  $t_0 = \pi\hbar/(96k_B T_c)$ ; o campo externo  $H_e$  em unidades de  $H_{c2}(0) = (2\pi\xi(0)^2)^{-1}\Phi_0$ ;  $\vec{A}$  em unidades de  $H_{c2}(0)\xi(0)$ ; e a temperatura em unidades de  $T_c$ . Finalmente as equações TDGL a serem resolvidas podem ser reescritas como:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{\eta} \left[ (i\nabla + \vec{A})^2\psi + (1-T)(|\psi|^2 - 1)\psi \right],\tag{3.6}$$

$$\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = (1-T)Re \left[ \bar{\psi}(-i\nabla - \vec{A})\psi \right] - \kappa^2\nabla \times \nabla \times \vec{A},\tag{3.7}$$

onde  $\eta = t_\psi/t_A$  é a razão entre os tempos característicos para  $\psi$  e  $\vec{A}$ , e foi determinada da teoria BCS para diferentes casos limites. Usamos  $\eta = 1$  se supomos um modelo de Drude para o estado normal,  $\eta = 12$  para superconductores com impurezas magnéticas [47] e  $\eta = 5.79$  para superconductores com acoplamento fraco [51].

Neste trabalho, consideramos que o parâmetro de ordem e o potencial vetor magnético têm o mesmo tempo de relaxação, logo  $\eta = 1$ . Essa suposição é aceitável já que determinaremos configurações do estado estacionário de vórtices.

## 3.2 Método de variáveis de ligação

Ao tratar com um problema contínuo, em alguns casos obter uma solução exata não é algo trivial. Numa tentativa de resolver um problema contínuo numericamente, muitas vezes é melhor tratá-lo como um problema num espaço discretizado de forma que se possa aproximar uma solução exata. Nas pesquisas em supercondutividade, as aproximações numéricas para as equações TDGL têm sido feitas usando Métodos de Elementos Finitos assim como Métodos de Diferenças Finitas, sendo este último de certo modo um caminho mais rápido para achar soluções fisicamente aceitáveis, além de ser um método mais fácil de programar [19].

No método de diferenças finitas utiliza-se uma malha, usualmente retangular e uniforme, de  $N_i \times N_j$  elementos e dois vetores ortogonais de módulos  $a_i, a_j$ . Reescreve-se as equações diferenciais transformando-as em *equações de diferenças* e se substitui as variáveis por seus valores nos pontos da malha, e suas derivadas por quocientes incrementais convenientes. No limite em que  $a_i$  e  $a_j$  tendem a zero, recupera-se as equações diferenciais originais. Assim, escolhe-se uma largura da malha pequena para resolver o problema algébrico resultante. As equações a serem resolvidas e que relacionam as variáveis são as equações TDGL, eqs. (3.6) e (3.7). Elas são resolvidas num certo domínio espacial e temporal, e partindo de condições iniciais para  $\psi$  e  $\vec{A}$ , assim como condições de contorno específicas de cada problema.

As equações TDGL são equações de campos de calibre<sup>3</sup>. Neste tipo de equações, ao aplicar o método de diferenças finitas os sistemas discretos que aproximam as equações diferenciais podem não ser invariantes de calibre para toda a extensão da malha. Esta falta de invariância pode permanecer ao extrapolar os resultados ao contínuo. Para evitar isto, é usado um sistema discreto que apresente invariância de calibre. Isto foi usado inicialmente em teorias de calibre na rede (*lattice gauge theories*) [52] mostrando uma forma de manter tal invariância. Resolvendo as equações TDGL deve-se levar em conta

---

<sup>3</sup>Equações que apresentam invariância sob transformações de calibre.

fundamentalmente a invariância do sistema discreto frente às transformações de calibre na malha, que constituem a versão discretizada da simetria de calibre que as equações TDGL satisfazem. Para isto escreve-se as relações (3.5) numa forma discreta:

$$\psi_{\vec{n}} \rightarrow \psi_{\vec{n}} e^{i\chi^n}, \quad (3.8)$$

$$\langle A_\mu \rangle_{(\vec{n}, \vec{n}+\mu)} \rightarrow \langle A_\mu \rangle_{(\vec{n}, \vec{n}+\mu)} + \frac{\chi_{\vec{n}+\mu} - \chi_{\vec{n}}}{a_\mu}, \quad (3.9)$$

onde  $\vec{n} = (n_i, n_j)$  é um vetor que localiza os pontos da malha e  $\mu$  é um dos vetores ortogonais que definem as translações da rede ( $\hat{\mu} = \hat{i}, \hat{j}$ ). O campo escalar  $\chi$  é um campo escalar real contínuo e diferenciável em todo o domínio, definido nos pontos da malha no caso discreto.  $\psi$  é definido também nos pontos da malha, enquanto o potencial vetor  $\vec{A}$  é definido entre dois pontos vizinhos (ligando dois pontos da malha). Neste caso, definem-se outras variáveis auxiliares, sendo estas as *variáveis de ligação*. Elas estão associadas às uniões entre sítios e substituem o potencial vetor na escrita das equações discretas de modo que permaneçam invariantes com relação às transformações de calibre. Assim, temos que:

$$U_{\mu,n} = \exp\left(-i \int_n^{n+\mu} A_\mu d\mu\right) = \exp(-ia_\mu \langle A_\mu \rangle_{(n, n+\mu)}). \quad (3.10)$$

Para estas variáveis auxiliares as transformações de calibre resultam em:

$$U_{\mu,n} \rightarrow U_{\mu,n} e^{-i(\chi_{n+\mu} - \chi_n)} \quad (3.11)$$

Pode-se verificar para as variáveis de ligação que:  $U_{-\mu, n+\mu} = \bar{U}_{\mu, n}$ , onde  $\bar{U}$  é o complexo conjugado de  $U$ . Fazendo uso dessa propriedade, pode-se definir a seguinte relação:

$$U_{\alpha, n} = U_{i, n} U_{j, n+i} \bar{U}_{i, n+j} \bar{U}_{j, n}, \quad (3.12)$$

onde  $n$  indica o vértice inferior esquerdo de cada célula unitária, o que corresponde à área mínima definida por quatro pontos vizinhos da rede. Com essas considerações gerais, é possível fazer uma adaptação do método de variáveis de ligação para resolver as equações TDGL, obtendo assim uma forma discretizada e invariante de calibre das equações diferenciais contínuas originais.

### 3.2.1 Descrição do método para as equações TDGL

Todo método numérico é definido pelas incógnitas do método mais as equações que relacionam estas incógnitas. As incógnitas no método de variáveis de ligação para as equações TDGL em duas dimensões espaciais são o parâmetro de ordem  $\psi$  e dois campos auxiliares,  $\mathcal{U}^x$  e  $\mathcal{U}^y$ , os quais levam em conta a invariância de calibre do potencial vetor para cada dimensão espacial  $x$  e  $y$ . Esses campos auxiliares estão relacionados às componentes do potencial vetor na forma:

$$\mathcal{U}^x(x, y, t) = \exp\left(-i \int_{x_0}^x A^x(\xi, y, t) d\xi\right) \quad (3.13)$$

$$\mathcal{U}^y(x, y, t) = \exp\left(-i \int_{y_0}^y A^y(x, \eta, t) d\eta\right) \quad (3.14)$$

O ponto  $(x_0, y_0)$  neste caso é arbitrário,  $i = \sqrt{-1}$ . Como aplicação direta do método de variáveis de ligação para resolver as equações TDGL considera-se uma grade retangular, ver figura 3.1, consistente de  $N_x \times N_y$  células, com um espaçamento da grade de  $a_x$  e  $a_y$ . Nos vértices da grade situa-se a variável correspondente ao parâmetro de ordem  $\psi$ . Cada um destes vértices está ligado a seus vizinhos horizontais por meio de uma variável auxiliar

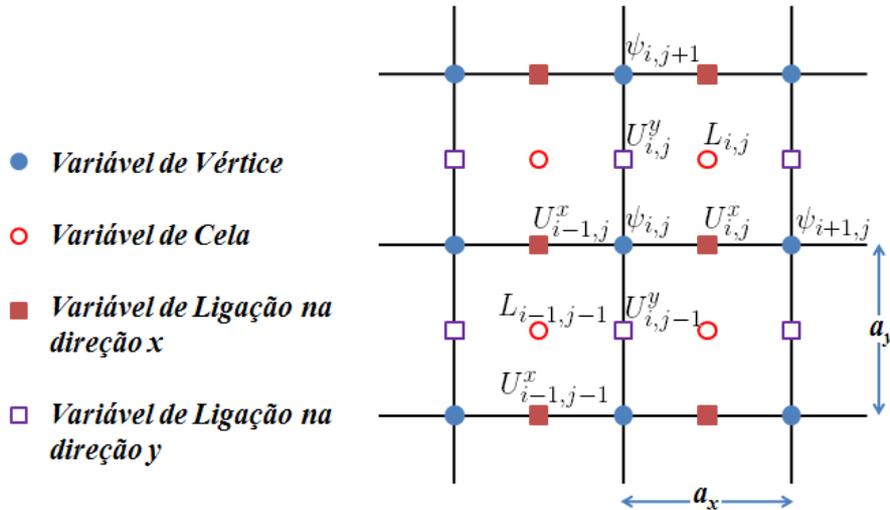


Figura 3.1: Esquema do método de variáveis de ligação.

$U^x$  e a seus vizinhos verticais por uma outra variável  $U^y$ . Essas variáveis estão relacionadas ao potencial vetor do sistema entre vértices vizinhos, e é calculada usando uma versão discreta dos campos auxiliares descritos nas equações (3.13) e (3.14), como veremos a seguir.

Pode-se observar na figura 3.1 que a rede fica formada por células quadradas adjacentes, cada uma delas formada por um quadrado com 4 parâmetros de ordem nos vértices e 4 variáveis auxiliares ligando os vértices. Entre as variáveis de parâmetro de ordem pode-se fazer uma integral de caminho das variáveis auxiliares. Ao se completar a integral em todo o quadrado, se tem calculado o fluxo magnético no centro da célula. Fluxo que é associado a uma outra variável auxiliar,  $L_{i,j}$ , avaliado no centro de cada célula. Estendendo o processo a toda a rede pode-se calcular o fluxo magnético na superfície supercondutora associada à rede de variáveis.

Como método para lograr isto, nesta versão discreta, as três incógnitas complexas fundamentais, são associadas a matrizes:

- $\psi_{i,j}$ , onde  $1 \leq i \leq N_x + 1$  e  $1 \leq j \leq N_y + 1$ , a qual está associada aos nós ou vértices da grade. O valor de  $\psi_{i,j}$  corresponde ao valor do parâmetro de ordem na posição  $(x_i, y_j)$ .
- $U_{i,j}^x$ , onde  $1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y + 1$ . Esta é a variável de ligação auxiliar na direção  $x$  e está associada às ligações horizontais (bordas superiores e inferiores das células) da grade. Está relacionada ao valor do potencial vetor  $A_x$  nesse ponto pela definição:

$$U_{i,j}^x = e^{-i \int_{x_i}^{x_i+1} A_x(\xi, y_j) d\xi} \quad (3.15)$$

- $U_{i,j}^y$ , onde  $1 \leq i \leq N_x + 1, 1 \leq j \leq N_y$ . Esta é a variável de ligação auxiliar na direção  $y$  e está associada às ligações verticais (bordas laterais das células) da grade. Está relacionada ao valor do potencial vetor  $A_y$  nesse ponto pela definição:

$$U_{i,j}^y = e^{-i \int_{y_j}^{y_j+1} A_y(x_i, \eta) d\eta} \quad (3.16)$$

Completa o método de variáveis de ligação, uma forma discreta das equações TDGL, que relacionam todas as variáveis discretas descritas anteriormente.

### 3.2.2 Discretização das equações TDGL

Pode-se observar nas equações (3.15) e (3.16) que as variáveis  $U_{i,j}^x$  e  $U_{i,j}^y$  são análogos discretos dos campos auxiliares  $\mathcal{U}_x$  e  $\mathcal{U}_y$ , os quais então podem ser definidos como:

$$\mathcal{U}_{i,j}^x = \prod_{k=1}^{i-1} U_{k,j}^x, \quad \mathcal{U}_{i,j}^y = \prod_{k=1}^{j-1} U_{i,k}^y, \quad (3.17)$$

donde podemos obter para as variáveis de ligação:

$$U_{i,j}^x = \bar{\mathcal{U}}_{i,j}^x \mathcal{U}_{i+1,j}^x, \quad U_{i,j}^y = \bar{\mathcal{U}}_{i,j}^y \mathcal{U}_{i,j+1}^y, \quad (3.18)$$

e numa versão discreta das definições (3.15) e (3.16) obtemos para estes termos:

$$U_{i,j}^x \approx e^{-iA_x(x_i+a_x, y_j)a_x}, \quad U_{i,j}^y \approx e^{-iA_y(x_i, y_j+a_y)a_y}. \quad (3.19)$$

Agora, as equações TDGL (3.6) e (3.7) devem ser obtidas numa forma discreta para serem incluídas no método de variáveis de ligação. Começamos pelo termo  $(-i\nabla - \vec{A})^2\psi$  na equação (3.6):

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\nabla_\mu}{i} - \vec{A}_\mu \right)^2 \psi = \\ & = -\nabla_\mu^2 \psi + \vec{A}_\mu^2 \psi + i(\nabla_\mu \vec{A}_\mu \psi + \vec{A}_\mu \nabla_\mu \psi) + i\vec{A}_\mu \nabla_\mu \psi \\ & = 2i\vec{A}_\mu \nabla_\mu \psi + i\psi(\nabla_\mu \vec{A}_\mu - i\vec{A}_\mu^2) - \nabla_\mu^2 \psi \\ & = \frac{1}{-i\mathcal{U}^\mu} \left( -2i\vec{A}_\mu \mathcal{U}^\mu \nabla_\mu \psi - i\mathcal{U}^\mu \psi(\nabla_\mu \vec{A}_\mu - i\vec{A}_\mu^2) + \mathcal{U}^\mu \nabla_\mu^2 \psi \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde  $\mu = (x, y)$  e nessa última equação incluímos a variável auxiliar  $\mathcal{U}^\mu$ . Agora, para essa variável auxiliar temos as seguintes igualdades:

$$\nabla_\mu \mathcal{U}^\mu = -i\vec{A}_\mu \mathcal{U}^\mu, \quad (3.21)$$

$$\nabla_\mu^2 \mathcal{U}^\mu = -i\mathcal{U}^\mu(\nabla_\mu \vec{A}_\mu - i\vec{A}_\mu^2). \quad (3.22)$$

Usando essas propriedades na equação (3.20) obtemos para esta:

$$\left(\frac{\nabla_\mu}{i} - \vec{A}_\mu\right)^2 \psi = -\frac{1}{\mathcal{U}^\mu} (2(\nabla_\mu \mathcal{U}^\mu) \nabla_\mu \psi + \nabla_\mu^2 \mathcal{U}^\mu \psi + \mathcal{U}^\mu \nabla_\mu^2 \psi), \quad (3.23)$$

donde, finalmente, temos a identidade:

$$(-i\nabla - \vec{A})^2 \psi = -\bar{\mathcal{U}}^\mu \nabla_\mu (\nabla_\mu (\mathcal{U}^\mu \psi)). \quad (3.24)$$

Para usar esta propriedade no método, temos que usá-la numa versão discreta, por meio da variável discreta  $U^x$ , associada ao campo auxiliar  $\mathcal{U}^\mu$ . Assim em (3.24) o valor de  $\mathcal{U}^\mu \psi$  é trocado pelo valor de  $U^x \psi$  no ponto médio entre dois vértices vizinhos. Aproxima-se o valor de  $U_x \psi$  em  $(x_i + a_x/2, y_j)$  pela metade de seu valor em  $(x_i, y_j)$  e  $(x_{i+1}, y_j)$  e o valor de sua derivada pela diferença de seus valores nesses pontos (aproximação de diferença central) [20]:

$$(U^x \psi)_{(x_i + \frac{a_x}{2}, y_j)} = \frac{1}{2} (U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} + \psi_{i,j}), \quad (3.25)$$

$$\left(\frac{\partial(U^x \psi)}{\partial x}\right)_{x_i + \frac{a_x}{2}, y_j} = \frac{U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{a_x}. \quad (3.26)$$

Com essa aproximação de diferença central, pode-se calcular as derivadas em (3.24) com uma aproximação de segunda ordem em  $(x_i, y_i)$  levando em conta as variáveis de ligação discretas. Assim, pode-se obter a versão discreta em termos das variáveis auxiliares do termo estudado:

$$\begin{aligned} (-i\nabla - \vec{A})^2 \psi|_{(x_i, y_i)} = & -\frac{U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j}}{a_x^2} \\ & - \frac{U_{i,j}^y \psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1}}{a_y^2} + \mathcal{O}(a_x^2 + a_y^2). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Nessa última expressão é utilizada, além da aproximação de diferença central, a teoria do método de diferenças finitas<sup>4</sup>.

