



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

TESE DE DOUTORADO

CONFIGURAÇÃO, ANISOTROPIA E DEFEITOS EM UMA REDE DE VÓRTICES NA PRESENÇA DE NANOARMADILHAS

por

Cléssio Leão Silva Lima

Tese 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 Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. José Albino Oliveira de Aguiar (Orientador-UFPE)
Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo (DF - UFPE)
Prof. Sérgio Galvão Coutinho (DF - UFPE)
Prof. Gilson Matheus Carneiro (IF - UFRJ)
Prof. José Andrade Soares Júnior (DF – UFC)
Prof. Clécio Clemente de Souza e Silva (DF-UFPE)

Recife - PE, Brasil
Março – 2006

Lima, Cléssio Leão Silva
Configuração, anisotropia e defeitos em uma rede
de vórtices na presença de nanoarmadilhas / Cléssio
Leão Silva Lima. – Recife : O Autor, 2006.
199 folhas : il., fig.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN. Física, 2006.

Inclui bibliografia.

1. Física da matéria condensada –
Supercondutividade. 2. Dinâmica de vórtices – Fusão
e topologia da rede – Método de Monte Carlo –
Defeito topológico. I. Título.

538.945
538

CDU (2.ed.)
CDD (22.ed.)

UFPE
BC2005-303



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

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

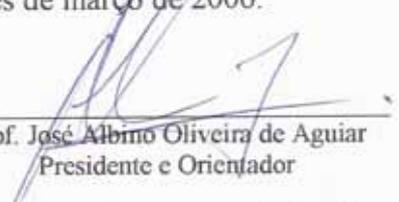
Cléssio Leão Silva Lima

CONFIGURAÇÃO, ANISOTROPIA E DEFEITOS EM UMA REDE DE VÓRTICES NA PRESENÇA DE NANOARMADILHAS

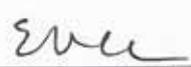
A Banca Examinadora composta pelos Professores José Albino Oliveira de Aguiar (Presidente e Orientador), Ernesto Carneiro P. Raposo, Sérgio Galvão Coutinho, Clécio Clemente de Souza e Silva, todos da Universidade Federal de Pernambuco, Gilson Matheus Carneiro, do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro, e José Soares Andrade Júnior, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, consideram o candidato:

Aprovado com Distinção () Aprovado () Reprovado

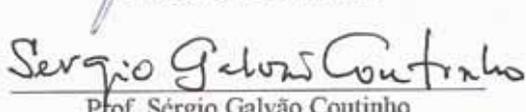
Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos dezessete dias do mês de março de 2006.



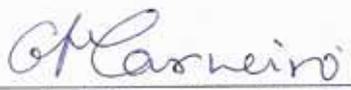
Prof. José Albino Oliveira de Aguiar
Presidente e Orientador



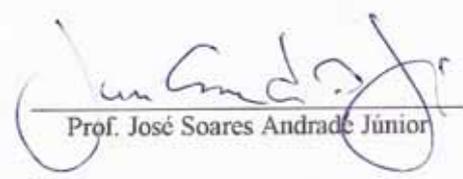
Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo



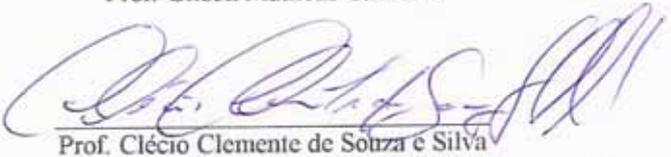
Prof. Sérgio Galvão Coutinho



Prof. Gilson Matheus Carneiro



Prof. José Soares Andrade Júnior



Prof. Clécio Clemente de Souza e Silva
Membro da Comissão Supervisora

*A Tinha e toda a nossa família, em especial meu pai e minha mãe,
pelo apoio e incentivo.*

Agradecimentos

Ao meu orientador, Albino, pela orientação e incentivo.

A Clécio, pela amizade, parcimônia, e direta contribuição ao desenvolvimento desta tese.

Aos amigos do Laboratório de Supercondutividade, Petrúcio, Léo, David, Ton, Barba, Raiden, Susset, Erivaldo, Marcílio e a turma do café depois do almoço.

Aos amigos Ferraz, Marina, Fred, Jonas, Paula, Henrique (Pirralha), Marco, Ana, Tarcísio, Hugo, Tícia, Rodrigo Lara, Juliana, Vovô, Ludmilla, Nara, Miguel, Carol, Pedrinho, Patrícia, a galera do Rio, a galera de Candeias, Lucídio, Sushi, Kátia, Flávia, Seba, Pedrão, Júnior Black, Tchê, Ivan, Elisa, Johelder, Lula, Carol, Ivan, Milenda, Léo, Didi, Fernando, Karina, Wilson, Pedro Hugo e tantos outros que **agora** esqueci. Valeu!

A todos os integrantes do Departamento de Física.

Às agências de fomento CNPq, CAPES e FACEPE.

Resumo

Desde o trabalho de Abrikosov em 1957, tem se tornado clara a existência e a estabilidade de uma rede de linhas de fluxo magnético (vórtices) em certas faixas de campo e temperatura em supercondutores do tipo II. Submetidos a correntes ou flutuações térmicas, os vórtices movimentam-se na amostra supercondutora de forma a gerar dissipação térmica. Porém, tais perdas são danosas para a grande maioria das aplicações tecnológicas atuais, sempre tentando alcançar correntes elétricas livres de resistividade. Nestes casos, evitar a dissipação ou ruído na voltagem nada mais é do que evitar o movimento destas linhas de fluxo magnético. Uma das formas mais eficazes e práticas de se reduzir o movimento não desejado dos vórtices é introduzir centros de aprisionamento artificial (“pinning” artificial). Estes centros de aprisionamento são introduzidos por técnicas de nanofabricação que podem produzir configurações aleatórias ou regulares de “pinning”. Neste último caso, redes de centros de ancoragem induzem configurações de rede de vórtices cuja corrente crítica é superior à encontrada em rede de vórtices submetida a centros de “pinning” aleatórios. Tal fato se dá basicamente devido ao efeito de “matching” e comensurabilidade entre as duas redes. Assim, caracterizar estas fases dependendo da densidade de vórtices e da simetria da rede de aprisionamento é de suma importância para aplicação tecnológica atual e futura. Além do apelo tecnológico, a interação entre vórtices e “pinning” é um modelo prático e simples de interação entre uma rede elástica e um substrato periódico e, assim, consegue ser generalizado para uma grande variedade de sistemas na matéria condensada incluindo colóides sobre substratos periódicos ou lasers de interferência, átomos adsorvidos em uma superfície, vórtices em arranjos de junções Josephson e assim

por diante.

Esta tese tem como objetivo estudar, através de simulações de Monte Carlo, as configurações de equilíbrio, proliferação de defeitos e o derretimento de redes de vórtices em sistemas bidimensionais encontrados em filmes finos supercondutores. As configurações de redes de vórtices mostram-se ter dependência não trivial com o campo magnético externo aplicado. Estes vórtices estão sob a ação de diversos arranjos regulares de centro de ancoragem: redes quadradas, retangulares, calhas e etc. O fenômeno do derretimento foi observado levando em consideração o papel dos defeitos topológicos (deslocações, disclinações). O aparecimento destes defeitos topológicos depende diretamente da simetria da rede de vórtices em relação à rede de ancoragem bem como o valor da temperatura do sistema. Diversas densidades de vórtices foram estudadas, isto é, diversos valores de campo externo foram analisados. Em casos especiais, pode-se encontrar cristalização anisotrópica resultando em uma fase esmética. Esta fase esmética é vista ser induzida em valores de densidade de vórtices específicos bem como em simetrias específicas de arranjo de ancoragem.

Palavras-chave: Física da matéria condensada, supercondutividade, dinâmica de vórtices

Abstract

Since Abrikosov's work in 1957, it has been clear the vortex lattice existence and stability in specific magnetic fields and temperature values of type II superconductors. On external currents and thermic fluctuations, vortices move through the superconductor sample resulting thermic dissipation. But it is damage to most actual technologic applications which are always trying to find electrical currents with the smallest resistivity. Thus, a possibility to avoid this dissipation is prevent vortex lines to move. One of the most practice and effective ways to stop vortex movement is in the superconductor sample introduce artificial pinning centers (defects). These defects are introduced by techniques of nanofabrication (for instance, nanolithographic techniques) producing random or regular pinning configurations. In the last case, arrays of pinning centers can induce vortex lattice configurations which critical currents is higher than critical currents in samples with random pinning centers. This fact is because the matching effect between vortex lattices and pinning arrays. In this way, to characterize these vortex phases depending on vortex density and symmetry of the pinning array is very important to actual and future technologic applications. Moreover, the interaction between vortices and pinnings is a practice and simple model of interaction between an elastic lattice and a periodic substrate that can be used for many systems in condensed matter like colloids over periodic substrates or interference lasers, atoms adsorbed on a surface, vortices in Josephson junctions arrays and so on.