---

<sup>4</sup>O método das diferenças finitas é um método de resolução de equações diferenciais que se baseia na aproximação de derivadas por diferenças finitas. A fórmula de aproximação pode ser obtida da série de Taylor da função derivada. O operador de diferenças finitas

Para o termo  $(|\psi|^2 - 1)\psi$  em (3.6) é feita a seguinte aproximação em termos do parâmetro de ordem discreto:

$$(|\psi|^2 - 1)\psi = (\bar{\psi}_{i,j}\psi_{i,j} - 1)\psi_{i,j}. \quad (3.28)$$

Agora fazemos a discretização na aproximação de variáveis de ligação para os termos na equação (3.7). Para o primeiro termo  $Re[\bar{\psi}(-i\nabla - A)\psi]$ , temos transformações similares às usadas no desenvolvimento da equação (3.27). Do mesmo jeito que se obtém a identidade (3.24), pode-se chegar à seguinte identidade:

$$\left(\frac{1}{i}\nabla_x - A_x\right)\psi = -i\frac{1}{\mathcal{U}^x}\nabla_x(\mathcal{U}^x\psi), \quad (3.29)$$

e

$$\left(\frac{1}{i}\nabla_y - A_y\right)\psi = -i\frac{1}{\mathcal{U}^y}\nabla_y(\mathcal{U}^y\psi). \quad (3.30)$$

Utilizando a equação (3.26) para  $(\mathcal{U}^x\psi)$  de uma forma similar à usada para  $(U^x\psi)$  podemos encontrar que:

$$-i\frac{1}{\mathcal{U}^x}\nabla_x(\mathcal{U}^x\psi) = -i\bar{\mathcal{U}}^x\frac{\mathcal{U}_{i,j}^x\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{a_x}. \quad (3.31)$$

Partindo dessa nova identidade, (3.31), obtém-se a seguinte forma para o termo a discretizar:

$$\begin{aligned} Re[\bar{\psi}(-i\nabla_x - A_x)\psi]|_{x_i+\frac{a_x}{2}, y_i} &= \\ Im\left(\frac{\bar{\mathcal{U}}_{i,j}^x\bar{\psi}_{i,j} + \bar{\mathcal{U}}_{i+1,j}^x\bar{\psi}_{i+1,j}}{2}\frac{\mathcal{U}_{i+1,j}^x\psi_{i+1,j} - \mathcal{U}_{i,j}^x\psi_{i,j}}{a_x}\right) + \mathcal{O}(a_x^2) & \\ &= \frac{1}{a_x}Im(\bar{\psi}_{i,j}\bar{\mathcal{U}}_{i,j}^x\mathcal{U}_{i+1,j}^x\psi_{i+1,j}) + \mathcal{O}(a_x^2). \end{aligned}$$

para derivada pode ser obtido a partir da série de Taylor para a função:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \varepsilon(h^2)$$

portanto a derivada pode ser escrita como uma diferença mais um termo de erro :

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \varepsilon(h)$$

Finalmente, em termos da variável discreta  $U^x$ , usando a propriedade (3.18) temos:

$$\text{Re}[\bar{\psi}(-i\nabla_x - A_x)\psi]|_{x_i + \frac{a_x}{2}, y_i} = \frac{1}{a_x} \text{Im}(\bar{\psi}_{i,j} U_{i,j}^x \psi_{i+1,j}) + \mathcal{O}(a_x^2). \quad (3.32)$$

Com um desenvolvimento análogo para a componente  $y$ , obtemos:

$$\text{Re}[\bar{\psi}(-i\nabla_y - A_y)\psi]|_{x_i, y_i + \frac{a_y}{2}} = \frac{1}{a_y} \text{Im}(\bar{\psi}_{i,j} U_{i,j}^y \psi_{i+1,j}) + \mathcal{O}(a_y^2). \quad (3.33)$$

Para o termo final na equação (3.7),  $\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \nabla \times \vec{B}$ , introduzimos mais uma variável auxiliar, correspondente ao interior da célula na figura 3.1. Esta variável estará ligada ao fluxo magnético em cada célula, e é definida por:

$$L_{i,j} = U_{i,j}^x U_{i+1,j}^y \bar{U}_{i,j+1}^x \bar{U}_{i,j}^y. \quad (3.34)$$

Aplicando o teorema de Stokes

$$\oint_r \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{a},$$

para o caminho  $r$  dado por  $(i, j) \rightarrow (i+1, j) \rightarrow (i+1, j+1) \rightarrow (i, j+1) \rightarrow (i, j)$  e usando as definições (3.15) e (3.16), a equação (3.34) pode ser expressa por:

$$L_{i,j} = \exp\left(-ia_x a_y B_z\left(x_i + \frac{a_x}{2}, y_j + \frac{a_y}{2}\right)\right) (1 + \mathcal{O}(a_x^4 + a_y^4)). \quad (3.35)$$

Devido à forma em que o campo magnético penetra no supercondutor, podemos utilizar a condição  $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ , para a qual temos que  $\nabla \times \vec{B} = (\nabla_y B_z, -\nabla_x B_z, 0)$ . Assim fazemos a seguinte aproximação para estes termos partindo da equação (3.35):

$$\nabla_y B_z\left(x_i + \frac{a_x}{2}, y_j\right) = \frac{i}{a_x a_y^2} (\bar{L}_{i,j-1} L_{i,j} - 1) + \mathcal{O}(a_x^2 + a_y^2), \quad (3.36)$$

$$\nabla_x B_z\left(x_i, y_j + \frac{a_y}{2}\right) = \frac{i}{a_x^2 a_y} (\bar{L}_{i,j} L_{i-1,j} - 1) + \mathcal{O}(a_x^2 + a_y^2). \quad (3.37)$$

Com estas duas equações temos a forma discreta do termo  $\nabla \times \vec{B}$  em termos da variável de célula discreta  $L_{i,j}$ .

Agora encontramos a forma discreta da variação temporal do potencial vetor,  $\partial_t \vec{A}$ . Estando este relacionado diretamente às variáveis de ligação, partimos de uma identidade para a evolução temporal dessas variáveis, que pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} \partial_t [\bar{\mathcal{U}}^x(x, y, t) \mathcal{U}^x(x + \delta, y, t)] = \\ - i \bar{\mathcal{U}}^x(x, y, t) \mathcal{U}^x(x + \delta, y, t) \int_x^{x+\delta} \partial_t A_x(\xi, y, t) d\xi. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Usando uma aproximação de diferenças finitas, esta última expressão pode ser reduzida à forma:

$$\begin{aligned} \partial_t [\bar{\mathcal{U}}^x(x, y, t) \mathcal{U}^x(x + \delta, y, t)] = \\ - i \delta \bar{\mathcal{U}}^x(x, y, t) \mathcal{U}^x(x + \delta, y, t) \partial_t A_x(x + \frac{\delta}{2}, y, t) + \mathcal{O}(\delta^2). \end{aligned} \quad (3.39)$$

A equação (3.39) pode se reescrever de modo a fornecer as variações do potencial vetor em termos das variáveis de ligação discretas e para uma variação  $\delta = a_x$ :

$$\partial_t A_x\left(x_i + \frac{a_x}{2}, y_i, t\right) = \frac{i}{a_x} \bar{U}_{i,j}^x \partial_t U_{i,j}^x + \mathcal{O}(a_x^2) \quad (3.40)$$

Para a componente  $y$  do potencial vetor temos, similarmente, a variação temporal com  $\delta = a_y$ :

$$\partial_t A_y\left(x_i, y_i + \frac{a_y}{2}, t\right) = \frac{i}{a_y} \bar{U}_{i,j}^y \partial_t U_{i,j}^y + \mathcal{O}(a_y^2) \quad (3.41)$$

Por último, para a discretização da derivada temporal, usamos o esquema de Euler:

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\psi_n^{t+\Delta t} - \psi_n^t}{\Delta t}, \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial t} = \frac{i}{a_\mu U_{\mu,n}} \frac{U_{\mu,n}^{t+\Delta t} - U_{\mu,n}^t}{\Delta t}, \quad (3.43)$$

onde  $n = i, j$ . Coletando os resultados anteriores, finalmente temos um sistema de equações que podemos usar para calcular as variáveis discretas em cada ponto da grade, nos permitindo fazer uma descrição do comportamento

dos parâmetros envolvidos no fenômeno estudado. Para a primeira equação TDGL temos:

$$\partial_t \psi_{i,j} = \frac{U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j}}{\eta a_x^2} + \frac{U_{i,j}^y \psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1}}{\eta a_y^2} - \frac{1-T}{\eta} (\bar{\psi}_{i,j} \psi_{i,j-1}) \psi_{i,j} \quad (3.44)$$

Para a segunda equação TDGL temos, na componente  $x$ :

$$\partial_t U_{i,j}^x = -i(1-T)U_{i,j}^x \text{Im}(\bar{\psi}_{i,j} U_{i,j}^x \psi_{i+1,j}) - \frac{\kappa^2}{a_y^2} U_{i,j}^x (\bar{L}_{i,j-1} L_{i,j} - 1) \quad (3.45)$$

e na componente  $y$ :

$$\partial_t U_{i,j}^y = -i(1-T)U_{i,j}^y \text{Im}(\bar{\psi}_{i,j} U_{i,j}^y \psi_{i,j+1}) - \frac{\kappa^2}{a_x^2} U_{i,j}^y (\bar{L}_{i,j} L_{i-1,j} - 1). \quad (3.46)$$

### 3.2.3 Discretização da energia livre

Para obtermos a energia livre do sistema discreto, partimos da expressão exata para a densidade de energia livre de Gibbs:

$$\mathcal{G} = |\psi|^2 \left( \frac{1}{2} |\psi|^2 - 1 \right) + \frac{1}{1-T} |(-i\nabla - \vec{A})\psi|^2 + \frac{\kappa^2}{(1-T)^2} \left[ |\nabla \times \vec{A}|^2 - 2\vec{H}_e \cdot (\nabla \times \vec{A}) \right] \quad (3.47)$$

Esta expressão inclui a energia de condensação do estado supercondutor, a energia cinética dos pares de Cooper e a energia do campo magnético. Como feito anteriormente usando as aproximações de diferenças finitas obtemos uma expressão discreta para  $\mathcal{G}$  na célula  $(i, j)$ .

A energia de condensação no supercondutor em duas dimensões pode-se escrever como:

$$\mathcal{G}^{cond} = \int_{SC} (-|\psi|^2 + \frac{1}{2} |\psi|^4) dx dy \quad (3.48)$$

Agora, a aproximação discreta dessa energia leva em conta uma varredura sobre as células da malha, pelo qual se obtém a energia de condensação para

cada célula como a média da energia nos nós de cada célula:

$$\mathcal{G}_{i,j}^{cond} = \frac{1}{4} \sum_{\text{nodos}} (-|\psi_{i,j}|^2 + \frac{1}{2}|\psi_{i,j}|^4) a_x a_y. \quad (3.49)$$

Para o termo da energia cinética pode-se usar a aproximação usada na eq. (3.29). Dessa forma temos que no supercondutor:

$$\mathcal{G}^{cin} = \frac{1}{1-T} \int |(-i\nabla - \vec{A})\psi|^2 dx dy = \frac{1}{1-T} \sum_{\alpha=x,y} \int_{SC} \left| \frac{\partial(U^\alpha \psi)}{\partial \alpha} \right|^2 d\alpha. \quad (3.50)$$

Utilizando a equação (3.26) pode-se obter a forma discreta desse termo de energia, levando em conta a transformação da integral em uma somatória de termos da célula. Para a componente  $x$  temos:

$$\mathcal{G}^{cin} = \frac{1}{1-T} \sum_{\text{nós}} \left| \frac{U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{a_x} \right|^2 a_x a_y, \quad (3.51)$$

com um termo análogo para a componente  $y$ .

O último termo, correspondente à energia do campo, é dado por:

$$\int_{SC} |\nabla \times \vec{A}|^2 - 2\vec{H}_e \cdot (\nabla \times \vec{A}) dx dy = \int_{SC} |B_z|^2 dx dy. \quad (3.52)$$

Esta última integral é discretizada em termos da variável auxiliar  $L_{i,j}$ , relacionada com  $B_z$  pela equação (3.35). Assim, obtemos:

$$\int |\nabla \times \vec{A}|^2 dx dy = \left( \frac{i \ln L_{i,j}}{a_x a_y} \right)^2 a_x a_y. \quad (3.53)$$

Reunindo os termos obtidos anteriormente, chegamos à expressão geral para a energia livre discretizada que é usada no método das variáveis de ligação:

$$\mathcal{G} = \sum_{i,j} \mathcal{G}_{i,j}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{i,j} &= \frac{a_x a_y}{4} \left( \frac{|\psi_{i,j}|^4}{2} - |\psi_{i,j}|^2 + \frac{|\psi_{i+1,j}|^4}{2} - |\psi_{i+1,j}|^2 \right) \\
&+ \frac{a_x a_y}{4} \left( \frac{|\psi_{i+1,j+1}|^4}{2} - |\psi_{i+1,j+1}|^2 + \frac{|\psi_{i,j+1}|^4}{2} - |\psi_{i,j+1}|^2 \right) \\
&+ \frac{a_x a_y}{2(1-T)} \left( \frac{|U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}|^2}{a_x^2} + \frac{|U_{i,j+1}^x \psi_{i+1,j+1} - \psi_{i,j+1}|^2}{a_x^2} \right) \\
&+ \frac{a_x a_y}{2(1-T)} \left( \frac{|U_{i,j}^y \psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}|^2}{a_y^2} + \frac{|U_{i+1,j}^y \psi_{i+1,j+1} - \psi_{i+1,j}|^2}{a_y^2} \right) \\
&+ \frac{\kappa^2 a_x a_y}{(1-T)^2} \frac{i \ln L_{i,j}}{a_x a_y} \left( \frac{i \ln L_{i,j}}{a_x a_y} - 2H_e \right) \tag{3.54}
\end{aligned}$$

onde se leva em conta a energia de condensação do estado supercondutor, observada nos dois primeiros termos. A energia cinética dos pares de Cooper e a energia do campo magnético externo estão presentes nos outros termos.

### 3.2.4 Condição de contorno periódica

Do mesmo modo que numa amostra supercondutora finita a condição de contorno apropriada deve ser satisfeita<sup>5</sup>, ao trabalhar numa célula de simulação de uma amostra de tamanho infinito (muito maior que os comprimentos característicos) é necessário especificar as condições de contorno que o problema apresenta. Neste caso, trabalhamos com uma amostra “infinita”, mas nosso estudo é feito numa célula de simulação de tamanho conhecido. As condições de contorno para a célula de simulação são consideradas periódicas e levam em conta a invariância de calibre do potencial vetor e o parâmetro de ordem observados em (3.5).

Para cumprir a invariância de calibre do problema, as condições periódicas para uma translação do potencial vetor e o parâmetro de ordem numa rede

<sup>5</sup>Nenhuma supercorrente pode passar perpendicular ao limite da amostra, como visto na seção 2.2.2.

têm a forma [53]:

$$\vec{A}(x + a_\mu) = \vec{A}(x) + \nabla\chi_\mu(x), \quad (3.55a)$$

$$\psi(x + a_\mu) = \psi(x) \exp \left[ i \frac{2e}{\hbar c} \chi_\mu(x) \right], \quad (3.55b)$$

onde no caso bidimensional  $\mu = x, y$ . Essas transformações seguem daquelas usadas no desenvolvimento das equações TDGL, transformações (3.5), e dependem da estrutura da rede, que está caracterizada pelos vetores de translação  $a_\mu$  e os potenciais de calibre  $\chi_\mu(x)$  associados com cada vetor  $a_\mu$ . As condições (3.55) estabelecem que uma translação por um vetor de rede mantém a invariância de calibre, ou seja, as transformações em  $\vec{A}$  e  $\psi$  garantem a invariância das equações e, portanto, das grandezas fisicamente mensuráveis, como o campo  $\vec{B}$  e a densidade de pares de Cooper  $|\psi|^2$ .

O potencial vetor para um campo magnético uniforme aplicado na direção  $z$  pode ser expresso na seguinte forma:

$$\vec{A} = \hat{y} \int^x H_z dx = \hat{y} x H_z.$$

Assim, escolhe-se para as transformações (3.55) um potencial de calibre diretamente relacionado com essa forma do potencial vetor. Para uma amostra retangular de área  $L_x \times L_y$  sujeita ao campo externo  $H$ , temos:

$$\chi_x = H L_x y = y \frac{\Phi}{L_y}, \quad \chi_y = 0, \quad (3.56)$$

onde  $\Phi = H \cdot L_x L_y$ . Com a escolha desse potencial as condições de invariância (3.55) para translações na direção  $x$  podem ser escritas como:

$$A_x(x + b_x, y) = A_x(x) + \partial_x \left( \frac{y}{L_y} \Phi \right) = A_x(x), \quad (3.57a)$$

$$A_y(x + b_x, y) = A_y(x) + \partial_y \left( \frac{y}{L_y} \Phi \right) = A_y(x) + \frac{\Phi}{L_y}, \quad (3.57b)$$

e para translações na direção  $y$ :

$$A_x(x, y + b_y) = A_x(x), \quad (3.58a)$$

$$A_y(x, y + b_y) = A_y(x). \quad (3.58b)$$

Para o parâmetro de ordem utilizando o potencial de calibre (3.56), obtemos a seguinte condição de contorno para translações na direção  $x$ :

$$\psi(x + b_x, y) = \psi(x) \exp\left(i2\pi \frac{y}{L_y} \frac{\Phi}{\Phi_0}\right), \quad (3.59)$$

e na direção  $y$ :

$$\psi(x, y + b_y) = \psi(x). \quad (3.60)$$

Utilizando as condições de invariância translacional dadas pelas equações (3.57-3.60) pode-se obter as condições de contorno periódicas para cada eixo. Assim, para a célula de simulação de tamanho  $L_x \times L_y$ , temos na direção  $x$  [54]:

$$A_x(L_x, y) = A_x(0, y), \quad (3.61a)$$

$$A_y(L_x, y) = A_y(0, y) + \frac{\Phi}{L_y}, \quad (3.61b)$$

$$\psi(L_x, y) = \psi(0, y) \exp\left(i2\pi \frac{y}{L_y} n\right), \quad (3.61c)$$

onde  $n$  é o número total de quanta de fluxo presentes no sistema, dado por  $\Phi = n\Phi_0$ . Na direção  $y$  temos:

$$A_x(x, L_y) = A_x(x, 0), \quad (3.62a)$$

$$A_y(x, L_y) = A_y(x, 0), \quad (3.62b)$$

$$\psi(x, L_y) = \psi(x, 0), \quad (3.62c)$$

Pode-se demonstrar que essas condições de contorno respeitam as definições para parâmetros físicos conhecidos. Por exemplo, para uma célula retangular unitária de tamanho horizontal  $L_x$  e tamanho vertical  $L_y$ , se recupera o fluxo magnético ao se fazer uma integral de caminho que satisfaz essas condições de contorno, como pode ser visto a partir da definição de fluxo magnético obtida pelo teorema de Stokes:

$$\Phi = \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}. \quad (3.63)$$

Desenvolvendo essa integral de caminho temos:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_0^{L_x} A_x(x, 0) dx + \int_0^{L_y} A_y(L_x, y) dy - \int_0^{L_x} A_x(x, L_y) dx - \int_0^{L_y} A_y(0, y) dy, \quad (3.64)$$

Substituindo as condições de contorno encontradas anteriormente temos:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_0^{L_y} A_y(0, y) dy + \int_0^{L_y} \frac{\Phi}{L_y} dy - \int_0^{L_y} A_y(0, y) dy, \quad (3.65)$$

pelo qual obtemos nesse caso que:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_0^{L_y} \frac{\Phi}{L_y} dy = \Phi, \quad (3.66)$$

ficando demonstrada a validade das condições de contorno para o potencial vetor.

Pode-se fazer um processo similar para a validade das condições de contorno de  $\psi$ , mostrando que elas levam ao resultado conhecido para a fase do parâmetro de ordem,  $\phi(x, y)$  [21]:

$$\oint \nabla \phi \cdot d\vec{l} = 2\pi n. \quad (3.67)$$

Assim, temos para a amostra que:

$$\oint \nabla \phi \cdot d\vec{l} = \int_0^{L_x} \partial_x \phi(x, 0) dx + \int_0^{L_y} \partial_y \phi(L_x, y) dy - \int_0^{L_x} \partial_x \phi(x, L_y) dx - \int_0^{L_y} \partial_y \phi(0, y) dy. \quad (3.68)$$

Substituindo as condições de contorno para  $\psi$ , neste caso especificamente para a fase, ou seja,  $\phi(L_x, y) = \phi(0, y) + y2\pi\Phi/L_y\Phi_0$ , e  $\phi(x, L_y) = \phi(x, 0)$ , temos que

$$\oint \nabla \phi \cdot d\vec{l} = \int_0^{L_y} \partial_y \phi(0, y) dy + \int_0^{L_y} \frac{2\pi\Phi}{L_y\Phi_0} dy - \int_0^{L_y} \partial_y \phi(0, y) dy, \quad (3.69)$$

$$\oint \nabla \phi \cdot d\vec{l} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} = 2\pi n, \quad (3.70)$$

como esperado, comprovando a validade das condições de contorno para o parâmetro de ordem também.

Agora, as condições de contorno (3.61) e (3.62) devem ser apresentadas numa forma discreta para serem implementadas no método de variáveis de ligação. Como nesse método a invariância de calibre do potencial vetor é dada pelas variáveis auxiliares  $U^x$  e  $U^y$ , a forma discreta dessas equações é dada para o parâmetro de ordem discreto  $\psi_{i,j}$  e essas variáveis auxiliares. Assim, para nossa malha de simulação de tamanho  $N_x \times N_y$ , temos na direção  $x$  finalmente que:

$$U_{(N_x+1,j)}^x = e^{-i \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_x(N_x+1,j) dx} = e^{-i \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_x(1,j) dx}$$

$$U_{(N_x+1,j)}^x = U_{(1,j)}^x \quad (3.71a)$$

$$U_{(N_x+1,j)}^y = e^{-i \int_{y_j}^{y_{j+1}} A_y(N_x+1,j) dy} = e^{-i \int_{y_j}^{y_{j+1}} A_y(1,j) dy} e^{-i \frac{2\pi \alpha_y \Phi}{\Phi_0 L_y}}$$

$$U_{(N_x+1,j)}^y = U_{(1,j)}^y e^{-i \frac{2\pi \alpha_y}{L_y} n} \quad (3.71b)$$

$$\psi_{(N_x+1,j)} = \psi_{(1,j)} \exp(i2\pi n y / L_y), \quad (3.71c)$$

Similarmente na direção  $y$  temos as seguintes condições de contorno:

$$U_{(i,N_y+1)}^x = e^{-i \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_x(i,N_y+1) dx} = e^{-i \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_x(i,1) dx}$$

$$U_{(i,N_y+1)}^x = U_{(i,1)}^x \quad (3.72a)$$

$$U_{(i,N_y+1)}^y = e^{-i \int_{y_j}^{y_{j+1}} A_y(i,N_y+1) dy} = e^{-i \int_{y_j}^{y_{j+1}} A_y(i,1) dy}$$

$$U_{(i,N_y+1)}^y = U_{(i,1)}^y \quad (3.72b)$$

$$\psi_{(i,N_y+1)} = \psi_{(i,1)}, \quad (3.72c)$$

O valor de  $n$  indica o número de quanta de fluxo que penetram na amostra devido ao campo magnético externo. Nesta tese, assumimos  $n = 0$  já que consideramos apenas os casos com campo externo nulo.

Impondo as condições de contorno periódicas (3.71) e (3.72), as quantidades invariantes de calibre, como o módulo do parâmetro de ordem  $|\psi|$  e a densidade de fluxo  $B$ , se tornam periódicas com periodicidade  $L_x$  na direção  $x$  e  $L_y$  na direção  $y$ .

## CAPÍTULO 4

---

### Filme supercondutor interagindo com dipolos magnéticos

---

Neste capítulo, aplica-se as equações TDGL no estudo da criação de pares vórtice-antivórtice numa estrutura híbrida supercondutor-ferromagnética, utilizando o método numérico de variáveis de ligação descrito no Capítulo 3. A estrutura bicamada estudada é formada por uma superfície supercondutora e um filme magnético nanoestruturado, neste caso, uma rede de dipolos magnéticos pontuais com o momento magnético orientado perpendicularmente à superfície. O campo magnético gerado pelos dipolos interage com a superfície supercondutora, gerando a criação de pares de vórtice-antivórtice. A posição destes depende fortemente da posição dos dipolos magnéticos sobre a superfície supercondutora, para o qual variando a distância de separação entre os dipolos e a superfície se tem diferentes arranjos dos anti-vórtices em torno dos vórtices. Esse assunto será o principal objeto de estudo neste capítulo.

## 4.1 Introdução

Nos últimos anos os avanços nas técnicas de microfabricação têm permitido a produção de amostras supercondutoras com redes artificiais de outros materiais, na sua maioria materiais ferromagnéticos, os quais geram uma ancoragem artificial eficiente de vórtices na amostra. O principal interesse no estudo de sistemas híbridos supercondutor-ferromagnéticos é poder estabilizar novas fases de vórtices e assim, conseguir uma melhora nas propriedades do supercondutor, por exemplo aumentando a corrente crítica do material. Esses estudos também têm servido para entender melhor a natureza microscópica da ancoragem de vórtices [55, 56]. Neste campo, têm sido feitos alguns estudos experimentais mostrando esta melhoria nas propriedades das amostras supercondutoras. Na referência [57], Martin *et al* apresentam experimentalmente uma forma de melhorar a ancoragem do fluxo magnético numa amostra supercondutora. Usando técnicas de litografia, é feita uma amostra bicamada de um filme supercondutor e uma rede de pontos magnéticos submicrométricos. Estes pontos são os responsáveis pela ancoragem do fluxo na amostra.

No trabalho de Van Bael *et al* [58], pontos magnéticos foram polarizados em direção paralela à superfície da amostra supercondutora e, mediante microscopia de varredura com pontas de prova Hall (SHPM do inglês scanning Hall probe microscopy), foi mostrado que tal polarização pode gerar a nucleação de pares vórtice-antivórtice. Lange *et al* [59], apresentam medidas de transporte em uma amostra supercondutora com uma rede de nanomagnetos, e sugerem a presença de vórtices e antivórtices gerados no filme supercondutor devido à interação com a rede de pontos ferromagnéticos.

Mais recentemente, foi demonstrado experimentalmente que uma rede de dipolos polarizados paralelamente a um filme supercondutor tem a capacidade de promover a retificação do movimento de vórtices (efeito catraca) [11]. Além disso, a existência de tal efeito, observado em campo externo nulo neste experimento, se manifesta como mais uma evidência da geração de pares V-AV em sistemas híbridos.

As abordagens teóricas deste tipo de amostras têm o objetivo de compreender como a presença da nanoestrutura ferromagnética pode mudar o comportamento dos vórtices em estados de equilíbrio e fora do equilíbrio. Os primeiros trabalhos nessa área consideram a interação de um filme supercondutor com um só dipolo magnético pontual. Na referência [60], se faz o estudo desse sistema partindo da abordagem de London. É mostrado como a co-existência de vórtices e antivórtices na amostra é possível pela presença do dipolo magnético, além de mostrar diferentes tipos de configurações dependentes da posição do dipolo magnético e da sua polarização. Carneiro em [16], faz um estudo similar e é observada a criação de vórtices devido ao dipolo e se encontra a energia de interação dos vórtices com o dipolo magnético. Na referência [61], Carneiro considera um dipolo com orientação livre, ou seja, seu momento magnético pode orientar-se de acordo com a interação com um campo magnético externo. São encontradas configurações de vórtices diferentes daquelas com dipolos permanentes na superfície do filme. Na referência [62], Milosević e Peeters, consideram a interação entre um disco ferromagnético e um filme supercondutor, com o disco polarizado perpendicularmente ao filme. A abordagem é feita partindo da teoria

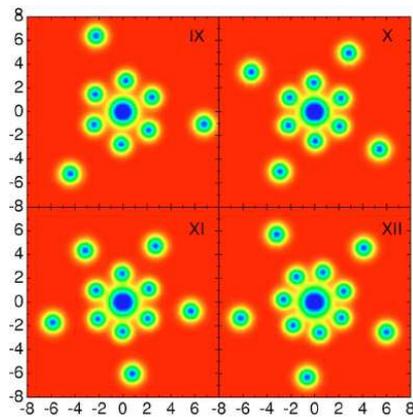


Figura 4.1: Moléculas de vórtices e antivórtices devidas à presença de um disco ferromagnético mostradas em [62]. A cor vermelha corresponde a  $|\psi|^2 = 1$  e a cor azul corresponde a  $|\psi|^2 = 0$ .

de Ginzburg-Landau (GL). Encontra-se que antivórtices são estabilizados ao redor de uma concentração de vórtices embaixo do disco magnético. Assim, os vórtices e antivórtices formam uma molécula de vórtices perto do disco ferromagnético, como mostrado na figura 4.1.

Nas referências [63, 64, 65, 66] é estudado com a abordagem de GL um filme supercondutor coberto com uma rede de magnetos com momento magnético perpendicular à superfície. É encontrado que o campo magnético gerado pelos pontos magnéticos confina os vórtices em regiões onde se encontram os magnetos e rodeados pelos antivórtices, formando padrões regulares devido ao arranjo periódico. Também são encontradas transições nos estados de vórtices-antivórtices devidas à mudanças no sistema, como a periodicidade dos pontos magnéticos e/ou a magnetização desses. Nesses trabalhos se demonstra que a corrente crítica da amostra é aumentada devido às correntes induzidas pelos magnetos no filme.

Uma conclusão importante dos trabalhos até agora expostos é que a interação entre os vórtices e os ferromagnetos resulta da ação do campo magnético não homogêneo criado pelos ferromagnetos no supercondutor. Esta interação não só fixa os vórtices introduzidos no filme por um campo magnético macroscópico, como, pode criar pares vórtice-antivórtice e ainda destruir a supercondutividade em algumas regiões da amostra. Estes mecanismos têm sido pouco estudados para redes de dipolos com momento magnético perpendicular ao filme supercondutor, sendo esta uma motivação para o desenvolvimento deste trabalho.

## 4.2 Dipolos magnéticos pontuais

No magnetismo a existência de pólos magnéticos isolados não tem sido demonstrada experimentalmente. Assim, a estrutura magnética mais simples é o dipolo magnético, caracterizado pelo seu momento de dipolo magnético, ou *momento magnético*, uma quantidade vetorial. Um anel de corrente elétrica muito pequeno é aproximadamente um dipolo magnético pontual; o momento

de dipolo magnético desse anel é o produto da corrente fluindo no anel pela área (vetor) do anel  $\vec{m} = I\vec{a}$ .

Na figura 4.2, observa-se uma amostra híbrida, composta por uma rede periódica de micromagnetos e um filme supercondutor [63]. Quando estes magnetos são pequenos o suficiente, e estão separados de modo que o campo de cada um deles tenha efeitos locais, eles podem ser considerados dipolos pontuais. Desse modo, pode ser experimentalmente observado o efeito de dipolos pontuais em amostras supercondutoras.

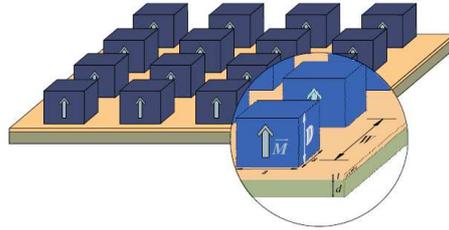


Figura 4.2: Representação de uma amostra híbrida de um filme supercondutor e uma rede de micromagnetos [63].

### 4.2.1 Potencial vetor de um dipolo magnético isolado

Em nosso problema é preciso calcular o potencial vetor produzido por um dipolo magnético localizado na origem do sistema de coordenadas, sobre uma superfície “supercondutora” localizada no plano  $xy$  a uma distância  $d$  embaixo do dipolo magnético, como ilustrado na figura 4.3.

O potencial vetor  $\vec{A}$  de um dipolo magnético a uma distância  $\vec{r}$  do mesmo é dado por:

$$\vec{A}_{dip}(r) = \frac{\vec{m} \times \hat{r}}{r^2}, \quad (4.1)$$

onde  $\vec{m} = m\hat{z}$  é o *momento de dipolo magnético* [67].

Em coordenadas esféricas, com um ângulo  $\theta$  entre  $\vec{m}$  e  $\hat{r}$ , temos o potencial

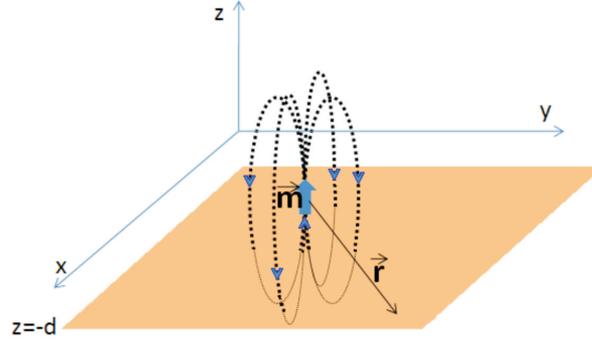


Figura 4.3: Dipolo magnético a uma distancia  $d$  de uma superfície no plano  $xy$ .

num ponto  $(r, \theta, \phi)$  dado por:

$$\vec{A}_\phi = \frac{m \sin \theta}{r^2} \hat{\phi}. \quad (4.2)$$

Para achar o potencial vetor no plano  $xy$ , mudamos para coordenadas cartesianas da forma [68]:

$$A_x = A_\rho \cos \phi - A_\phi \sin \phi,$$

$$A_y = A_\rho \sin \phi + A_\phi \cos \phi,$$

pela simetria deste problema temos que  $\vec{A}_\rho = 0$ , pelo qual:

$$A_x = -A_\phi \sin \phi, \quad (4.3)$$

$$A_y = A_\phi \cos \phi. \quad (4.4)$$

Além disso, temos as seguintes identidades:

$$r^2 = x^2 + y^2 + d^2, \quad (4.5)$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2, \quad (4.6)$$

e as seguintes relações entre os ângulos  $\phi$  e  $\theta$ :

$$\sin \phi = \frac{y}{\rho}, \quad \cos \phi = \frac{x}{\rho}, \quad \sin \theta = \frac{\rho}{r}. \quad (4.7)$$

Usando as relações anteriores nos potenciais (4.3) e (4.4), chegamos à forma:

$$A_x = -\frac{m}{r^2} \left( \frac{y}{r} \right), \quad A_y = \frac{m}{r^2} \left( \frac{x}{r} \right). \quad (4.8)$$

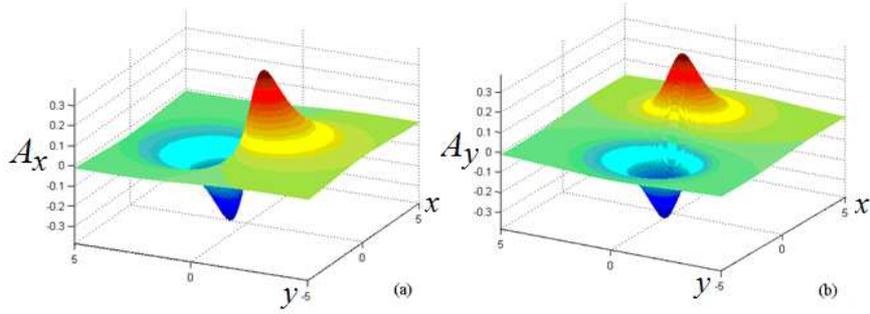


Figura 4.4: (a) Componente  $A_x$  do potencial vetor. (b) Componente  $A_y$  do potencial vetor.