In the present thesis, we study stable configurations, proliferation of defects and melting of vortex lattices, using Monte Carlo simulation, in two dimensional systems of thin superconductors films. Vortex lattice configurations has

no trivial dependence on external magnetic field. These vortices are interacting with many different arrays of regular pinning centers: square lattices, rectangular lattices, line of isolated dots and so on. The melting phenomena was observed considering topological defects (dislocations, disclinations) role. The emergence of these topological defects depend directly on vortex lattice symmetry with pinning array and depend on the system temperature. Many vortex density were studied (magnetic field values). In special cases, we can found an anisotropic crystallization resulting an smectic phase. The smectic phase can be induced in some vortex density values and specific arrays of pinning centers.

Keywords: Condensed matter physics, superconductivity, vortex dynamics

Conteúdo

| | |
|--|-----------|
| Resumo | 7 |
| Abstract | 9 |
| 1 Introdução | 21 |
| 2 Supercondutividade | 25 |
| 2.1 Breve histórico | 25 |
| 2.2 Propriedades fundamentais do estado supercondutor | 32 |
| 2.2.1 Resistividade elétrica nula | 32 |
| 2.2.2 Efeito Meissner | 33 |
| 2.3 Termodinâmica do estado supercondutor | 34 |
| 2.4 Modelagem microscópica e <i>gap</i> no espectro de energia | 35 |
| 2.5 Teorias fenomenológicas | 38 |
| 2.5.1 Teoria de London | 38 |
| 2.5.2 Teoria de Ginzburg-Landau | 39 |
| 2.5.3 Comprimentos característicos | 43 |
| 2.5.4 Validade da teoria de Ginzburg-Landau (GL) | 46 |
| 2.6 O estado Misto (Fase de Shubnikov) | 47 |
| 2.6.1 A quantização do fluxo magnético: vórtices | 48 |
| 2.6.2 Estrutura de um vórtice | 49 |
| 2.6.3 Energia de um vórtice | 52 |
| 2.6.4 Interação entre linhas de vórtices | 55 |
| 2.6.5 Vórtices em sistemas bidimensionais | 56 |
| 2.6.6 Rede de vórtices | 60 |
| 2.6.7 Aproximação elástica para uma rede de vórtices | 63 |
| 2.6.8 Defeitos em redes de vórtices | 66 |
| 3 Confinamento e fusão de redes de vórtices | 71 |
| 3.1 Introdução | 71 |
| 3.2 Fusão | 73 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 3.2.1 | Abordagem teórica para fusão e solidificação | 76 |
| 3.2.2 | Ordem de longo alcance e dimensionalidade | 77 |
| 3.2.3 | Fusão em sistemas bidimensionais | 82 |
| 3.2.4 | A teoria de KTHNY | 87 |
| 3.2.5 | Fusão induzida por defeitos diversos | 93 |
| 3.2.6 | Fusão de uma rede de vórtices em supercondutores | 94 |
| 3.2.7 | Fusão da rede de vórtices em materiais supercondutores tridimensionais | 95 |
| 3.2.8 | Fusão da rede de vórtices em materiais supercondutores bidimensionais | 102 |
| 3.3 | Aprisionamento de vórtices | 107 |
| 3.3.1 | Centros de aprisionamento periódicos: estabilidade e fusão de rede de vórtices | 108 |
| 4 | Simetria e fusão de rede de vórtices em sistemas 2D | 117 |
| 4.1 | Introdução | 117 |
| 4.2 | Os potenciais de interação e as grandezas mensuráveis | 118 |
| 4.3 | Resultados | 122 |
| 4.3.1 | Configurações de equilíbrio e fusão de rede de vórtices em substratos anisotrópicos | 122 |
| 4.3.2 | Configurações e fusão de rede de vórtices em outras simetrias de <i>pinning</i> | 136 |
| 4.3.3 | Ordem da transição de fusão em duas dimensões. | 154 |
| 5 | Conclusões | 159 |
| A | O método Monte Carlo | 163 |
| A.1 | Histórico | 163 |
| A.2 | O algoritmo Monte Carlo e Metrópolis: da mecânica estatística à implementação computacional | 165 |
| A.3 | Erros | 170 |
| A.3.1 | Erros estatísticos | 171 |
| A.3.2 | Erros sistemáticos | 175 |
| A.3.3 | Análise de tamanho finito | 176 |
| | Referências bibliográficas | 199 |
| | Artigos publicados e submetidos a publicação | 201 |

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 2.1 | Resistividade elétrica ρ em função da temperatura em mercúrio puro. Note o rápido decréscimo da curva próximo a $T = 4,2$ K. | 26 |
| 2.2 | Curva típica do campo crítico H_c em função da temperatura em um supercondutor, descrita pela equação (2.1). | 27 |
| 2.3 | Efeito Meissner em uma esfera supercondutora submetida a temperaturas abaixo de T_c a campo magnético constante. Se para $T > T_c$ (esfera esquerda) o material comporta-se como um condutor normal, para $T < T_c$ (esfera direita) a esfera torna-se supercondutora. | 29 |
| 2.4 | Representação da interação elétron-elétron via fônons (referencial do centro de massa do par de elétrons). No lado esquerdo (direito), emissão (absorção) de fonôn de momentum $-\hbar\vec{k}$ ($\hbar\vec{k}$) pelo elétron de momentum \vec{p}_1 (\vec{p}_2). | 36 |
| 2.5 | Dependência espacial em y do campo magnético aplicado $B\hat{z}$ a um supercondutor cujo comprimento de penetração é dado por λ | 39 |
| 2.6 | Magnetização de equilíbrio em função do campo magnético externo em um supercondutor do tipo I (a) e II (b). Perceba os diferentes comportamentos dos dois tipos e os campos críticos referentes. | 48 |
| 2.7 | Caminho de integração realizada na equação (2.59). | 54 |
| 2.8 | Representação da interação (tipo Lorentz) entre vórtices i e j gerada por uma corrente \vec{J}_s | 55 |
| 2.9 | (a) Perfil de campo \vec{h} (linha azul sólida) e do parâmetro de ordem supercondutor $ \psi ^2$ (linha vermelha pontilhada). (b) Linhas de contorno do campo magnético de um vórtice em torno de seu núcleo, e cuja extensão é dada por 2λ | 62 |
| 2.10 | Da esquerda à direita: Módulo elástico de compressão (C_{11}), cisalhamento (C_{66}) e “entortamento” (C_{44}) de uma rede de vórtices triangular. | 65 |
| 2.11 | Deslocação em sólidos (a) do tipo “edge” e (b) do tipo helicoidal (Chaikin & Lubensky, 1995). | 68 |