Usando as equações (4.8), mostra-se na figura 4.4 as componentes do potencial vetor no plano  $xy$  devido a um dipolo magnético posicionado uma certa distância  $d$  acima. Com as relações (4.8) pode-se calcular o campo magnético devido ao dipolo magnético na superfície, usando:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}. \quad (4.9)$$

Na figura 4.5 pode-se observar a dependência com as coordenadas  $x$  e  $y$  do campo magnético calculado com a equação (4.9). Este resultado pode ser comparado com o potencial de pinning calculado em trabalhos que discutem esse mesmo problema [16].

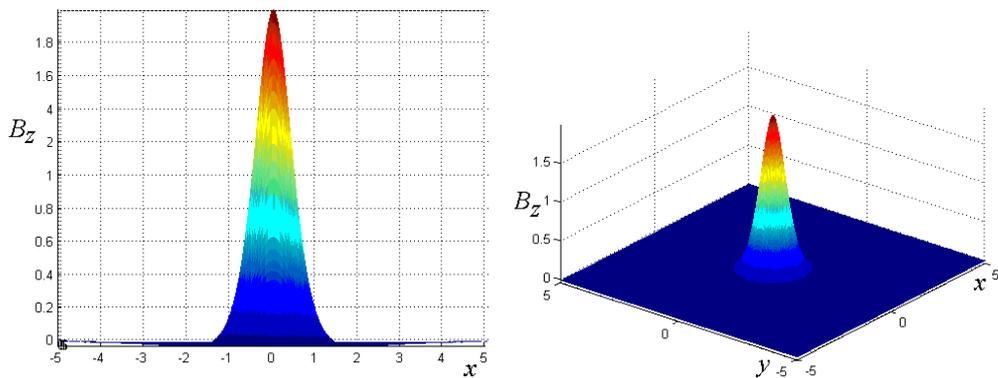


Figura 4.5: Componente  $z$  do campo magnético no plano  $xy$  devido ao dipolo magnético.

### 4.2.2 Potencial vetor devido a uma rede de dipolos

Neste trabalho, estamos interessados na interação de um filme supercondutor com uma rede de dipolos paralela ao filme e a uma distância  $d$  do mesmo. Consideramos que todos os dipolos possuem um momento magnético  $\vec{m}$  direcionado perpendicularmente ao filme, como visto na figura 4.6. Usando os

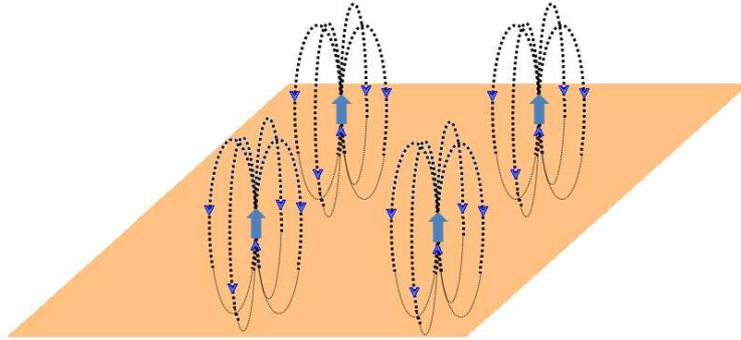


Figura 4.6: Rede de dipolos magnéticos acima de uma superfície supercondutora.

resultados da seção anterior, pode-se calcular as componentes do potencial vetor para essas redes de dipolos magnéticos. Estes dados serão usados como dados iniciais no método de variáveis de ligação, sendo assim importante analisá-los. Para fixar alguns parâmetros, consideramos uma rede quadrada de dipolos separados por uma distância  $a_d = 16\xi(0)$ .

Na figura 4.7 as componentes do potencial vetor e o campo magnético são graficados para diferentes distâncias de separação da rede de dipolos com a superfície. Acima, a separação é de  $d = 1\xi(0)$  e embaixo a separação é de  $d = 10\xi(0)$ . Pode-se observar como a distância de separação influi fortemente na forma do potencial vetor e da componente  $z$  do campo magnético,  $B_z$ . Para uma distância de separação pequena o potencial vetor e o campo têm um caráter local, enquanto que para distâncias de separação maiores o potencial vetor e o campo assumem um caráter coletivo, não sendo possível distinguir o efeito local de cada dipolo. Assim, a distância de separação será um parâmetro fundamental na configuração dos vórtices presentes na amos-

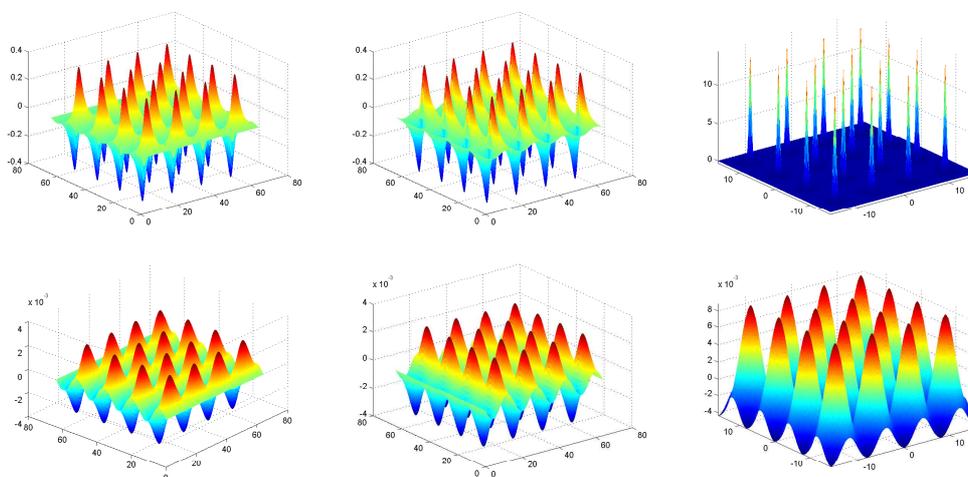


Figura 4.7: *Acima* Simulações para  $d = 1\xi(0)$ , *Embaixo* Simulações para  $d = 10\xi(0)$  *esquerda* Componente  $x$  do potencial vetor, *centro* Componente  $y$  do potencial vetor, *direita* Campo magnético.

tra. Uma característica marcante é o campo magnético negativo intenso observado nas regiões intersticiais da rede de dipolos.

Com esse potencial vetor é possível começar a calcular as configurações de vórtices usando o método de variáveis de ligação, mantendo sempre distâncias pequenas de separação, para poder observar os efeitos locais de cada dipolo magnético.

### 4.3 Detalhes das simulações

Nesta seção vamos mencionar alguns detalhes das simulações feitas neste trabalho. Estes detalhes seguem das características do método numérico usado para resolver as equações TDGL. As amostras estudadas são filmes finos supercondutores, de tamanho infinito. Este filme interage com uma rede de dipolos da forma mostrada na figura 4.6. A análise será feita numa célula unitária com uma rede de dipolos de tamanho conhecido ( $4 \times 4$  ou  $8 \times 8$ ). Sendo a amostra periódica, usamos as condições de contorno descritas pelas equações (3.71) e (3.72). O procedimento numérico é o seguinte:

- A amostra é dividida em uma malha quadrada com  $N_x \times N_y$  células, com um espaçamento entre elas  $a_x = a_y$ . Portanto, como um exemplo, ao trabalhar uma malha de tamanho  $256 \times 256$  células, com um espaçamento entre elas de  $a_x = a_y = 0.25$ , temos como célula unitária um quadrado com dimensões  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$  à qual pode-se associar uma rede de  $4 \times 4$  dipolos magnéticos pontuais.
- As condições iniciais da simulação são dadas para o potencial vetor e o parâmetro de ordem. Assume-se que o filme supercondutor é suficientemente fino e que, portanto, o potencial vetor pode ser aproximado por aquele gerado unicamente pela rede de dipolos e um eventual campo macroscópico externo. Para o parâmetro de ordem, são consideradas duas condições iniciais: a amostra estando em estado supercondutor  $|\psi|^2 = 1$  (simulando um processo de “Zero Field Cooling”), ou a amostra estando em estado normal  $|\psi|^2 = 0$  (simulando um processo de “Field Cooling”). Esta última condição foi adotada na maioria das simulações apresentadas aqui já que foram obtidas configurações de mais baixa energia para este caso.
- A intensidade do momento magnético  $m$  é variada desde 0 até o valor no qual se atinge o estado normal devido ao aumento na intensidade do campo gerado pelos dipolos. O ponto onde se atinge o estado normal, é observado a partir da energia livre calculada em função do momento magnético.
- Para cada valor do momento magnético o sistema é relaxado até encontrar um estado estacionário, o qual pode corresponder a um estado de equilíbrio termodinâmico ou a um estado metaestável. O processo de relaxação é avaliado a partir das mudanças no parâmetro de ordem. Quando, ao longo de um intervalo de 100 passos de integração, a variação relativa (entre o início e o fim do intervalo) da média do parâmetro de ordem for menor que um pequeno valor  $\epsilon$ , considera-se que o sistema entrou num estado de equilíbrio (local ou global) e a simulação é inter-

rompida. Nas simulações aqui apresentadas, adotamos como critério  $\epsilon = 5.0 \times 10^{-6}$ .

Com essas considerações gerais, na seguinte seção são apresentados os resultados obtidos para diferentes simulações do problema estudado.

## 4.4 Resultados

### 4.4.1 Criação e ancoragem de pares vórtice-antivórtice em supercondutores híbridos.

Como método para testar o processo de simulação, trabalhamos com uma malha de simulação de  $256 \times 256$  células, com espaçamento entre células de  $a_x = a_y = 0.25$ . Assim, o tamanho da amostra supercondutora é de  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ . Nesta é colocada uma rede de  $4 \times 4$  dipolos magnéticos, separada a uma distância  $d = 6\xi(0)$  da superfície supercondutora. Encontra-se que os dipolos magnéticos induzem na superfície supercondutora a nucleação de pares vórtice-antivórtice(V-AV), como pode ser observado na Figura 4.8. Aqui observa-se uma série de degraus, os quais indicam a nucleação de um,

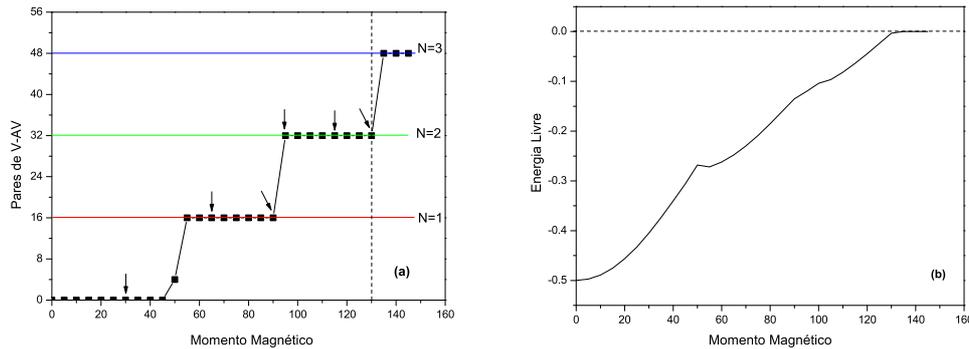


Figura 4.8: (a) Pares de (V-AV) e (b) Energia livre em função do momento magnético, para uma amostra de  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$  para  $T = 0.9T_c$  e  $d = 6\xi(0)$ . As setas indicam os estados a serem estudados posteriormente (Fig. 4.9).

dois, e três pares V-AV por dipolo magnético respectivamente (O terceiro par é nucleado além do estado supercondutor). Na figura 4.8(b), observa-se também a energia livre do sistema calculada a partir da equação 3.54. A energia é negativa por ser ela a diferença entre a energia de estado normal e a energia do estado supercondutor. Para  $m > 135$  a supercondutividade é suprimida na superfície da amostra, devido ao aumento no momento magnético dos dipolos.

Na Figura 4.9, mostra-se as configurações obtidas para a distribuição do módulo do parâmetro de ordem, o qual é uma medida da densidade de pares de Cooper ( $|\psi| = \sqrt{n_s}$ ), para os valores do momento magnético aplicado indicados com setas na figura 4.8(a). As regiões azuis e vermelhas representam

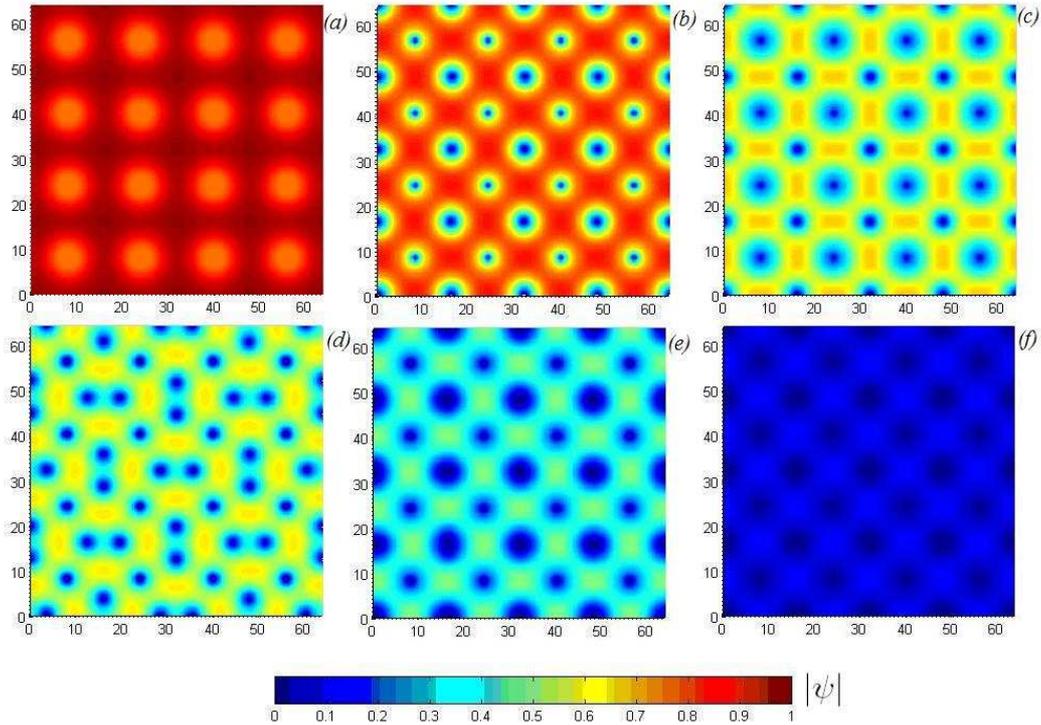


Figura 4.9: Módulo do parâmetro de ordem para uma célula unitária de lados  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ ,  $T = 0.9T_c$  e  $d = 6\xi(0)$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados: (a)  $m = 30$ , (b)  $m = 65$ , (c)  $m = 90$ , (d)  $m = 95$ , (e)  $m = 115$ , (f)  $m = 130$ . Os cores indicam: *Vermelho*  $|\psi| = 1$ , *Azul*  $|\psi| = 0$ .

valores do módulo do parâmetro de ordem desde 0 até 1. Seguindo o comportamento observado na figura 4.8, para momentos menores que  $m = 55$  a amostra permanece no estado Meissner, em estados como o observado na figura 4.9(a), onde a supercondutividade é enfraquecida pelas correntes induzidas pelo fluxo magnético dos dipolos, mas ainda não altas o suficiente para gerar um par V-AV; para momentos magnéticos  $55 < m < 90$  encontramos a entrada de um par V-AV por cada dipolo,  $N = 1$ , com um estado como observado em 4.9(b),  $m = 65$ , e (c),  $m = 90$ . Em (b) a posição dos dipolos é dada pelos círculos brancos. As regiões normais na amostra (regiões azuis) definem a posição dos vórtices e dos antivórtices na amostra. Pela orientação do campo magnético gerado pelo dipolo, embaixo destes ficam aprisionados os vórtices, enquanto os anti-vórtices se posicionam nas regiões intersticiais da rede de dipolos<sup>1</sup>.

Para  $m = 95$ , temos uma entrada do segundo par de V-AV,  $N = 2$ , como observado em 4.9(d). Neste caso o momento magnético ainda é fraco o suficiente para manter os AV separados em torno dos pontos intersticiais da rede de dipolos. O estado  $N = 2$  se mantém até  $m = 130$ , porém, perto deste valor, o campo tem intensidade alta o suficiente para juntar os AV na interseção da rede de dipolos, como visto em 4.9(e). Em  $m = 130$  se tem um salto ao estado  $N = 3$ . Neste ponto, o arranjo de vórtices fica cada vez mais denso à medida que o momento magnético aumenta e, como visto a partir da figura da energia 4.8(b), a supercondutividade começa a desaparecer na amostra, dando lugar ao estado normal.

Na Figura 4.9(e) não fica claro o estado de pares V-AV que se apresenta na amostra. Uma técnica para melhorar a resolução nestas situações, é visualizar o logaritmo do parâmetro de ordem, como visto na figura 4.10(a), e também olhar a mudança na fase do parâmetro de ordem. Na figura 4.10(b) para uma trajetória fechada, uma mudança de vermelho para azul no sentido horário, ocorre uma mudança de  $\Delta\phi = 2\pi$ , que indica a presença de

---

<sup>1</sup>Tal configuração é diferente para distâncias de separação menores entre o dipolo e a amostra como será visto mais adiante.

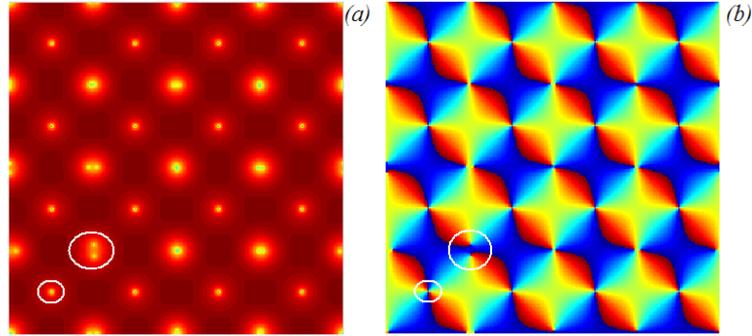


Figura 4.10: (a) Logaritmo do parâmetro de ordem (b) Mudança de fase, para uma célula unitária de lados  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ ,  $T = 0.9T_c$  e  $d = 6\xi(0)$ . *Círculo menor* Posição dos Vórtices, *Círculo maior* Posição dos Antivórtices.

um quantum de fluxo, um vórtice. E uma mudança de azul para vermelho nesse mesmo sentido indica uma mudança de  $\Delta\phi = -2\pi$ , localizando um antivórtice nessa posição. Na figura 4.10 o círculo branco menor localiza a posição dos vórtices, enquanto o círculo maior localiza a posição de antivórtices. Desta forma verifica-se que para a figura 4.9(e) se tem um estado  $N = 2$  como visto na figura 4.8(a). Esta técnica será usada mais adiante para verificar a posição dos pares V-AV nos casos em que a resolução não permita visualizá-los claramente. A eficácia do método numérico utilizado é testada comparando qualitativamente os resultados obtidos com os trabalhos feitos em sistemas similares. Kim e colaboradores [65], reportam a criação de pares de V-AV devido ao campo de um dipolo magnético vertical acima do filme. Similarmente ao nosso caso, Kim et al. reporta a nucleação de pares de V-AV devido a cada dipolo magnético, reportando  $N = 2$  e  $N = 3$  para uma distância de separação de  $d = 3, 5\xi$ , onde, nesse caso, os AV ficam diretamente embaixo dos dipolos, devido à orientação do dipolo. Priour e Fertig [66] reportam estados de vórtices no mesmo sistema. Eles reportam estados de  $N = 2, 3, 4$  para diferentes valores de intensidade do momento magnético. Eles reportam os vórtices ocupando uma só posição diretamente embaixo dos dipolos magnéticos, e os AV ocupando diferentes regiões em torno dos vórtices, como visto em nosso trabalho.

## Configuração não convencional de pares V-AV

Entre as simulações feitas para testar o método, destacamos aquela em que os estados de pares V-AV se posicionam de uma maneira não convencional. A configuração obtida segue da simulação mostrada na figura 4.11. Aqui pode-se observar como se tem um salto do estado  $N = 2$  para o estado  $N = 4$ , sendo este último estado o que apresenta uma formação não convencional dos vórtices e antivórtices. As configurações de pares V-AV obtidas

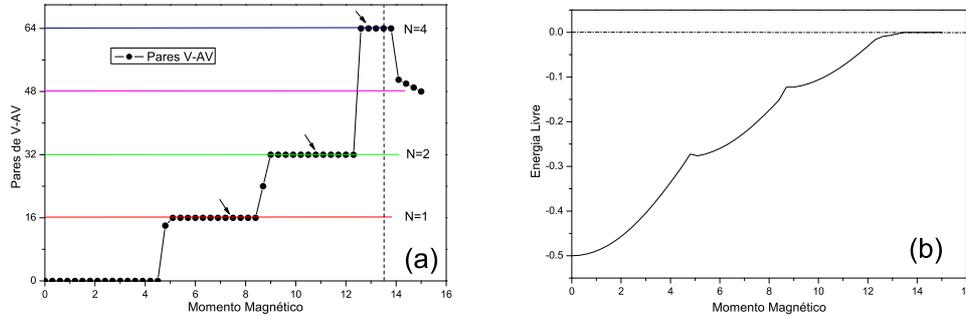


Figura 4.11: (a) Número de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) em função do momento magnético, (b) Energia livre em função do momento magnético, para uma amostra de  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$  para  $T = 0.9T_c$  e  $d = 4\xi(0)$ .

para os estados indicados em 4.11(a) para  $N = 1$  e  $N = 2$  são observadas em 4.12. Pode-se observar que seguem o comportamento observado na amostra anterior, (ver figura 4.10). Observa-se na fig. 4.12 (*esquerda*) a nucleação de um par de V-AV. Visto de maneira mais fácil na mudança da fase do parâmetro de ordem, figura 4.12(c). Da mesma forma para 4.12 (*direita*) pode-se observar a nucleação de dois pares V-AV.

A configuração de pares V-AV não convencional ocorre para o estado  $N = 4$  indicado na figura 4.11(a). Ilustramos esse estado na figura 4.13. A característica não convencional deste estado, observado nesta figura, é que a partir de 4.11(a), pode-se ter certeza que trata-se de um estado  $N = 4$ , mas

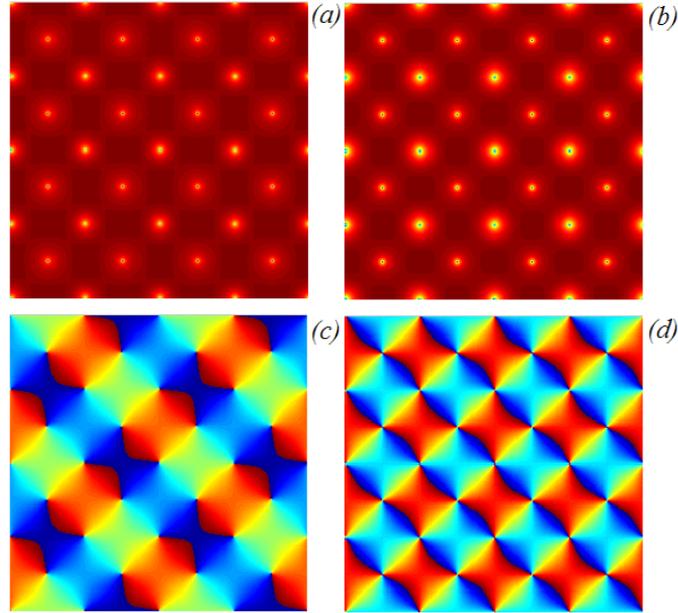


Figura 4.12: Logaritmo do módulo  $\psi$  para uma amostra de lados  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 4\xi(0)$ , para (a)  $m = 7.5$  e (b)  $m = 11.1$ . Mudança na fase de  $\psi$  para os mesmos valores (c)  $m = 7.5$ , (d)  $m = 11.1$ .

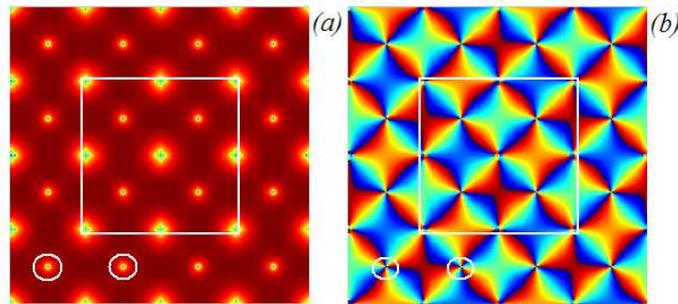


Figura 4.13: (a) Logaritmo do módulo  $\psi$  para o estado  $N = 4$  ( $m=12.9$ ) da amostra de lados  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 4\xi(0)$ . (b) Mudança na fase de  $\psi$  para o estado  $N = 4$  da mesma amostra.

ao observar a configuração em 4.13(b), vemos como, na posição dos vórtices, indicada pelos círculos brancos, se tem uma mudança na fase de  $\Delta\phi = 6\pi$ , o que indicaria uma vorticidade  $N = 3$  nessa posição, fato que contraria os resultados em 4.11(a).

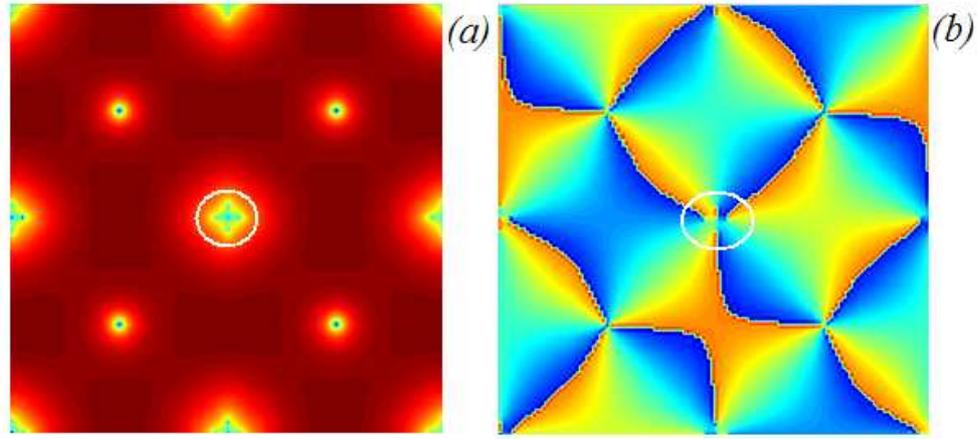


Figura 4.14: Ampliação do estado  $N = 4$  ( $m=12.9$ ) da amostra de lados  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 4\xi(0)$ . (a) Logaritmo de  $\psi$  (b) Mudança na fase de  $\psi$ .

A resposta para esta contradição está na figura 4.14, na qual a configuração para este estado pode ser analisada mais de perto. Esta figura corresponde à região destacada na figura 4.13. Na figura 4.14 temos nos círculos brancos as posições dos antivórtices. Nesta posição temos mais um par V-AV. Assim, embaixo dos dipolos, temos 3 vórtices, mas na posição intersticial, descrita pelos círculos brancos, temos uma variação da fase de  $-8\pi + 2\pi$  indicando a presença de um vórtice entre um conjunto de quatro antivórtices. Claramente, tal configuração é induzida pela simetria quádrupla da rede de dipolos como uma tentativa de minimizar a energia do sistema.

#### 4.4.2 Nucleação de pares V-AV dependente da distância

Para estudar a influência da distância de separação entre a rede de dipolos e a superfície supercondutora, nesta seção estudamos um sistema maior que o estudado anteriormente: uma célula de simulação de tamanho  $128\xi(0) \times 128\xi(0)$  com uma rede  $8 \times 8$  de dipolos magnéticos.

**Distância de separação  $12\xi(0)$ .** Na Figura 4.15, observa-se a nucleação de até  $N = 5$  pares V-AV por dipolo, antes de atingir o estado normal,

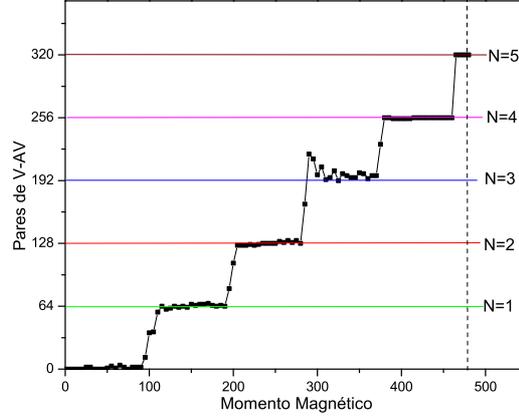


Figura 4.15: Número de pares de vórtice-antivórtice (V-AV) em função do momento magnético para uma amostra de  $128\xi(0) \times 128\xi(0)$  para  $T = 0.88T_c$  e  $d = 12\xi(0)$ .

limitado pela linha vertical. Observa-se que na região de  $m$  em que  $N \approx 3$  há um grande ruído, o que se deve ao fato de que pela simetria do problema, podem se apresentar configurações não convencionais como as mostradas na Fig. 4.14 para este estado. Para distinguir estes estados, adotamos a seguinte notação:  $(3, -4 + 1)$ , significando 3 vórtices sob os dipolos e 4 AV rodeando 1 vórtice na região intersticial. Tal configuração é diferente das configurações  $(3, -3)$ , para  $N = 3$ , e  $(4, -4)$  para  $N = 4$ , encontradas em outras simulações. Embora o número de pares por dipolo para a configuração  $(3, -4 + 1)$  seja  $N = 4$ , tal configuração é energeticamente mais próxima da configuração  $(3, -3)$ , visto que o par V-AV na região intersticial tem uma distância muito pequena. Assim, a proximidade energética entre as configurações  $(3, -4 + 1)$  e  $(3, -3)$  torna difícil ao sistema “escolher” entre uma configuração e outra. Por este motivo, observa-se um estado que na verdade é uma mistura entre as duas configurações, totalizando, portanto um valor de  $N$  intermediário entre  $N = 3$  e  $N = 4$ .

Na Figura 4.16, seguindo o comportamento mostrado na figura 4.15, observa-se a nucleação de pares V-AV para a amostra de  $128\xi(0) \times 128\xi(0)$ .

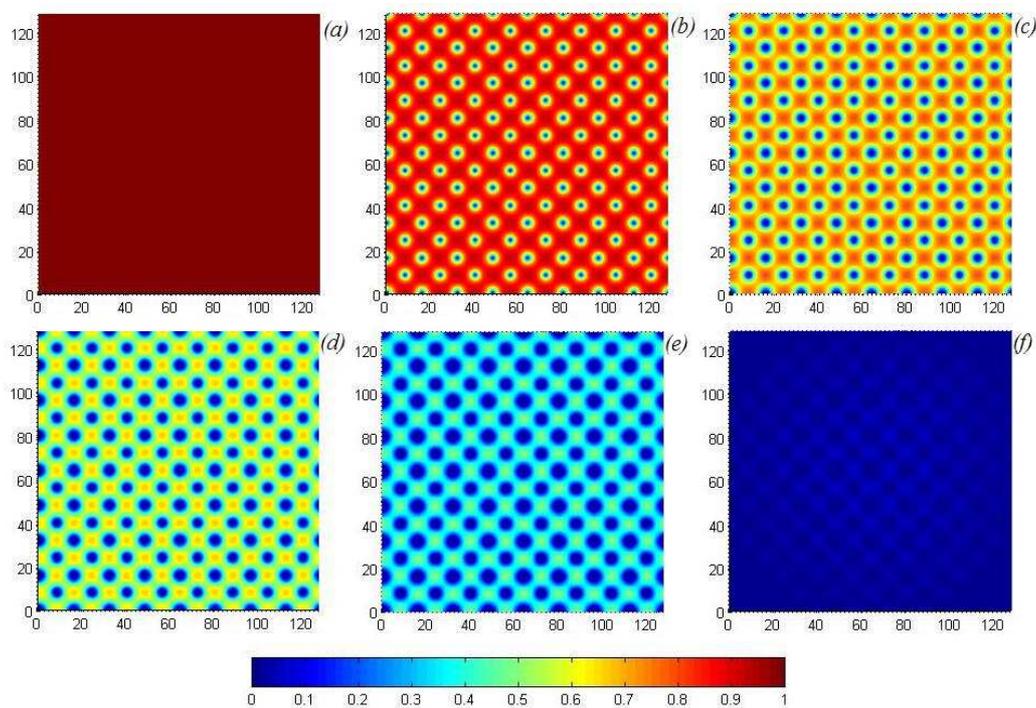


Figura 4.16: Módulo do parâmetro de ordem para uma célula unitária de lados  $128\xi(0) \times 128\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 12\xi(0)$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados: (a)  $m = 0$ , (b)  $m = 115$ , (c)  $m = 240$ , (d)  $m = 320$ , (e)  $m = 380$ , (f)  $m = 480$ . A magnitude do parâmetro de ordem é dada pela barra de cores.