- 2.12 (a) Circuitação em uma rede sem defeitos e (b) com uma deslocação do tipo “edge”. Neste último, o vetor de Burgers \vec{b} é definido pelo segmento SE . Note que o vetor de Burgers é aquele vetor complementar que tranforma a rede defeituosa em uma rede regular (Chaikin & Lubensky, 1995). 68
- 2.13 (a) Disclinação negativa e (b) disclinação positiva em uma rede cristalina triangular. Note que em (a) tem-se um átomo na posição central com sete primeiros vizinhos. Em (b) o átomo central possui cinco primeiros vizinhos. Ambos os átomos centrais diferem do restante dos átomos da rede e tornam fácil a caracterização do tipo de defeito que o cristal apresenta (Chaikin & Lubensky, 1995). . . 70
- 3.1 Representação esquemática de um modelo de spins com (a) todos os termos paralelos (configuração de menor energia) (b) apenas um termo antiparalelo aos demais e (c) todos os termos distintos um ao outro por um pequeno ângulo ka 78
- 3.2 Representação esquemática das fases existentes em uma transição de fusão em sistemas 2D segundo KTHNY. Acima da seta estão indicados respectivamente os valores da função de correlação translacional $S(\vec{G})$ e orientacional $S(\theta)$ para cada fase. Para cada valor de temperatura está associada a existência da discontinuidade dos expoentes $\eta_{G_1}(T)$ e $\eta_6(T)$ 91
- 3.3 Diagrama de fases para supercondutores do tipo (a) I e (b) II. . . 94
- 3.4 Representação esquemática do modelo *cage*. No caso, uma linha de vórtices é deslocada de sua posição de equilíbrio, indicado pelas linhas pontilhadas, por um vetor deslocamento \vec{u} e em uma extensão L , enquanto seus vizinhos estão fixos. Figura retirada de Clemente (2003) 97
- 3.5 (a) Diagrama de fases $B-T$ de uma rede de vórtices em um cristal hospedeiro perfeito. As linhas contínuas indicam transição de fase de primeira ordem. As linhas mais finas apontam a região de aplicabilidade do modelo *cage*. (b) Diagrama de fases de uma rede de vórtices em cristal hospedeiro com defeitos. As setas indicam transições de fase induzidas por desordem (I) e pela temperatura (II). Figura retirada de Clemente (2003) 99
- 3.6 Mudança na densidade de corrente crítica ΔJ_c em valores específicos de campo para duas temperaturas relativas t diferentes ($t = \frac{T}{T_c}$). Os valores de “pico” correspondem ao perfeito casamento entre a distância entre os vórtices e a distância, em um filme de Al, entre pontos de diferente espessura. Figura retirada de Daldini *et al.* (1974). 109

- 3.7 Representação esquemática das configurações de redes de vórtices submetidas a pontos magnéticos com magnetização no plano. H_1 é o primeiro campo de “matching”. Pontos pretos e círculos abertos representam centros de aprisionamento e vórtices, respectivamente. Figura retirada de Moshchalkov *et al.* (1999) 112
- 3.8 (a) Visualização de vórtices (marcas mais claras) usando decoração de Bitter em “blind holes”. (b) Diferença estrutural entre “blind holes” e “antidots”. L1 e L2 são camadas de Pb de diferentes espessuras. Figuras retiradas de Raedts *et al.* (2004) e Bezryadin *et al.* (1996). 113
- 4.1 Perfil unidimensional do potencial e da força “sentida” pelo vórtice quando este aproxima-se do defeito. A distância está em unidades do raio do *pinning*. 120
- 4.2 Configuração de uma rede de vórtices (pontos escuros) submetidos a uma rede de ancoragem quadrada (círculos vazados) quando $H/H_1 = 1/8$ e $T=0$ 123
- 4.3 Diferença de energia ΔE entre as configurações novas (inclinadas em relação à rede de ancoragem) e as anteriormente obtidas por Moshchalkov (Moshchalkov *et al.*, 1999) em função do parâmetro de anisotropia γ . Nesta aproximação usa-se do argumento de que para densidades baixas o bastante e em específicas simetrias de ancoramento todos os vórtices que estão nos defeitos permanecem exatamente no centro destes, isto é, no mínimo de potencial. . . . 124
- 4.4 Configuração (figuras (a) e (b)) e matriz densidade-densidade (figuras (c) e (d)) de redes de vórtices submetidas a um substrato de simetria quadrada para valores de campo $H/H_1 = 2$ (figuras (a) e (c)) e $H/H_1 = 3$ (figuras (b) e (d)) em $T=0$. Perceba o aparecimento de dímeros quando $H/H_1 = 3$. As estrutura encontradas para os dois casos coincidem com as já encontradas anteriormente na literatura (figura (3.7)). 125
- 4.5 Configurações de equilíbrio de redes de vórtices (círculos fechados) para diferentes valores de anisotropia de rede de ancoragem γ e campo externo H/H_1 : $H/H_1 = 1/8$, e (a) $\gamma = 0.866$, (b) $\gamma = 1.5$ e (c) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1/4$ e (d) $\gamma = 1.433$, (e) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1/2$, e (f) $\gamma = 1.433$, (g) $\gamma = 2$ and (h) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1$, e (i) $\gamma = 0.866$, (j) $\gamma = 3$. Em todos os casos, $T=0$ 126
- 4.6 Fração de vórtices ancorados em função da temperatura para $H/H_1 = 1$ e diferentes valores de γ 128

- 4.7 Dependência do calor específico com a temperatura para o caso $H/H_1 = 1/4$ and $\gamma = 3$. Figura interna menor: detalhe da região de transição onde a curva possui um máximo. 129
- 4.8 Variância posicional para (a) uma rede quadrada, $H/H_1 = 1$ e $\gamma = 1$, e (b) uma rede retangular com $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 3$. Figura menor: A região de transição mostra que a temperatura em que a variância cai rapidamente é a mesma nas direções x e y em (a), e difere em (b). 130
- 4.9 Configuração estável de vórtices (círculos fechados) para um sistema com $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 0.866$. Para (a) $T > T_{C(T)}$, (b) $T_{C(T)} > T > T_{\chi=1}$ e $T < T_{\chi=1}$ 131
- 4.10 Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/8$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para a região 2 (esquerda), e região 3 (direita). 132
- 4.11 Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/4$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para a região 2 (esquerda), e região 3 (direita). 133
- 4.12 Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/2$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para as regiões 2 (esquerda) e 3 (direita). 134
- 4.13 Diagrama de fases para $H/H_1 = 1$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para as regiões 2 (esquerda) e 3 (direita). 135
- 4.14 Configuração estável em $T = 0$ ($\alpha_p = 360$) de rede de vórtices (círculos fechados) interagindo com uma linha de centros de ancoragem (círculos abertos) com $N_v = 4$ até $N_v = 64$ 137
- 4.15 Configuração de uma rede de vórtices na ausência de substrato caracterizado pelo seu parâmetro de rede a_v e a menor distância em uma linha reta, na direção perpendicular a a_v , entre dois vórtices h . O confinamento da rede em uma linha de centros discretos reduz-se ao problema de comensurabilidade entre o parâmetro de rede do substrato a_p e a_v e h . A tabela demonstra que quanto mais próximo a razão destas grandezas aproxima-se da unidade, maior a probabilidade da orientação seguir a respectiva constante. Os casos específicos de $N_v = 24$ e $N_v = 28$ são aqueles em que as razões mais distanciam-se da unidade e, logo, as duas direções não são favoráveis. No caso de $N_v = 64$, a densidade é alta o bastante para induzir vórtices entre os sítios de ancoragem. 138

- 4.16 Matriz posição média e variância posicional para rede de vórtices interagindo com uma linha de poços gaussianos no centro da célula de simulação. Do lado esquerdo ao direito a temperatura está crescendo. Note que em uma determinada temperatura apenas quatro vórtices possuem variância nula, correspondendo aos vórtices ancorados. Em temperaturas mais altas, a variância em y torna-se maior que na direção x . Tal fato aponta que existe a realimentação do sítio cada vez que um vórtice o desocupa. Para temperaturas ainda maiores a rede desacopla-se do substrato e se funde por completo. 139
- 4.17 Energia interna versus temperatura para uma rede com $N_v = 16$ vórtices interagindo com uma linha reta de centros de ancoragem. T_{σ_x} e T_{σ_y} são as temperaturas em que a variância em x e y explodem (no sentido de baixa a alta temperatura). $T_{C(T)}$ é a temperatura onde $C(T) \times T$ apresenta um máximo. Figuras internas menores: Configuração das redes de vórtices para o instante antes do surgimento do primeiro defeito topológico (a), quando na presença de um par de deslocação acoplado (b), com um par de deslocação desacoplado com vetor de Burgers paralelo (c) e perpendicular (d) à linha dos defeitos e finalmente (e) com disclinações desacopladas. As figuras de cor verde e vermelho correspondem a vórtices com cinco e sete primeiros vizinhos, respectivamente. 140
- 4.18 Matriz densidade de vórtices para $N_v = 64$ interagindo com uma linha de defeitos gaussianos central a célula de simulação (na direção horizontal) de tamanho $L = 16\lambda$. A temperatura cresce no sentido da esquerda para direita e de cima para baixo. Os pontos em vermelho correspondem aos vórtices ancorados. Note a oscilação unidimensional crescente e o início do movimento de vórtices na direção perpendicular quando $T = T_{\sigma_y}$. Em $T = T_c$ os vórtices ancorados começam a escapar dos defeitos. 141
- 4.19 Matriz densidade de vórtices para $N_v = 64$ interagindo com uma calha central (na direção horizontal) na célula de simulação de tamanho $L = 16\lambda$. A temperatura cresce no sentido da esquerda para direita e de cima para baixo. Note a oscilação unidimensional, coerente, para temperaturas baixas e o início do movimento de vórtices em outras direções apenas quando $T = T_c$. Nesta temperatura, os vórtices ancorados começam a escapar dos defeitos. 142

- 4.20 Variância posicional em função da temperatura para uma rede de vórtices ($N_v = 64$) interagindo com uma calha. Os defeitos topológicos aparecem gradativamente a medida em que a temperatura é acrescida, porém sem temperaturas características, isto é, sem “picos” na curva. Note que, mesmo a baixas temperaturas, a dispersão na direção x apresenta “saltos” devido a oscilação da rede induzida pelo grau de liberdade imposto pela calha. 143
- 4.21 Função de estrutura $S(\vec{k})$ para valores crescentes de temperatura relacionado a uma rede de vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos ($N_v = 64$ e $L = 16\lambda$). Perceba o curto grau de ordenamento translacional para temperaturas maiores que T_{σ_x} , enquanto que o ordenamento orientacional só é perdido para $T > T_c$. 144
- 4.22 Calor específico em função da temperatura para vários valores de α_p . Note o surgimento do pico relacionado à presença do substrato cada vez maior e em temperaturas maiores. Nas figuras internas, demonstra-se a configuração de equilíbrio da rede em $T = 0$ para cada valor de α_p 145
- 4.23 Calor específico em função da temperatura para vários valores de α_p . Note que para valores de α_p crescentes o “pico” alarga-se e se direciona para altos valores de temperatura. 146
- 4.24 Valor do máximo do calor específico para vários valores de α_p . Se $\alpha_p < 12$, pode-se determinar dois máximos relacionados ao desacoplamento da rede do substrato e a fusão. Para $\alpha_p > 12$, o “pico” do desacoplamento tem máximo muito maior que o da fusão propriamente dita. Este “pico” apresenta-se em temperaturas cada vez mais altas e de largura cada vez maior se o valor de α_p é acrescido. 147
- 4.25 Variância posicional dos vórtices interagindo com uma linha de centros de ancoragem. À esquerda e a direita uma rede com $N_v = 32$ e $N_v = 48$, respectivamente. No primeiro caso, a prova da existência da fase esmética em uma larga faixa de temperatura quando $T_{\sigma_x} < T_{\sigma_y}$. No segundo caso, não há fase esmética visto que $T_{\sigma_x} = T_{\sigma_y}$ 147
- 4.26 Distribuição posicional dos vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos no centro da célula de simulação para um sistema com $N_v = 32$. $T_1 > T_2 > T_3 > T_4 > T_5 > T_6$ 149
- 4.27 Distribuição posicional dos vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos no centro da célula de simulação para um sistema com $N_v = 48$. $T_1 > T_2 > T_3 > T_4 > T_5 > T_6$ 149
- 4.28 Configuração de rede de vórtices de várias densidades ($n_v = 1..16$) interagindo com linhas paralelas de centros gaussianos de defeitos. 150

- 4.29 Matriz distribuição de probabilidade da posição do vórtices (a) e as duas possíveis configurações (parte (b) e (c)) encontradas quando a temperatura é baixa para um sistema com $N_v = 8$ com duas linhas de centros de ancoragem. Em (b) todos os vórtices possuem seis primeiros vizinhos, enquanto que no caso (c) a rede apresenta pares com cinco (sinal de menos e preenchido em azul) e sete primeiros vizinhos (sinal de mais e preenchido em vermelho). 151
- 4.30 Configuração de uma rede de vórtices ($N_v = 8$) interagindo com duas linhas pontuais de defeitos em diferentes valores de magnitude do defeito α_p . Quando $\alpha > 170$, a rede quebra-se em uma fase pentagonal. 151
- 4.31 Estados degenerados de uma rede de vórtices (configurações (a) e (b)) submetidos a duas linhas paralelas de centros de ancoragem. Os dois casos assemelham-se aos encontrados nas situações anteriores de uma linha de defeitos. (c) e (d) são as respectivas variâncias posicionais. A diferença entre estas reflete as diferentes configurações de mesma energia. 152
- 4.32 Configuração de uma rede de vórtices interagindo com duas linhas pontuais perpendiculares para diferentes valores de densidade. . . 153
- 4.33 Figura da esquerda: Histograma de energia para temperaturas próximas à transição. Para todos os valores de temperatura, as curvas são suaves e não apresentam coexistência de dois “picos”, o que credita o caráter de segunda ordem à transição. Figura da direita: Curva de energia em função da temperatura para valores crescentes e decrescentes demonstrando a quase inexistência de histerese, o que sugere uma transição de segunda ordem. 155
- 4.34 Calor específico em função da temperatura para sistemas de diversos tamanhos L e com densidade de vórtices constante $H/H_1 = 4$. Note que o máximo da curva cresce e acontece para temperaturas cada vez mais altas se o sistema é aumentado. Perceba também que a largura da transição cresce com o tamanho do sistema. . . . 157
- 4.35 Resultados obtidos através das curvas do calor específico da figura anterior. Máxima na curva do calor específico (primeira figura), temperatura desta máxima (figura do meio) e largura da transição (figura de baixo) em função do tamanho do sistema L . Na primeira figura $\alpha = 2,76 \pm 0,06$ e $c_1 = 1,4 \pm 0,2$. Na segunda curva $c_2 = 0,00028 \pm 0,00008$ e $\beta = 1,3 \pm 0,1$. Na última, $c_3 = 0,00017 \pm 0,00009$ e $\gamma = 1,2 \pm 0,2$ 158

Capítulo 1

Introdução

Em cosmologia, creditam-se às várias transições de fases no início da história do universo a formação e o estabelecimento de defeitos topológicos. À medida que o universo expandiu e resfriou-se, regiões em que esta expansão se deu à velocidade da luz propiciou a quebra de simetrias. O contato entre estas diferentes regiões resultou nos defeitos topológicos. Hoje em dia, em qualquer sistema, entende-se como defeito topológico toda e qualquer estrutura física caracterizada por uma região central (ponto, linha ou superfície) onde a ordem é destruída, e uma região afastada, onde uma variável elástica varia lentamente no espaço. Dependendo do grupo de simetria e do sistema em consideração, defeitos topológicos têm diferentes nomes. Em cristais periódicos, por exemplo, eles podem ser chamados de deslocamentos e disclinações, e em hélio superfluido, supercondutores e modelos bidimensionais, como por exemplo o modelo XY, eles são chamados de vórtices.

Este último tipo de defeito, vórtices, pode ser encontrado não apenas nos exemplos supracitados, mas também em uma verdadeira gama de modelos, tanto quânticos quanto clássicos. Acredita-se que o pleno conhecimento de sua existência date do século XVI através dos trabalhos de Leonardo da Vinci. Entre tantas possibilidades, da Vinci apontou a existência de vórtices no movimento turbulento da água e no fluxo de sangue através das válvulas da artéria aorta (Gharib *et al.*, 2002). Quatro séculos mais tarde, vórtices seriam alvo de estudo do professor Theodore von Karman. Von Karman estudou a formação de vórtices na atmosfera e em fluidos em geral e a creditou à presença de obstáculos. Tais obstáculos induziam uma diferença de pressão capaz de forçar uma parte do fluido a deslocar-

se mais rápido que outras partes e, por conseguinte, a curvar-se.

Em supercondutores, o papel dos defeitos topológicos está estritamente relacionado à sua essência. De fato, é sabido que em determinados tipos de materiais (supercondutores do tipo II) supercondutividade e magnetismo coexistem. No caso, linhas de fluxo magnético (vórtices) quantizados penetram no espécime quando estes são submetidos a campo magnético externo alto o suficiente. Tais vórtices correspondem a regiões de fase normal e, logo, a regiões onde a densidade superfluida se anula. Ao redor destas regiões, correntes circundantes mantêm a estrutura do defeito e possibilitam a interação entre eles. A interação entre os vórtices, por sua vez, resulta, em meios contínuos infinitos, na formação de uma rede periódica triangular de linhas de fluxo.

Paralelamente à descoberta da existência de vórtices em supercondutores do tipo II, a descoberta da supercondutividade em altos valores de campo e temperatura, esta acima da temperatura de liquefação do nitrogênio (aproximadamente 70 K), abriu margem à aplicação tecnológica em larga escala do fenômeno. Materiais como o $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ e o $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ são conhecidos hoje possuírem temperaturas críticas T_c , onde a partir da qual o material deixa de ser supercondutor, da ordem de 90K. A presença de vórtices nestes materiais, em uma ampla região de seus diagramas de fases, é fato e o aprisionamento destes faz-se necessário, pois seu movimento através da amostra gera dissipação térmica.