Em 4.16(a) a amostra está no estado Meissner e depois, respectivamente, ocorre a nucleação de  $N = 1$ ,  $N = 2$ ,  $N = 3$ ,  $N = 4$  e  $N = 5$ . Nessa

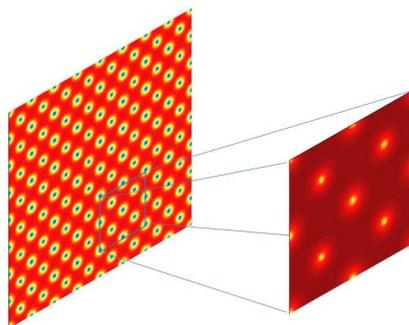


Figura 4.17: Região de análise para o estudo da nucleação de pares V-AV dependente da distância.

figura, observa-se como a nucleação varia com os vórtices embaixo dos dipolos magnéticos, e os antivórtices neste caso, para todas as configurações, se encontram nas regiões intersticiais da rede de dipolos. Também é possível perceber nessa figura como, ao aumentar a intensidade do momento magnético, a densidade de pares de Cooper diminui de maneira contínua até chegar na configuração 4.16(f) onde se tem a transição final para o estado normal.

A figura 4.16 permite fazer uma descrição do processo que ocorre na amostra enquanto se aumenta a intensidade do momento magnético. Porém, não é possível distinguir a configuração dos pares V-AV na amostra. Sendo a amostra muito grande, focamos numa região da amostra e melhoramos a resolução nessa região para, dessa forma, poder determinar as configurações dos pares. Aplicando esta idéia, observamos o que acontece nessa amostra, numa região específica. Assim, tomamos uma região de tamanho  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$  e apresentamos o *logaritmo* do parâmetro de ordem, como se mostra na figura 4.17.

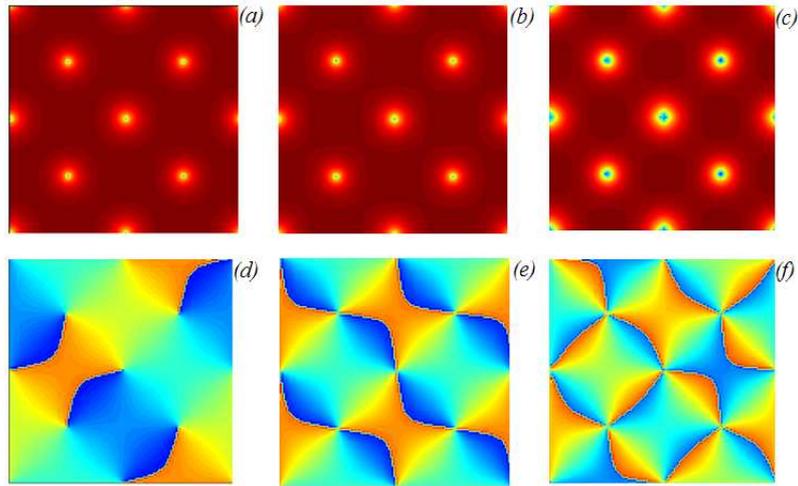


Figura 4.18: Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem para uma célula de lados  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 12\xi(0)$ , para diferentes momentos magnéticos aplicados: (a)  $m = 115$ , (b)  $m = 240$ , (c)  $m = 320$ . Mudança na fase do parâmetro de ordem para os mesmos valores (d)  $m = 115$ , (e)  $m = 240$ , (f)  $m = 320$ .

Na Figura 4.18, observa-se as configurações obtidas para os valores  $m =$

115,  $m = 240$  e  $m = 320$  fazendo a mudança descrita anteriormente na célula de simulação. Observando o módulo do parâmetro de ordem  $|\psi|$ , nas figuras 4.18(a), (b) e (c), não é possível distinguir o número de pares V-AV, somente a sua posição na amostra. Mas, a partir da fase do parâmetro de ordem,  $\phi$ , é possível visualizar o número de pares V-AV presentes na amostra. Os valores da fase próximos a zero são dados por regiões azuis e próximos a  $2\pi$  por regiões vermelhas.

A fase nos permite determinar o número de vórtices em uma determinada região, através do cálculo da variação da fase em um caminho fechado contornando essa região. Se a vorticidade nessa região é  $N$ , então a fase muda por um valor  $\Delta\phi = 2\pi N$ . A partir das mudanças na fase vistas nas figuras 4.18(d), (e) e (f), sabemos que para (d)  $m = 115$ , nas posições embaixo dos dipolos, temos uma mudança de vermelho para azul no sentido horário, o que corresponde a um vórtice, e no ponto intersticial, uma mudança de azul para vermelho nesse sentido, o que corresponde a um anti-vórtice. Para (e)  $m = 240$  existe uma variação na fase embaixo de cada dipolo igual a  $\Delta\phi = 4\pi$ , já que existem duas transições de vermelho para azul, e nos interstícios, de  $\Delta\phi = -4\pi$ . Assim, para (e) temos  $N = 2$  vórtices embaixo dos dipolos e  $N = 2$  anti-vórtices nas intersecções. Em (f) temos a mesma situação, mas com  $N = 3$  pares de V-AV por cada dipolo.

Na Figura 4.19 observam-se da mesma forma os valores de  $|\psi|$  e  $\Delta\phi$  para os casos  $N = 4$  e  $N = 5$ . Neste caso é possível a partir de  $\psi$  fazer o estudo do número e posição dos pares V-AV presentes na amostra, e confirma-se com as figuras da fase. As configurações que se apresentam para estes valores de intensidade de  $m$  são particularmente interessantes. Devido ao fluxo do campo magnético na amostra, sendo positivo embaixo dos dipolos, os vórtices se posicionam nesta região, enquanto os anti-vórtices se posicionam nos interstícios da rede de dipolos devido ao fluxo negativo nesta região.

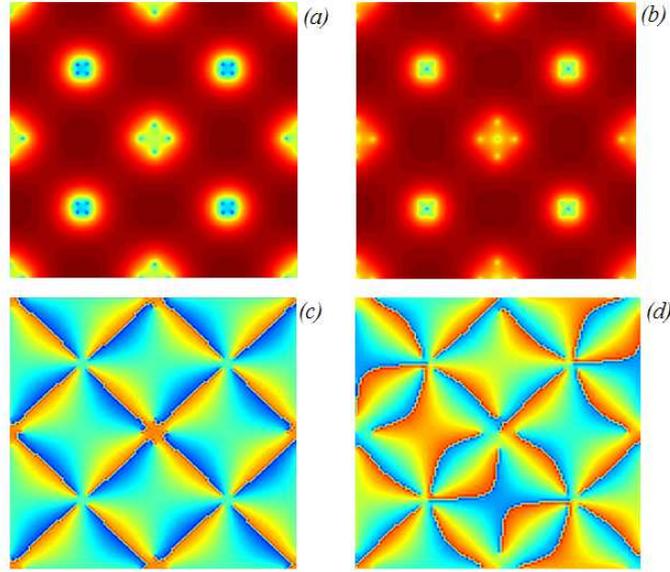


Figura 4.19: Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem para uma célula de lados  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 12\xi(0)$ , para (a)  $m = 380$ , (b)  $m = 480$ . Mudança na fase do parâmetro de ordem para os mesmos valores (c)  $m = 380$  e (d)  $m = 480$ .

**Distância de separação  $4\xi(0)$ .** Para estudar o que acontece ao diminuir a distância de separação, estudamos o sistema anterior, rede de  $128\xi(0) \times 128\xi(0)$  com uma rede de  $8 \times 8$  dipolos, e reduzimos a distância de separação para  $4\xi(0)$ . Nesse caso, como pode-se observar na Figura 4.20, temos uma mudança notável no comportamento de  $N = 2$ , já que a proximidade do dipolo com a superfície permite visualizar a separação dos dois anti-vórtices que ficam no interstício, Figura 4.20(a). Em (b) o estado  $N = 3$  só fica claro observando a mudança na fase de  $\psi$ . Os estados  $N = 4$  e  $N = 5$ , não são apresentados nesta figura já que são semelhantes àqueles para a distância de separação  $12\xi(0)$ . Também é importante observar a diferença drástica na diminuição dos valores de momento magnético nos quais se atinge esses estados, com relação aos valores de  $m$  necessários para atingir  $N = 2$  e  $N = 3$  para  $d = 12\xi(0)$ , observados na figura 4.15.

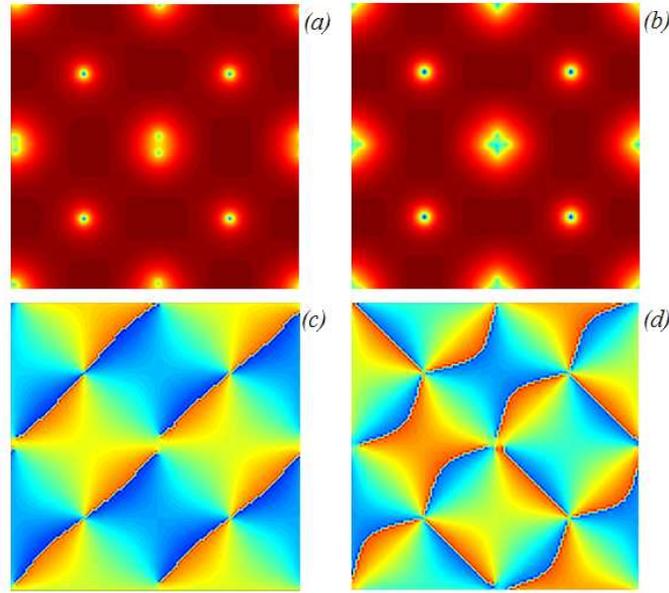


Figura 4.20: Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem para uma célula de lados  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 4\xi(0)$ , para (a)  $m = 10$ , (b)  $m = 13$ . Mudança na fase do parâmetro de ordem para os mesmos valores (c)  $m = 10$  e (d)  $m = 13$ .

**Distância de separação  $2\xi(0)$ .** Uma mudança drástica na configuração dos pares V-AV é observada com a redução da distância de separação para  $2\xi(0)$ . Na Figura 4.21 observamos os estados  $N = 1$  e  $N = 2$ . Para(a) e (b) observa-se o módulo do parâmetro de ordem (em azul,  $|\psi| = 0$ , em vermelho  $|\psi| = 1$ ). Em (a),  $N = 1$ , observamos como a nucleação do primeiro par V-AV se faz diferente em relação aos estados estudados anteriormente. Os vórtices se mantêm ocupando as posições embaixo dos dipolos, mas agora os anti-vórtices não procuram os interstícios. Ao contrário, os AV ficam em posições perto dos vórtices, devido à redução do alcance da força proveniente do dipolo. Assim, o par V-AV para cada dipolo se encontra de forma *localizada* embaixo do dipolo. Para 4.21(b),  $N = 2$ , os pares de vórtices encontram-se de forma localizada, mas a força de repulsão entre os anti-vórtices os separa dos vórtices. No entanto, os antivórtices não ocupam os interstícios da rede de dipolos, mas sim uma posição média entre dois dipolos vizinhos, em forma

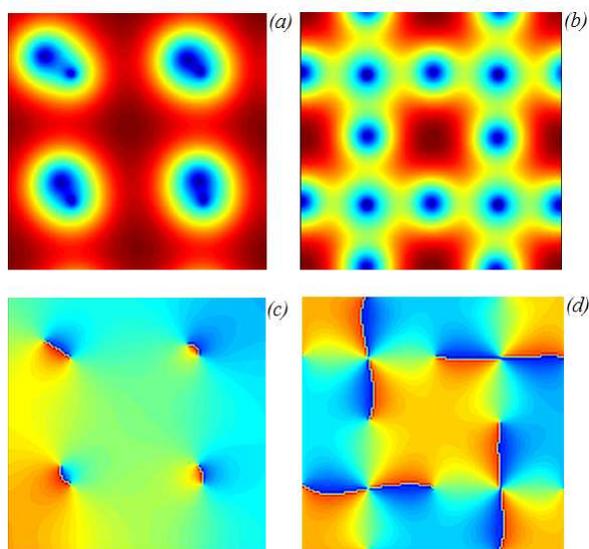


Figura 4.21: Módulo do parâmetro de ordem para uma célula de lados  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 2\xi(0)$ , para (a) $m = 2$ , (b) $m = 4$ . Mudança na fase do parâmetro de ordem para os mesmos valores (c) $m = 2$  e (d) $m = 4$ .

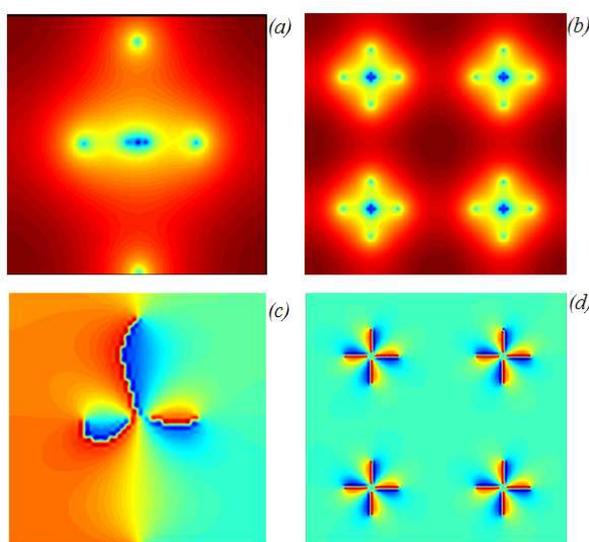


Figura 4.22: Logaritmo do módulo do parâmetro de ordem para uma célula de lados  $32\xi(0) \times 32\xi(0)$ ,  $T = 0.88T_c$  e  $d = 2\xi(0)$ , para (a) $\vec{m} = 5$ , (b) $\vec{m} = 6$ . Mudança na fase do parâmetro de ordem para os mesmos valores (c) $\vec{m} = 5$  e (d) $\vec{m} = 6$ .

horizontal e vertical, formando uma rede periódica de V e AV diferente da formada para distâncias de separação maiores. Em 4.21(c) e (d) se confirmam as configurações vistas por meio das mudanças na fase de  $\psi$ . Na Figura 4.22, observam-se igualmente os estados localizados para  $N = 3$  e  $N = 4$  pares V-AV a partir do logaritmo do módulo de  $\psi$  e da fase  $\Delta\phi$ .

## 4.5 Fases de anti-vórtices localizados e deslocados

Do estudo feito anteriormente pode-se concluir que existem duas fases para a presença dos pares de V-AV na amostra híbrida. Uma fase *localizada* (os anti-vórtices encontram-se “ligados” aos vórtices) para distâncias de separação

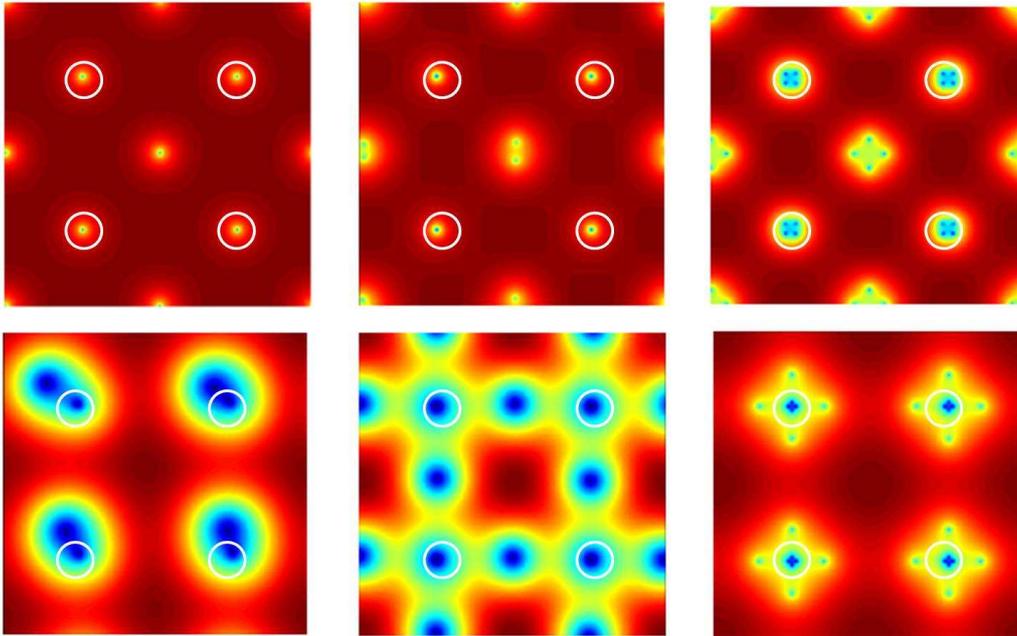


Figura 4.23: *Acima.* Fase *deslocalizada* dos pares de V-AV para  $d > 2\xi(0)$ . *Embaixo.* Fase *localizada* dos pares de V-AV para  $d = 2\xi(0)$ . De esquerda para direita:  $N = 1, N = 2$  e  $N = 4$ . Os círculos brancos indicam as posições dos dipolos magnéticos.

pequenas. É uma fase que chamaremos de *deslocalizada* (os anti-vórtices agora encontram-se “desligados” dos vórtices) para distâncias de separação maiores. Na figura 4.23 observa-se essas fases comparativamente para estados  $N = 1$ ,  $N = 2$  e  $N = 4$  estudados na seção anterior (recompilação das figuras 4.18,4.19,4.20,4.21,4.22). Acima a fase deslocalizada para distâncias grandes, e embaixo a fase localizada para distâncias pequenas. Nas duas fases os vórtices se posicionam embaixo dos dipolos magnéticos, indicados pelos círculos brancos na Figura 4.23. Entretanto, dependendo da distância de separação entre o filme e a rede de dipolos e da força de repulsão entre os AV, estes se posicionam de diferentes formas, encontrando-se na fase localizada ou deslocalizada.