Assim, mergulhado neste apelo tecnológico, o estudo do aprisionamento de vórtices em materiais supercondutores tem se desenvolvido desde sua descoberta. Defeitos nos materiais, sejam eles artificiais ou intrínsecos, constituem centros atrativos para os vórtices capazes, além da temperatura, de destruir a simetria da rede. Centros de aprisionamento periódicos, em particular, induzem configurações de vórtices diferentes das encontradas em substratos suaves (redes triangulares), dependentes, de forma não trivial, do campo magnético externo. Submetidos a temperaturas cada vez mais altas, rede de vórtices fundem-se através da proliferação progressiva de defeitos topológicos (deslocações e disclinações) em alusão à teoria de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) (Nelson & Halperin, 1980).

Nesta tese, estudar-se-ão as propriedades de equilíbrio de redes de vórtices cuja estrutura é modificada pela aplicação de potências periódicos externos gerados por uma rede artificial de centros de ancoragem. As configurações de equilíbrio, proliferação de defeitos e o derretimento de redes de vórtices em sistemas bidimensionais encontrados em filmes finos supercondutores são analisados através do método de Monte Carlo.

A tese está organizada da seguinte maneira. No Capítulo 2, revisar-se-ão alguns fundamentos da supercondutividade, da física de vórtices em supercondutores e dos defeitos topológicos. O fenômeno da fusão e confinamento de linhas de fluxo são tratados no Capítulo 3. Configurações de equilíbrio e fusão de rede de vórtices em determinadas simetrias de redes de ancoragem, os resultados obtidos, são temas estudados no capítulo 4. As considerações finais e conclusões são discutidas no Capítulo 5.

Capítulo 2

Supercondutividade

2.1 Breve histórico

Os supercondutores (SC), como o próprio nome sugere, são materiais que apresentam condutividade muito além do usualmente encontrado em compostos de baixa resistividade (metais, por exemplo). Eles constituem uma das mais belas e destacáveis descobertas científicas e, mesmo depois de quase 100 anos, continuam a surpreender e premiar os que trabalham neles, como pode mostrar a tabela 2.1 (Nobel, 2003).

| Laureado | Pesquisa | Descoberta | Premiação |
|------------------------------|-------------------------------------|------------|-----------|
| Onnes | supercondutividade | 1911 | 1913 |
| Landau | hélio líquido | 1941 | 1962 |
| Bardeen, Cooper e Schreiffer | teoria BCS | 1957 | 1972 |
| Josephson | tunelamento em SC | 1960 | 1973 |
| Kapitsa | física básica a baixas temperaturas | 1937 | 1978 |
| Bednorz e Müller | HTSC | 1986 | 1987 |
| Ginzburg | Teoria de Ginzburg-Landau | 1950 | 2003 |
| Abrikosov | vórtices em SC do tipo II | 1957 | |
| Leggett | teoria da superfluidez | 1975 | |

Tabela 2.1: Pesquisadores laureados pelo prêmio Nobel no campo da supercondutividade.

Antes da descoberta da supercondutividade, apenas sabia-se que um material metálico, material este de baixa resistividade, tinha sua condutividade acrescida a baixas temperaturas. Porém, em 1908, H. Kamerlingh Onnes conseguiu, pela

primeira vez, liquefazer o hélio e, a partir disto, mudar completamente o conhecimento sobre o comportamento eletromagnético dos materiais.¹ Desde então, a possibilidade real de alcançar temperaturas, na época, inimagináveis propiciou a rápida descoberta, três anos depois, do primeiro supercondutor (mercúrio a uma temperatura crítica aproximada de $T_c = 4,2\text{K}$, como mostra a figura 1.1.) (Onnes, 1911). Onnes observou que em temperaturas mais baixas que $T = 4,2\text{K}$ a resistividade elétrica dc do mercúrio reduzia à medida em que amostras mais puras do material eram sintetizadas. Quando finalmente conseguiu obter uma amostra de alta pureza, o mercúrio apresentou resistividade cerca de um milhão de vezes menor que o seu valor anterior encontrado em T_c . O rápido decréscimo do valor da resistividade, a partir de T_c , era a primeira “assinatura” de um novo estado físico da matéria, o estado supercondutor, definido pelo próprio Onnes apenas um ano após sua descoberta.

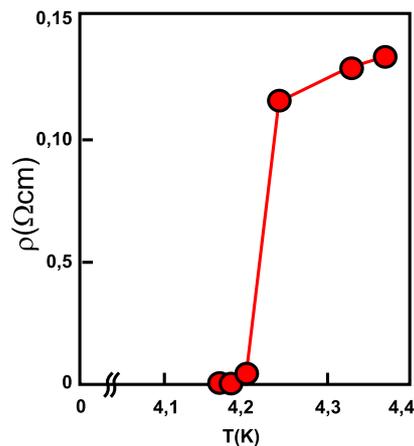


Figura 2.1: Resistividade elétrica ρ em função da temperatura em mercúrio puro. Note o rápido decréscimo da curva próximo a $T = 4,2\text{ K}$.

Além das medidas resistivas, Onnes conseguiu provar definitivamente o caráter supercondutor do mercúrio ao aplicar correntes da ordem de milhares de Ampere

¹H. Kamerlingh Onnes, na época professor de física experimental da Universidade de Leiden, não apenas determinou o ponto de ebulição do hélio como também conseguiu atingir temperaturas em torno de $1,7\text{K}$ por reduzir a pressão do container. Seu interesse em alcançar tão baixas temperaturas sempre esteve em estudar o comportamento resistivo dos metais nestes limites.

por milímetro quadrado sem a amostra apresentar qualquer resistividade mensurável. Porém, Onnes logo percebeu que acima de um determinado valor limite de corrente, conhecido hoje em dia por corrente crítica I_c , o mercúrio retornava ao seu comportamento eletrônico normal.

Em 1914, três anos após a descoberta da supercondutividade, Onnes observou que, além de uma corrente crítica, um campo magnético externo acima de um valor limite, que ele chamou de campo crítico H_c , conseguia reconduzir o material às suas características na temperatura ambiente (Onnes, 1914). Guiado por curvas de resistência em função do campo aplicado, ele chegou a uma equação empírica da dependência do campo crítico H_c em função da temperatura,

$$H_c(T) \approx H_{c0} \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right), \quad (2.1)$$

como demonstrado na figura 1.2.

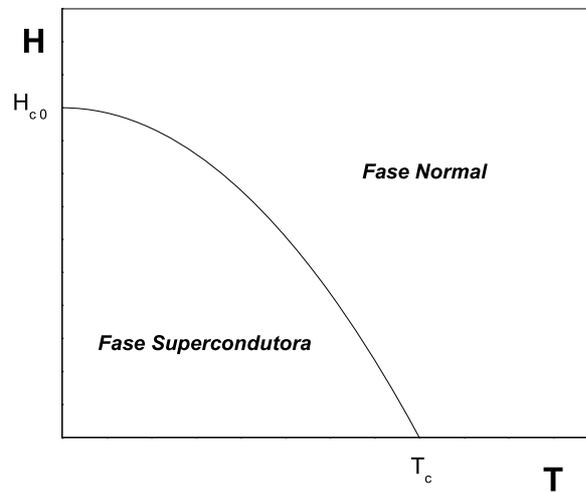


Figura 2.2: Curva típica do campo crítico H_c em função da temperatura em um supercondutor, descrita pela equação (2.1).

Dois anos mais tarde, F. Silsbee interpretou a interdependência da corrente I_c e

do campo crítico H_c demonstrando que, se a supercondutividade é destruída pela corrente crítica, esta gera um campo no supercondutor conhecido como campo crítico H_c (Silsbee, 1916).²

Prosseguindo no tempo, até 1933 a única propriedade conhecida dos supercondutores era a resistividade nula. No intervalo entre 1911 e 1933, os maiores avanços situaram-se na descoberta de novos materiais e na própria produção do hélio liquefeito, quebrando o monopólio de Leiden, na Universidade de Toronto, em 1923, e no Instituto Physikalisch-Technische Reichsanstalt, em 1928. Neste último instituto de pesquisa, destaca-se o trabalho liderado por Walther Meissner. Logo nos seus primeiros anos, o grupo de Meissner conseguiu demonstrar que há supercondutividade na maioria dos elementos de transição, em especial os do grupo IV e V. A supercondutividade poderia também ser encontrada em um largo número de carbetos e nitretos com temperaturas críticas T_c até então consideradas elevadas (da ordem de $T_c = 10\text{K}$ em NbC, por exemplo) (Meissner, 1929). Porém, foi em 1933 que Meissner deu sua maior contribuição à supercondutividade. Neste ano, ele e seu estudante, Robert Ochsenfeld, demonstraram que um material no estado supercondutor apresenta diamagnetismo perfeito (Meissner & Ochsenfeld, 1933). Este fenômeno é hoje conhecido como efeito Meissner. Assim, um material supercondutor expulsa fluxo magnético, gerado por um campo magnético pequeno o bastante, quando resfriado abaixo de sua temperatura crítica. Se o campo magnético for aplicado no material já no estado supercondutor, isto é, para temperaturas abaixo de sua temperatura crítica T_c , correntes são produzidas na superfície do material no intuito de manter o fluxo magnético interno constante zero e, assim, anular o campo externo. Conseqüentemente, para campo magnético $H < H_c$, qualquer que seja a história magnética do material, sua indução magnética é nula abaixo de T_c (fig.2.3). A descoberta do efeito Meissner, porém, não significou a total compreensão das duas principais propriedades do estado supercondutor: resistividade nula e diamagnetismo perfeito (efeito Meissner). A primeira aproximação teórica capaz de elucidar parcialmente o efeito foi in-

²Esta regra é hoje conhecida como regra de Silsbee e é aplicada a todos os supercondutores, exceto supercondutores na forma de filmes finos.

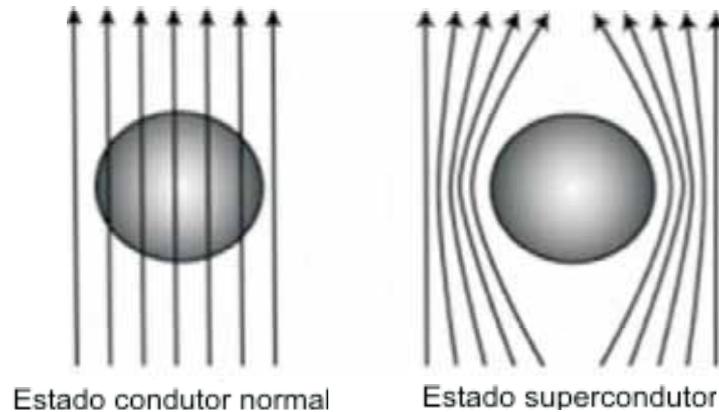


Figura 2.3: Efeito Meissner em uma esfera supercondutora submetida a temperaturas abaixo de T_c a campo magnético constante. Se para $T > T_c$ (esfera esquerda) o material comporta-se como um condutor normal, para $T < T_c$ (esfera direita) a esfera torna-se supercondutora.

introduzida apenas dois anos depois pelos irmãos Fritz e Heinz London (London, 1961). Eles desenvolveram um conjunto de equações eletrodinâmicas, utilizando para isso as equações de Maxwell, capazes de descrever o efeito Meissner. Uma das consequências dessa teoria foi a predição da existência de um comprimento característico do material, conhecido hoje como comprimento de penetração de London λ_L , estimando o comprimento máximo que o campo magnético consegue penetrar dentro de um supercondutor.

No mesmo ano da publicação dos trabalhos dos irmãos London, o grupo de L.V. Shubnikov em Kharkov (Lee, n.d.) mostrou que monocristais de PbTl_2 apresentavam dois campos críticos H_{c1} e H_{c2} separando propriedades distintas do material. Abaixo de H_{c1} , o fluxo magnético era expelido do interior do material da mesma forma encontrada por Meissner, porém acima de H_{c1} e abaixo de H_{c2} o fluxo penetrava parcialmente a amostra, o que caracterizaria uma fase mista, supercondutividade-magnetismo, (à sua vista) instável. Quando o campo externo alcançava H_{c2} , o fluxo ocupava todo o material e a supercondutividade era destruída. Desse modo, Shubnikov foi o responsável pela descoberta do que hoje conhecemos como supercondutores do tipo II, o que possibilitou a definição, mais tarde, dos dois tipos de supercondutores existentes: os do tipo I e do tipo

II. Ao primeiro (tipo I) admite-se todo aquele material que apresenta apenas um campo característico H_c distinguindo estado supercondutor do estado normal. Em contrapartida, supercondutores do tipo II comportam-se como observado por Shubnikov, com campos críticos H_{c1} e H_{c2} e um novo estado físico entre eles. A este estado físico atribui-se hoje o nome de estado misto ou estado de Shubnikov.

Após os trabalhos publicados pelos irmãos London, várias perguntas ainda não tinham resposta. As teorias existentes não conseguiam elucidar, por exemplo, por que o campo magnético crítico de uma determinada amostra dependia de sua forma física, filme fino ou “bulk”. Também não conseguia determinar a tensão superficial existente entre fases normal e supercondutora de um mesmo material. Todas estas dúvidas e várias outras serviram de “combustível” para os trabalhos de Ginzburg e Landau (GL) (Ginzburg & Landau, 1950). No ano de 1950, os dois publicaram uma teoria fenomenológica baseada na transição de fase de segunda ordem em um ferromagneto (Ginzburg & Landau, 1950). Utilizando-se da idéia da existência de um parâmetro de ordem, GL introduziram a função de onda complexa $\psi(r)$ interpretada como função de onda efetiva dos elétrons supercondutores. Caracterizando o estado supercondutor pelo parâmetro de ordem $n_s = \psi\psi^*$ (n_s definido, na época, como a densidade de superelétrons) e pelo potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, GL conseguiram apontar a existência não só do comprimento de penetração λ como também do comprimento de coerência ξ , este último associado à variação espacial de $\psi(\mathbf{r})$. Com isso, a teoria de GL ofereceu uma descrição robusta da maioria das propriedades macroscópicas dos supercondutores.

Tão logo o trabalho de GL foi publicado, vários foram os testes experimentais confirmando suas predições. Um dos cientistas a realizar estes testes foi N. Z. Zavaritzkii. O trabalho de Zavaritzkii chamou a atenção na época do seu colega de quarto, Alexei Abrikosov. Observando a violação das previsões de GL em alguns casos limites, Abrikosov conseguiu mais tarde interpretar a falsa instabilidade da fase mista, onde coexistem magnetismo e supercondutividade. Nesta região, Abrikosov demonstrou que a penetração de fluxo ocorre na forma de vórtices, isto é, fluxos magnéticos quantizados³, formando uma rede regular em um supercon-

³Vórtices em supercondutores caracterizam-se por serem redemoinhos no superfluido

dutor homogêneo (Abrikosov, 1957). Inicialmente predita como sendo quadrada, a rede de vórtices foi posteriormente descoberta ser de simetria hexagonal.

No mesmo ano do trabalho de Abrikosov, exatamente em 1957, John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer (Bardeen *et al.*, 1957) formularam o que veio a ser a primeira teoria microscópica completa para a supercondutividade. A teoria BCS representou o ponto fundamental no entendimento dos superfluidos isotrópicos carregados. A teoria foi capaz de descrever, basicamente, todos os resultados experimentais dos supercondutores de baixa temperatura conhecidos até então. Baseada na interação elétron-fônon, a teoria conseguiu prever a existência de um *gap* de energia da ordem de $3,5k_B T_c$ entre o estado fundamental e os estados excitados. Os elétrons supercondutores, conhecidos desde a teoria fenomenológica de London, eram então descritos como sendo pares de elétrons com direções de spin e momentum opostos (pares de Cooper) (Cooper, 1956). O comprimento de coerência ξ_0 foi provado descrever o tamanho dos pares de Cooper e o parâmetro de ordem proporcional ao *gap* de energia.

Após a teoria BCS o próximo grande avanço teórico foi dado por Brian D. Josephson em 1962 (Josephson, 1962). Ele previu a existência de uma corrente supercondutora fluindo entre dois eletrodos de material supercondutor separados por uma fina camada isolante. Entre estes mesmos eletrodos, uma diferença de fase é produzida entre os elétrons supercondutores gerando uma voltagem. O efeito Josephson, como é hoje conhecido, é a base para dispositivos eletrônicos de detecção de campos magnéticos ultra-sensíveis como o SQUID (*Superconducting Quantum Interference Device*).