#### 4.5.1 Diagrama de fases dos pares V-AV

Como método para distinguir as duas fases apresentadas neste estudo, construímos um diagrama de fases que permita diferenciar estas duas fases para um dado conjunto de parâmetros, (ver Figura 4.24). Neste caso, estudaremos uma amostra de  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , na qual posicionamos uma rede de  $4 \times 4$  dipolos magnéticos. O motivo para usar este tamanho de amostra e não a rede  $8 \times 8$  da seção anterior é o grande tempo de computação que requer trabalhar com amostras maiores. Para esta amostra, estudaremos a evolução das configurações de vórtices e antivórtices em função da distância de separação entre a rede de dipolos e a superfície do filme supercondutor e do momento magnético dos dipolos.

O resultado é mostrado na Figura 4.24, onde pode-se observar que ao diminuir a distância de separação, começando com uma distância de  $4\xi(0)$  até uma distância perto de  $\xi(0)$ , os valores de intensidade de momento magnético necessários para atingir a nucleação de vórtices diminuem. Isto devido a que o campo magnético gerado pelos dipolos é sentido no filme supercondutor de maneira mais forte quando os dipolos encontram-se mais perto dele. Assim, não é preciso uma intensidade forte no momento magnético dos dipolos para gerar o estado de vórtices e a nucleação dos pares de V-AV na amostra. Por

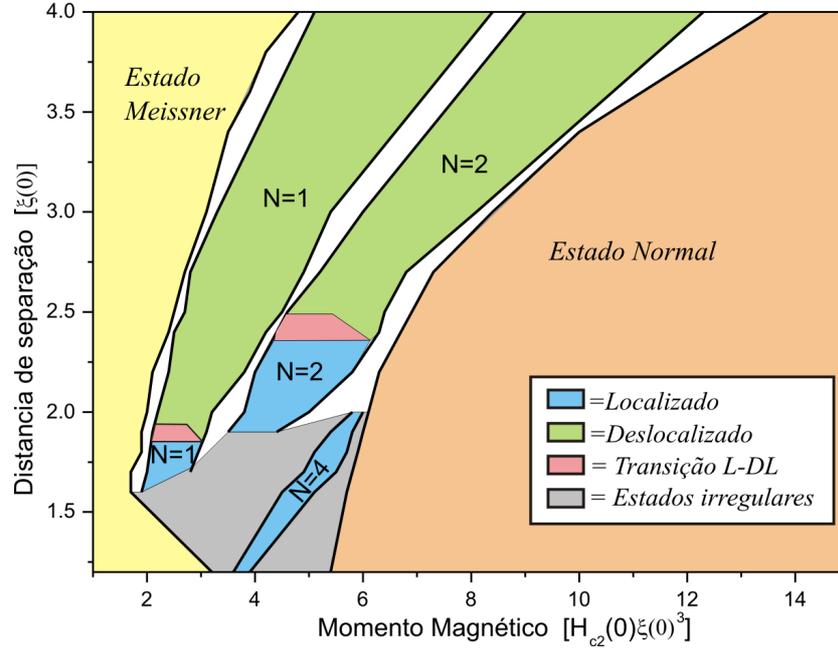


Figura 4.24: Diagrama de fases para os pares de V-AV numa amostra de  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$  com uma rede  $4 \times 4$  de dipolos magnéticos pontuais.

outro lado, para distâncias próximas de  $\xi(0)$  o fluxo gerado por um dipolo fica concentrado numa escala  $\lesssim \xi(T)$ , de modo a tornar difícil a nucleação de pares. Assim, um valor maior de  $m$  é necessário para nuclear um par quando  $d \simeq \xi(0)$ .

Nesta amostra, como visto anteriormente, para as distâncias de separação  $d$  maiores,  $d > 1,9\xi(0)$  para  $N = 1$  e  $d > 2,5\xi(0)$  para  $N = 2$ , a distribuição dos pares vórtice-antivórtice (V-AV) se dá de maneira deslocalizada. Ao sair do estado Meissner, primeiro se atinge o estado de um par de V-AV por cada dipolo magnético ( $N=1$ ), e depois, com o aumento no momento magnético dos dipolos, se consegue atingir o estado ( $N=2$ ), para depois chegar no estado normal. A mudança entre os estados Meissner,  $N = 1$ ,  $N = 2$  e o estado normal, não se faz de maneira instantânea. Existem estados intermediários, representados pelas regiões brancas da Figura 4.24, que correspondem a uma mistura entre os estados vizinhos de  $N$  inteiro. Por exemplo, entre os esta-

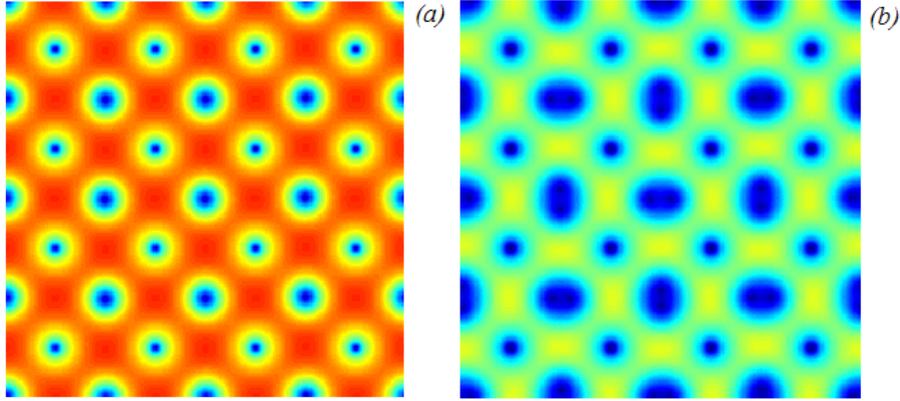


Figura 4.25: Configurações de vórtices para  $d = 3\xi(0)$  na amostra estudada para: (a)  $m = 4.2$  e (b)  $m = 6.6$ .

dos  $N = 1$  e  $N = 2$  existem estados onde algumas células unitárias da rede de dipolos possuem um par V-AV enquanto outras células são ocupadas por dois pares V-AV. Os estados deslocalizados podem ser observados na Figura 4.25, onde apresentamos os estados do diagrama de fases para a distância de separação  $d = 3\xi(0)$ . Como pode-se ver, tanto para  $N = 1$  como para  $N = 2$ , temos que os anti-vórtices estão ocupando as posições intersticiais entre 4 dipolos, pelo qual estão desligados dos vórtices, assim, ficando com uma configuração na chamada fase deslocalizada. Tal configuração é observada em toda a região de distâncias na fase deslocalizada mostrada no diagrama de fases da Figura 4.24.

Seguindo a diminuição da distância de separação, nos encontramos com uma pequena região de *transição* no diagrama de fases. Esta região separa as configurações deslocalizadas das localizadas que se apresentam para distâncias menores. Nesses estados, a força de repulsão entre os AV está competindo com a força de atração natural que eles sentem com os vórtices. A diferença entre as duas forças é tão pequena que os antivórtices ficam num estado intermediário entre os estados deslocalizados e localizados, criando configurações como as que podem ser vistas na Figura 4.26.

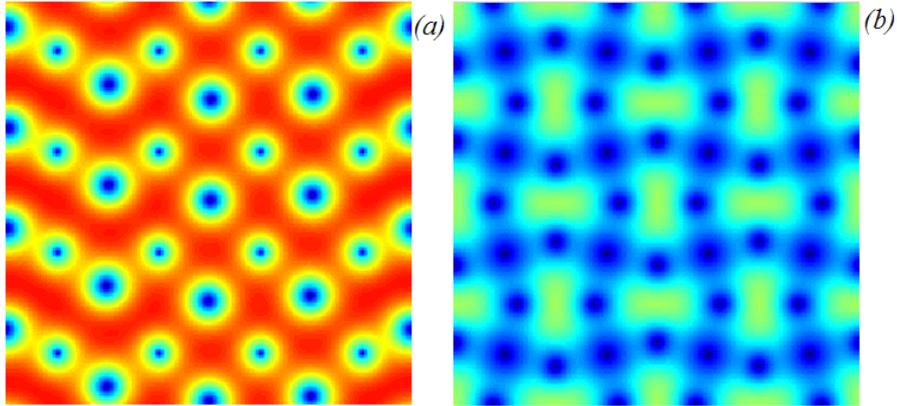


Figura 4.26: Configurações de pares de V-AV para os estados de transição em: (a)  $d = 1.8\xi(0)$  e  $m = 2.2$ ; (b)  $d = 2.4\xi(0)$  e  $m = 5.6$ ;

Abaixo do estado de transição, com  $d < 1,8\xi(0)$  para  $N = 1$  e  $d < 2,4\xi(0)$  para  $N = 2$ , entramos na fase localizada, ver Figura 4.27. Neste ponto, as configurações que se obtêm provêm de que os anti-vórtices ficam ligados aos vórtices, posicionados embaixo de cada dipolo magnético. Esta fase localizada se mantém para distâncias abaixo de  $1.8\xi(0)$ . Porém, não é possível definir muito bem os limites deste estado, assim como do estado

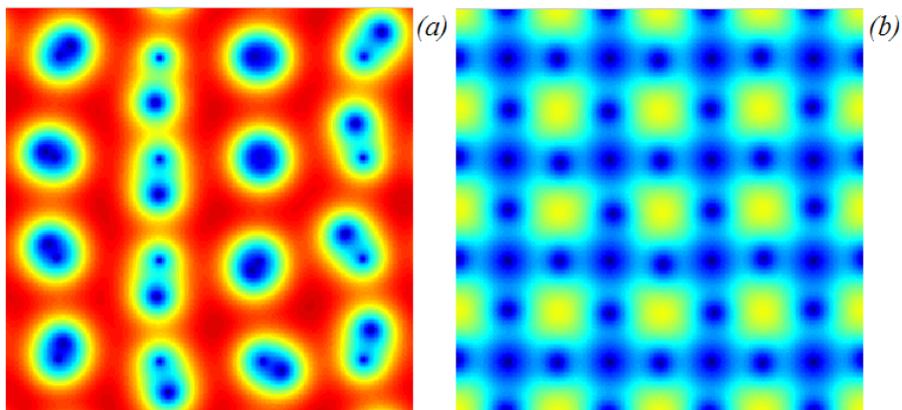


Figura 4.27: Configurações de pares de V-AV para os estados localizados em: (a)  $d = 1.6\xi(0)$  e  $m = 1.9$ ; (b)  $d = 2.2\xi(0)$  e  $m = 5$ ;

localizado para  $N = 2$  embaixo de  $d \approx 1.8\xi(0)$ , já que as mudanças no potencial vetor da rede de dipolos ficam demasiado pequenas comparadas com a resolução da malha e da amostra com que trabalhamos. Assim, nestas distâncias, só é possível observar a mudança do estado Meissner para uma série de estados irregulares de pares vórtice-antivórtice cujo número varia de dipolo para dipolo.

É interessante observar no diagrama de fases que para distâncias pequenas, mesmo sem poder definir muito bem os estados perto do estado Meissner, se tem o aparecimento de um estado bem definido perto do estado normal. Para distâncias  $d < 2\xi(0)$ , observa-se um estado com 4 pares de V-AV por cada dipolo,  $N = 4$ . Este estado, como se pode observar na figura 4.24, encontra-se na fase localizada, e se apresenta em intensidades de momento magnético perto da transição para o estado normal. Pelo comportamento nesta região de distâncias e momento magnético, é possível que a presença desses pares de V-AV seja pelas características do estado localizado. Sendo um estado em que são muito importantes os efeitos locais, para cada dipolo, a configuração do sistema permite a nucleação de estados com um maior número de pares, como o estado  $N = 4$ . Na Figura 4.28 observa-se o estado de  $N = 4$  para duas distâncias nessa região do diagrama de fase. Para 4.28(a),

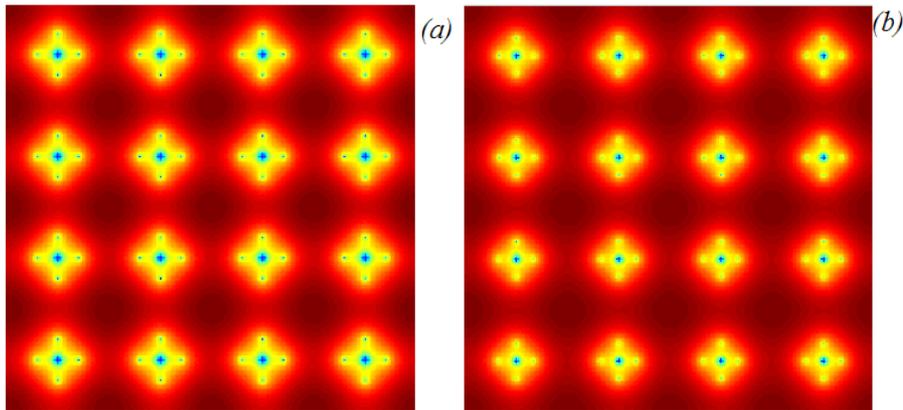


Figura 4.28: Configurações de pares de V-AV para os estados localizados  $N = 4$  em: (a)  $d = 1.9\xi(0)$  e  $m = 5.8$ ; (b)  $d = 1.6\xi(0)$  e  $m = 5.1$ .

com uma distância de  $d = 1,9\xi(0)$  e  $m = 5,8$  observa-se os antivórtices ligados aos vórtices, porém, um pouco mais separados que em 4.28(b) para a distância de separação  $d = 1,6\xi(0)$  e  $m = 5,1$ .

Pode-se concluir do diagrama de fases construído a importância da distância de separação entre a rede de dipolos com o filme supercondutor. Este é um parâmetro fundamental no comportamento que apresenta o sistema híbrido estudado. Assim, é possível, com o controle desta distância, distinguir as duas fases de posição dos antivórtices em torno dos vórtices. Estas fases podem possuir características bem diferentes em respeito às propriedades de ancoragem dos pares de V-AV. Nas regiões intersticiais há uma tendência natural de haver uma maior mobilidade dos antivórtices do que nos casos em que os antivórtices estão localizados nas proximidades dos dipolos, o que deve refletir nas propriedades de transporte de corrente da amostra.

## CAPÍTULO 5

---

### Conclusões

---

Nesta dissertação, estudamos teoricamente a nucleação do estado supercondutor para amostras supercondutoras híbridas do tipo superconductor-ferromagneto. Investigamos como a textura magnética utilizada interage com o filme supercondutor, estudando a entrada de pares vórtice-antivórtice (V-AV) na amostra supercondutora devido à presença da nanoestrutura magnética. Foi analisada a configuração dos pares V-AV, assim como a densidade de pares de Cooper, a vorticidade e a energia no filme supercondutor. O estudo foi realizado mediante a resolução numérica das equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo (TDGL), utilizando o método de campos de calibre com a técnica de variáveis de ligação. Desenvolvendo medições mediante varreduras da intensidade do momento magnético para dadas distâncias de separação e tamanhos de amostra.

Devido à presença da textura magnética, dada por uma rede periódica de dipolos magnéticos pontuais, é induzida no filme supercondutor, a nucleação de vórtices e antivórtices devido à ação do momento magnético de

cada dipolo. Encontra-se que essa nucleação de vórtices e antivórtices é feita em pares. Assim, para cada vórtice que penetra na amostra, se tem, um antivórtice penetrando a amostra numa outra posição. Também se observa que, de uma maneira geral, a nucleação se apresenta de forma “quantizada”, isto é, o número de pares V-AV por dipolo assume valores inteiros. Tais transições entre os diferentes estados induzem variações bruscas na derivada da energia livre do sistema, calculada em função de  $m$  por meio do funcional de energia de Ginzburg-Landau. Tal fato sugere que as propriedades críticas do supercondutor também serão alteradas por estas transições.