No campo da ciência dos materiais, o grande avanço deu-se com a descoberta dos óxidos supercondutores de alta temperatura crítica T_c por J. G. Bednorz e K. A. Müller em 1986 (Bednorz & Muller, 1986). Apesar de inicialmente ter sido encarado como apenas uma possibilidade de encontrar supercondutividade um pouco acima do até então recorde da temperatura crítica ($T_c = 23,2\text{K}$ para o Nb_3Ge), o trabalho serviu como base para a descoberta da maioria dos materiais

eletrônico capazes de confinar a região de estado normal. Tratando-se, o estado supercondutor, de um fluido quântico, a circulação de corrente, bem como o fluxo magnético por ela encerrada, deve ser quantizada.

sintetizados hoje em dia com T_c acima de 40K. Materiais como o $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, o $\text{R}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-y}$, sendo $\text{R} = \text{Bi}$ ou T , e HgBaCaCuO são hoje conhecidos por possuir T_c da ordem de 90K, 110K e 130K, respectivamente.⁴

2.2 Propriedades fundamentais do estado supercondutor

Como dito anteriormente, a supercondutividade é caracterizada quando todo e qualquer material apresenta dois fenômenos: resistividade elétrica nula e diamagnetismo perfeito (efeito Meissner). Esta seção tem como objetivo descrever com mais detalhes essas duas propriedades fundamentais.

2.2.1 Resistividade elétrica nula

Hoje em dia, sabe-se que a maioria dos materiais que se apresentam no estado supercondutor são, no estado normal, metais ou semicondutores. Na ausência (presença) de campo magnético externo, tais materiais sofrem uma transição de fase de segunda (primeira) ordem em $T=T_c$ responsável pela mudança no comportamento resistivo. A resistividade abaixo de T_c nestes materiais é tal que, supondo supercondutores de baixa temperatura como o Nb, o limite superior pode ser estimado em torno de $10^{-23}\Omega \cdot \text{cm}$ (Chandrasekhar, 1969). Como pode-se ver, este valor é bem inferior aos valores conhecidos para a resistividade em um bom condutor como, por exemplo, o cobre cuja resistividade à 77K gira em torno de $10^{-7}\Omega \cdot \text{cm}$. Assim, para $T < T_c$, define-se que a resistividade de um supercondutor é zero ($\rho = 0$) à passagem de uma corrente elétrica dc ⁵.

⁴O material, conhecido hoje em dia, possuidor da maior temperatura crítica é o $(\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2})\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$ com T_c da ordem de 138K.

⁵Supercorrentes em supercondutores elementares de baixa temperatura (como Nb, por exemplo) demonstraram queda no seu valor de menos de 1% em anos de observação. Esta pequena queda foi resultado das flutuações termodinâmicas e não da existência de resistividade não-nula (Yeh *et al.*, 1987).

2.2.2 Efeito Meissner

Desde 1933, sabe-se que supercondutores, além de terem resistividade nula, possuem a peculiar característica de expelir o campo magnético externo quando submetidos a temperaturas abaixo de suas temperaturas críticas. Porém pode-se demonstrar que esta propriedade é bem diferente do que é encontrado em condutores perfeitos: lembrando que as equações de Maxwell do eletromagnetismo para um meio de permissividade elétrica ϵ_0 e permeabilidade magnética μ_0 são dadas (no sistema de unidades SI) por

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2.5)$$

se em um condutor perfeito temos que $\rho = 0$, como $\vec{E} = \rho \vec{J}$ (Lei de Ohm), o campo elétrico \vec{E} em seu interior é nulo. Se $\vec{E} = 0$, utilizando-se a equação (2.3) encontra-se que o campo magnético \vec{B} dentro da amostra, independente de sua história magnética, é constante. Assim, caso o campo tenha sido imposto antes da amostra ter sido submetida a baixas temperaturas, as linhas de fluxo ficarão aprisionadas no espécime condutor. Contudo, em um supercondutor do tipo I tem-se que necessariamente, pelo efeito Meissner, $\vec{B} = 0$ (e não $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$). Isto significa que, se a indução pode ser dada por

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.6)$$

a baixas temperaturas existirá uma magnetização \vec{M} resultante na amostra de

forma a induzir uma densidade de corrente dada por

$$\vec{J} = -\nabla \times \vec{M}, \quad (2.7)$$

onde na equação acima usou-se a equação (2.5), considerando $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0$. Logo, como

$$\vec{E} = \rho \vec{J}, \quad (2.8)$$

em um supercondutor tem-se que $\rho = 0$ e o diamagnetismo naturalmente induz resistividade nula (e não o inverso).

2.3 Termodinâmica do estado supercondutor

Como já demonstrado na seção 1.1, Onnes em 1914 estimou empiricamente o comportamento do campo crítico termodinâmico em função da temperatura através da relação (2.1). Porém, Onnes, a princípio, não imaginava que esta equação não apenas indicava a transição entre o estado supercondutor-normal, mas também qualificava esta como sendo uma transição reversível entre dois macroestados termodinâmicos. Hoje em dia, sabe-se que a passagem do estado supercondutor ao estado normal está associada à energia que deve ser doada no intuito de destruir as correntes de blindagem e os pares de Cooper no supercondutor. Da mesma forma, ela está associada à energia necessária para manter o campo fora do espécime. Assim, usando a energia livre de Gibbs tem-se que

$$G_s(T, 0) - G_n(T, 0) = \mu_0 \frac{H_a^2}{2}, \quad (2.9)$$

onde H_a é o campo aplicado. Ao longo da curva de campo magnético crítico em função da temperatura (fig. 2.1), no equilíbrio entre as duas fases, as energias livres de Gibbs dos estados normal e supercondutor são iguais. Considerando uma variação diferencial através desta curva e sabendo o valor da energia livre de Gibbs pode-se encontrar que a diferença de entropia entre os dois estados é dada

por

$$S_n - S_s = -\mu_0 H_c \left(\frac{\partial H_c}{\partial T} \right). \quad (2.10)$$

Usando as equações (2.1) e (2.10) pode-se encontrar que na ausência de campo externo (Poole & Creswick, 1995)

$$S_n - S_s = 2\mu_0 H_c^2(0) \left[\left(\frac{T}{T_c} \right) - \left(\frac{T^3}{T_c^4} \right) \right], \quad (2.11)$$

demonstrando assim que a entropia do estado normal é maior ou igual à entropia do estado supercondutor. Além disso, usando a equação (2.11) pode-se notar que na ausência de campo magnético externo a transição é contínua (transição de fase de segunda ordem), visto que em $T = T_c$, $S_n = S_s$, e descontinuidade ocorre apenas no calor específico. Em contrapartida, na presença de campo externo, a energia livre de Gibbs é acrescida, como já mencionado, de um termo proporcional a H_a^2 , independente de T . Isto faz com que haja uma descontinuidade na entropia e a transição seja de primeira ordem.

2.4 Modelagem microscópica e *gap* no espectro de energia

Depois das descobertas experimentais da supercondutividade (Onnes, 1911) e da superfluidez em hélio 4 (P. Kapitsa, em 1938)⁶ os cientistas começaram a ter certeza que algo realmente novo estava por trás das interações entre elétrons em um material supercondutor. Até então, já imaginava-se que a supercondutividade surgia do efeito coletivo entre os elétrons, mesmo que a interação entre eles fosse de natureza repulsiva. Já se sabia também que um gás de elétrons deveria obedecer à estatística de Fermi e, conseqüentemente, ocupar níveis sucessivos de energia.⁷

⁶Apesar de não ter sido citado anteriormente nesta tese, o trabalho de Kapitsa auxiliou a compreensão do estado supercondutor como um superfluido carregado. Por suas pesquisas em física de baixas temperaturas, Kapitsa recebeu o Nobel em 1978. Para um aprofundamento sobre o assunto, ver (Tilley & Tilley, 1990).