Conforme dito anteriormente, para cada amostra, temos acima do filme supercondutor uma rede quadrada de dipolos magnéticos pontuais. Esses dipolos magnéticos estão posicionados com seu momento magnético perpendicular ao filme supercondutor, o qual induz uma certa configuração de pares V-AV que penetram na amostra. Devido a esta geometria da rede de dipolos, com o momento magnético de dipolo perpendicular ao filme, os vórtices ficam aprisionados embaixo dos dipolos magnéticos. Este comportamento é devido ao sentido do campo magnético emergindo da superfície na direção do dipolo. Para os antivórtices, se encontra que a posição depende fortemente da distância de separação entre a rede de dipolos e o filme supercondutor. Dessa forma, a posição dos dipolos, formando uma rede quadrada periódica, serve como centro de aprisionamento dos vórtices, já que estes, independentemente da distância de separação do dipolo e da intensidade do momento magnético, se posicionam diretamente embaixo dos dipolos magnéticos. Este comportamento se mantém para diferentes valores de intensidade do momento magnético, logo, também é independente da vorticidade gerada, ou seja, da quantidade de pares V-AV que penetram na amostra.

A distância de separação da rede de dipolos com o filme está relacionada diretamente com a configuração que os antivórtices adquirem em torno aos vórtices no filme supercondutor. Isto devido à forma em que o campo

magnético produzido pelos dipolos penetra no filme. Com distâncias de separação maiores, o campo positivo emergindo do filme sob o dipolo concentra os vórtices nesta posição. Devido à superposição dos campos gerados pelos dipolos da rede o campo negativo penetra o filme nas regiões intersticiais da rede de dipolos, tornando favorável a estabilização de antivórtices nestas regiões. Em tais situações que denominamos *fase deslocalizada*, os antivórtices encontram-se desligados dos vórtices. Para distâncias de separação menores, o campo magnético produzido pelos dipolos é individual para cada um deles. Neste caso, a distribuição de campo na amostra é determinada pelos dipolos isoladamente, ou seja, a superposição dos campos gerados por dipolos vizinhos é desprezível. Assim, o campo positivo emerge do filme embaixo do dipolo, porém, o campo negativo penetra no filme em um região muito próxima do dipolo. Logo, os antivórtices se posicionam em torno dos vórtices, ficando ligados a estes. Neste caso, a configuração formada pelos pares V-AV no filme se apresenta em outra fase, que chamamos de *localizada*. As forças de atração entre V e AV e de repulsão entre V-V e AV-AV também influem consideravelmente na configuração final que os antivórtices e vórtices adotam em torno dos dipolos.

Para distinguir as fases de pares de vórtice-antivórtices que o sistema apresenta, é construído um diagrama de fases para uma amostra de tamanho  $64\xi(0) \times 64\xi(0)$ , com uma rede quadrada de  $4 \times 4$  dipolos magnéticos pontuais. Neste diagrama se apresentam o estado Meissner para esta amostra, o estado de vórtices com suas distintas fases para a configuração dos AV e V, e o estado normal, variando a intensidade do momento magnético dos dipolos e a distância de separação entre estes e o filme. Foi encontrada uma vorticidade de até  $N = 2$  pares de V-AV, com duas fases (deslocalizada e localizada) para a posição dos antivórtices. Encontra-se um estado de transição entre as duas fases, a qual identifica o valor da distância de separação entre os dipolos e o filme para a qual se tem a mudança da fase deslocalizada para localizada. Também é encontrada uma fase localizada de  $N = 4$  pares

---

de V-AV perto da transição para o estado normal, possivelmente devida aos efeitos locais que se apresentam quando a distância de separação é pequena.

É esperado que na fase deslocalizada haja uma tendência natural dos antivórtices de terem uma maior mobilidade do que na fase localizada. Esta maior mobilidade dos antivórtices pode se refletir nas propriedades de transporte de corrente da amostra. Portanto, uma perspectiva no desenvolvimento deste trabalho é o estudo das propriedades de transporte associadas às duas fases, localizada e deslocalizada, encontradas para este tipo de amostras híbridas.

---

## Referências Bibliográficas

---

- [1] H.K. Onnes. The resistance of pure mercury at helium temperatures. *Leiden Comm*, pages 120b,122b,124c, 1911.
- [2] G. R. Berdiyrov, M.V. Milosevis, B.J. Baelus, and F.M. Peeters. Superconducting vortex state in a mesoscopic disk containing a blind hole. *Physical Review B*, 70:024508, 2004.
- [3] B.J. Baelus, L.R.E. Cabral, and F.M. Peeters. Vortex shells in mesoscopic superconducting disks. *Physical Review B*, 69:064506, 2004.
- [4] J. J. Barba. *Configuração de vórtices e efeitos de interface em supercondutores mesoscópicos*. PhD thesis, UFPE, 2007.
- [5] V. V. Moshchalkov, V. Bruyndoncx, L. Van Look, M.J. Van Bael, and Y. Bruynseraede. Quantization and confinement phenomena in nanostructured superconductor. *Handbook of Nanostructured Material and Nanotechnology*, 3.
- [6] J. I. Martin, M. Velez, J. Nogues, and Ivan K. Schuller. Flux pinning in a superconductor by an array of submicrometer magnetic dots. *Physical Review Letters*, 79(10), 1997.

- 
- [7] Hong Yin Liao, Shi Ping Zhou, Xiao Yun Shi, and Bao He Zhu. Vortex dynamics in superconductors with periodical pinning arrays. *Physica C*, 408:603, 2004.
- [8] G. R. Berdiyrov, M. V. Milosevic, and F. M. Peeters. Novel commensurability effects in superconducting films with antidot array. *Physical Review Letters*, 96:207001, 2006.
- [9] Clécio C. de Souza Silva, Joris Van de Vondel, and Victor V. Moshchalkov Mathieu Morelle. Controlled multiple reversals of a ratchet effect. *Nature*, 440:651, 2006.
- [10] J. Van de Vondel, C. C. de Souza Silva, M. Morelle, B.Y. Zhu, and V. V. Moshchalkov. Vortex-rectification effects in films with periodic asymmetric pinning. *Physical Review Letters*, 94:057003, 2005.
- [11] C. C. de Souza Silva, A.V. Silhanek, J. Van de Vondel, W. Gillijns, V. Metlushko, B. Ilic, and V.V. Moshchalkov. Dipole-induced vortex ratchets in superconducting films with array of micromagnets. *Physical Review Letters*, 98:117005, 2007.
- [12] M. V. Milosevic and F. M. Peeters. The interaction between a superconducting vortex and an out-of-plane magnetized ferromagnetic disk: influence of the magnetic geometry. *Phys. Rev. B*, 68,094510, 2003.
- [13] M. V. Milosevic and F. M. Peeters. Vortex pinning in a superconducting film due to in-plane magnetized ferromagnets of different shapes: the London approximation. *Phys. Rev. B*, 69,104519, 2004.
- [14] M. V. Milosevic and F. M. Peeters. Commensurate vortex configurations in thin superconducting films nanostructured by square lattice of magnetic dots. *Physica C*, 404:246–250, 2004.
- [15] M. V. Milosevic and F. M. Peeters. Vortex molecules in superconducting films with magnetic films with magnetic disks on top - influence of the magnet geometry. *Physica C*, 404:281–284, 2004.

- 
- [16] G. Carneiro. Pinning and creation of vortices in superconductors films by a magnetic dipole. *Physical Review B*, 69(214504), 2004.
- [17] M. J. Van Bael, J. Bekaert, K. Temst, L. Van Look, V.V. Moshchalkov, Y. Bruynseraede, G. D. Howells, A. N. Grigorenko, S. J. Bending, and G. Borghs. Local observation of field polarity dependent flux pinning by magnetic dipoles. *Physical Review Letters*, 86(1):155, 2001.
- [18] A. V. Silhanek, A. W. Gillijns, V.V. Moshchalkov, V. Metlushko, and B. Ilic. Tunable pinning in superconducting films with magnetic micro-loops. *Applied Physics Letters*, 89:182505, 2006.
- [19] T. Winiecki and C. S. Adams. A fast semi-implicit finite-difference method for the tdgl equations. *Journal of Computational Physics*, 179:127, 2002.
- [20] W. Gropp, H. Kaper, G. Leaf, D. Levine, M. Palumbo, and V. Vinokur. Numerical simulation of vortex dynamics in type-ii superconductors. *J. Comput. Phys.*, 123, 254-266, 1996.
- [21] M. Tinkham. *Introduction to Superconductivity*, 2 ed. MGH, 1996.
- [22] Allister M Forrest. Meissner and ochenfeld revisited. *Eur. J. Phys.*, 4:117–120, 1983.
- [23] F. London and H. London. The electromagnetic equations of the superconductor. *Proc. R. Soc. of London*, A149: 71, 1935.
- [24] V.L. Ginzburg and L.D. Landau. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 20:1064, 1950.
- [25] Alexei A. Abrikosov. Magnetic properties of superconductors of the second group. *Soviet Physics - Journal of Experimental and Theoretical Physics, JETP*, 5:1174, 1957.
- [26] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5):1175, 1957.

- 
- [27] F. Ostermann, L. M. Ferreira, and C.J.H. Cavalcanti. *Rev. Bras.Ens.Fs.*, 20,270, 1998.
- [28] J. G. Bednorz and K. A. Muller. *Zeitschrift fur Physik B*, 64:189, 1986.
- [29] P. H. Hor, L. Gao, R. L. Meng, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, K. Forster, J. Vassilious, C. W. Chu, M. K. Wu, J. R. Ashburn, and C. J. Torng. High-pressure study of the new yb-ba-cu-o superconducting compound system. *Phys. Rev. Lett.*, 58(9):911–912, 1987.
- [30] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Statistical Physics, Part 1*. Pergamon Press.
- [31] P. G. De Gennes. *Superconductivity of Metals and Alloys*. 1966.
- [32] A. P. van Gelder. Nucleation of superconductivity near  $h_{c3}$ . *Physical Review Letters*, 20(25):1435, 1968.
- [33] U. Essmann and H. Träuble. *Phys. Lett.*, 24A:526, 1967.
- [34] W. H. Kleiner, L. M. Roth, and S. H. Autler. Bulk solutions of ginzburg-landau equations for type-ii superconductors: Upper critical field region. *Physical Review*, 135(5A):1226, 1964.
- [35] C. C. de Souza Silva. *Propriedades de Equilíbrio e de Transporte da Matéria de Vórtices em Supercondutores Nanoestruturados*. PhD thesis, UFPE, 2003.
- [36] F. M. Peeters, B. J. Baelus, and M. V. Milosevic. Vortex states in mesoscopic superconductors. *Physica E*, 18:312–315, 2003.
- [37] V. A. Schweigert, F. M. Peeters, and P. Singha Deo. Vortex phase diagram for mesoscopic superconducting disks. *Phys. Rev. Lett.*, 81(13):2783–2786, Sep 1998.
- [38] A. K. Geim, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, J. G. S. Lok, J. C. Maan, A. E. Filippov, and F. M. Peeters. Phase transitions in individual sub-micrometre superconductors. *Nature*, 390, 1997.

- 
- [39] A. K. Geim, S. V. Dubonos, J. G. S. Lok, M. Henini, and J. C. Maan. Paramagneticmeissner effect in small superconductors. *Nature*, 396, 1998.
- [40] L. R. E. Cabral, B. J. Baelus, and F. M. Peeters. From vortex molecules to the abrikosov lattice in thin mesoscopic superconducting disks. *Phys. Rev. B*, 70(14):144523, Oct 2004.
- [41] A. S. Mel'nikov, I. M. Nefedov, D. A. Ryzhov, I. A. Shereshevskii, V. M. Vinokur, and P. P. Vysheslavtsev. Vortex states and magnetization curve of square mesoscopic superconductors. *Phys. Rev. B*, 65(14):140503, Mar 2002.
- [42] L. F. Chibotaru, A. Ceulemans, V. Bruyndoncx, and V. V. Moshchalkov. Vortex entry and nucleation of antivortices in a mesoscopic superconducting triangle. *Phys. Rev. Lett.*, 86(7):1323–1326, Feb 2001.
- [43] Edson Sardella, Andre Luiz Malvezzi, Paulo Noronha Lisboa-Filho, and Wilson Aires Ortiz. Temperature-dependent vortex motion in a square mesoscopic superconducting cylinder: Ginzburg-landau calculations. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 74(1):014512, 2006.
- [44] V. A. Schweigert, F. M. Peeters, and P. Singha Deo. Vortex phase diagram for mesoscopic superconducting disks. *Phys. Rev. Lett.*, 81(13):2783–2786, Sep 1998.
- [45] M. Milosevic. *Vortex Matter in Superconductor/Ferromagnetic Heterosystems*. PhD thesis, Universiteit Antwerpen, 2004.
- [46] Gustavo C. Buscaglia<sup>1</sup>, Carlos Bolech, and A. López. *On the numerical solution of the time-dependent Ginzburg-Landau equations in multiply connected domains*, chapter 9, pages 200–214. *Connectivity and Superconductivity*, 2000.
- [47] L. P. Gor'kov e G. M. Éliashberg. *Soviet Physics. Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 27:328, 1968.

- 
- [48] R. S. Thompson and C. R. Hu. Dynamic structure of vortices in superconductors. *Physical Review Letters*, 27(20):1352, 1971.
- [49] Ryuzo Kato, Yoshihisa Enomoto, and Sadamichi Maekawa. Effects of the surface boundary on the magnetization process in type-ii superconductors. *Phys. Rev. B*, 47(13):8016–8024, Apr 1993.
- [50] D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 3 edition, 1998.
- [51] L. Kramer and R. J. Watts-Tobin. Theory of dissipative current-carrying states in superconducting filaments. *Phys. Rev. Lett.*, 40(15):1041–1044, Apr 1978.
- [52] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10(8):2445–2459, Oct 1974.
- [53] M. M. Doria, J. E. Gubernatis, and D. Rainer. Virial theorem for ginzburg-landau theories with potential applications to numerical studies of type-ii superconductors. *Phys. Rev. B*, 39(13):9573–9575, May 1989.
- [54] M. M. Doria, J. E. Gubernatis, and D. Rainer. Solving the ginzburg-landau equations by simulated annealing. *Phys. Rev. B*, 41(10):6335–6340, Apr 1990.
- [55] M. Baert, V. V. Metlushko, R. Jonckheere, V. V. Moshchalkov, and Y. Bruynseraede. Composite flux-line lattices stabilized in superconducting films by a regular array of artificial defects. *Phys. Rev. Lett.*, 74(16):3269–3272, Apr 1995.
- [56] V. V. Moshchalkov, M. Baert, V. V. Metlushko, E. Rosseel, M. J. Van Bael, K. Temst, R. Jonckheere, and Y. Bruynseraede. Magnetization of multiple-quanta vortex lattices. *Phys. Rev. B*, 54(10):7385–7393, Sep 1996.

- 
- [57] J. I. Martín, M. Vélez, J. Nogués, and Ivan K. Schuller. Flux pinning in a superconductor by an array of submicrometer magnetic dots. *Phys. Rev. Lett.*, 79(10):1929–1932, Sep 1997.
- [58] M. J. Van Bael, J. Bekaert, K. Temst, L. Van Look, V. V. Moshchalkov, Y. Bruynseraede, G. D. Howells, A. N. Grigorenko, S. J. Bending, and G. Borghs. Local observation of field polarity dependent flux pinning by magnetic dipoles. *Phys. Rev. Lett.*, 86(1):155–158, Jan 2001.
- [59] M. Lange, M. J. Van Bael, A. V. Silhanek, and V. V. Moshchalkov. Vortex-antivortex dynamics and field-polarity-dependent flux creep in hybrid superconductor/ferromagnet nanostructures. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 72(5):052507, 2005.
- [60] M. V. Milošević, S. V. Yampolskii, and F. M. Peeters. Magnetic pinning of vortices in a superconducting film: The (anti)vortex-magnetic dipole interaction energy in the london approximation. *Phys. Rev. B*, 66(17):174519, Nov 2002.
- [61] Gilson Carneiro. Tunable interactions between vortices and a magnetic dipole. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 72(14):144514, 2005.
- [62] M. V. Milošević and F. M. Peeters. Superconducting wigner vortex molecule near a magnetic disk. *Phys. Rev. B*, 68(2):024509, Jul 2003.
- [63] M. V. Milošević and F. M. Peeters. Vortex-antivortex lattices in superconducting films with magnetic pinning arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 93(26):267006, Dec 2004.
- [64] M. V. Milosevic and F. M. Peeters. Vortex-antivortex nucleation in magnetically nanotextured superconductors: Magnetic-field-driven and thermal scenarios. *Physical Review Letters*, 94(22):227001, 2005.

- 
- [65] Sangbum Kim, Chia-Ren Hu, and Malcolm J. Andrews. Creation and pinning of vortex-antivortex pairs. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 74(21):214511, 2006.
- [66] D. J. Priour and H. A. Fertig. Vortex states of a superconducting film from a magnetic dot array. *Phys. Rev. Lett.*, 93(5):057003, Jul 2004.
- [67] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics, 3rd ed.* Prentice-Hall, 1999.
- [68] Arfken and Weber. *Mathematical Methods for Physicists, 6 ed.* Elsevier Academic Press, 2005.