⁷O estado fundamental de um gás de Fermi corresponde ao completo preenchimento dos seus

Assim, algo a mais deveria existir na descrição do metal no estado supercondutor no intuito de gerar uma interação efetiva atrativa entre os elétrons. Este efeito atrativo deveria surgir da interação entre os elétrons e algum tipo de excitação no sólido. Dentre várias possibilidades, a única a obter êxito na descrição foi a interação elétron-fônon. A primeira importante motivação para se estudar a interação elétron-fônon foi a descoberta do efeito isótopo.⁸ Baseado no efeito isótopo, Frölich (1950) introduziu, pela primeira vez, o conceito de interação atrativa elétron-elétron mediada por fônons. Neste modelo, em um material no estado supercondutor, os elétrons sofrem espalhamento e absorção descrito por duas etapas, como mostra a figura 2.4. O efeito final de todo processo é que depois do

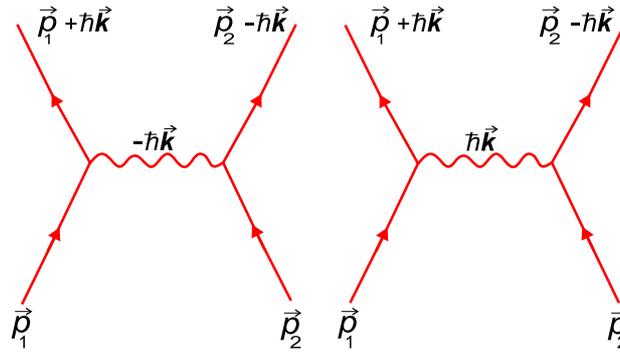


Figura 2.4: Representação da interação elétron-elétron via fônons (referencial do centro de massa do par de elétrons). No lado esquerdo (direito), emissão (absorção) de fonôn de momentum $-\hbar\vec{k}$ ($\hbar\vec{k}$) pelo elétron de momentum \vec{p}_1 (\vec{p}_2).

primeiro elétron polarizar o meio ao seu redor atraindo íons positivos, o segundo elétron é atraído pela alta concentração de carga resultante gerando uma intera-

níveis de energia, até um valor máximo conhecido como nível de Fermi. Seguindo o princípio de Pauli, o preenchimento destes níveis segue uma lógica tal que não mais de um elétron pode existir em cada nível energético específico.

⁸O efeito isótopo descreve a dependência dos parâmetros críticos T_c e H_c com a massa atômica do supercondutor de forma que

$$T_c \propto M^{-1/2}$$

$$H_c \propto M^{-1/2}.$$

ção elétron-elétron atrativa de curto alcance.⁹ Porém, a princípio, imaginava-se que atração entre elétrons não significava formação de um estado ligado. Este impasse só foi resolvido em 1956 por Cooper quando este mostrou que uma excitação atrativa entre dois elétrons, por menor que seja, perturba o mar de Fermi de modo a favorecer a formação de pares ligados de elétrons (pares de Cooper). Um ano mais tarde, Bardeen, Schrieffer e o mesmo Cooper descreveram, definitivamente, a formação de um condensado destes pares de elétrons (teoria BCS). Utilizando a idéia de uma função de onda macroscópica capaz de descrever os N elétrons do material, a teoria BCS conseguiu prever a existência de um *gap* de energia entre o estado fundamental e os estados de excitações de quase partículas. Este *gap* estima a ordem de energia necessária para excitar pares de elétrons movendo-se sem dissipação à um estado de energia maior suficiente para quebrá-los e destruir a supercondutividade. Seu valor deve ser máximo em $T = 0$, por não existir excitações térmicas capazes de dissociar os pares de Cooper, e igual a zero em $T = T_c$, onde a supercondutividade não deve mais existir. Assim, para supercondutores convencionais, tem-se que o *gap* é dado por $E_g = 2\Delta(T)$, onde

$$\Delta(T) \sim \begin{cases} \Delta(0)\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, & \text{se } T \approx T_c \\ \Delta(0), & \text{se } T \ll T_c \end{cases} \quad (2.12)$$

Na equação 2.12, $\Delta(0) = 1,746k_B T_c$.

⁹Na fig. (2.4), a amplitude do processo do lado esquerdo (direito) é dada por

$$\frac{|V_q|^2}{\epsilon_{\vec{k}_1}(\vec{k}_2) - \epsilon_{\vec{k}_1 - (+)\vec{q}} - \hbar\omega_q}$$

Levando em consideração que $\omega_{-\vec{q}} = \omega_{\vec{q}}$ e usando a conservação de energia, a amplitude total do processo é dada por

$$- \frac{\hbar^3}{p_F m v} \frac{(\hbar\omega_q)^2}{(\hbar\omega_q)^2 - (\epsilon_{\vec{k}_1} - \epsilon_{\vec{k}_1 - \vec{q}})^2},$$

onde na equação acima usou-se que $V_q \sim -i\frac{p_F}{\sqrt{v_{nm}}}$. Note que quando $|\epsilon_{\vec{k}_1} - \epsilon_{\vec{k}_1 - \vec{q}}| \ll \hbar\omega_q$ amplitude do processo é negativa e independente de \vec{k} . Isto é equivalente a uma atração de curto-alcance. Além disso, como o momento orbital total é nulo, a função de onda do sistema é simétrica. Lembrando ter partículas fermiônicas momento total anti-simétrico, a função de onda de spin deve então ser anti-simétrica.

2.5 Teorias fenomenológicas

2.5.1 Teoria de London

Idealizada pelos irmãos London, a teoria assume que em um supercondutor, elétrons normais e elétrons da fase supercondutora (superelétrons) coexistem (modelo de dois fluidos). Desta forma, usando as mesmas equações da eletrodinâmica para os superelétrons tem-se que a segunda lei de Newton pode ser escrita como (Tinkham, 1996)

$$m^* \frac{d\vec{v}_s}{dt} = -e^* \vec{E}, \quad (2.13)$$

onde m^* e e^* são a massa e a carga dos portadores de carga supercondutores, \vec{v}_s é a velocidade do superfluido e \vec{E} é o campo elétrico aplicado. Além disso, a densidade local de corrente superflúida pode ser dada por

$$\vec{j}_s = n_s e^* \vec{v}_s, \quad (2.14)$$

onde n_s é a densidade de superelétrons. Derivando temporalmente a equação (2.14) e comparando com a anterior (2.13) pode-se obter que

$$\vec{E} = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\lambda^2 \vec{j}_s). \quad (2.15)$$

A equação (2.15) acima é conhecida como a primeira equação de London. A segunda equação de London também pode ser obtida facilmente: aplicando o rotacional nos dois lados da equação (2.15) e usando a equação (2.3) tem-se que a segunda equação de London é dada por

$$\vec{b} = \nabla \times (\lambda^2 \vec{j}_s), \quad (2.16)$$

onde \vec{b} é o campo magnético local.

Nas duas últimas equações λ é o comprimento de penetração e é dado por

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^*}{\mu_0 n_s e^{*2}}}. \quad (2.17)$$

Como já dito na seção anterior, a equação de London foi a primeira teoria fenomenológica a estimar λ e descrever o efeito Meissner. A segunda equação de London, equação (2.16), descreve justamente o efeito Meissner. Uma melhor visualização do efeito pode ser encontrada aplicando o rotacional à equação (2.5) (onde $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0$) e usando as equações (2.4) e (2.16) de modo que¹⁰

$$\nabla^2 \vec{b} = \lambda^{-2} \vec{b}. \quad (2.18)$$

Para várias simetrias, a solução da equação acima têm dependência exponencial negativa com coeficiente de decaimento λ . Para supercondutores do tipo I, λ é da ordem de 500 Å.

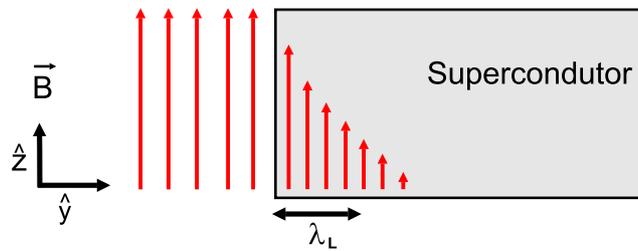


Figura 2.5: Dependência espacial em y do campo magnético aplicado $B\hat{z}$ a um supercondutor cujo comprimento de penetração é dado por λ .

2.5.2 Teoria de Ginzburg-Landau

Como demonstrado na seção 2.5.1, a teoria que descreve a supercondutividade a campo constante (teoria de London) relaciona densidades de corrente e campos de modo que pode-se estimar diretamente o comprimento característico λ , no qual o campo magnético externo penetra no supercondutor. Embora prática, a teoria de London é limitada a sistemas onde o campo magnético aplicado é

¹⁰Note que na equação (2.16) utilizou-se \vec{b} ao invés de \vec{B} para explicitar que o campo magnético é de escala microscópica. Em contrapartida, como em supercondutores no equilíbrio tem-se campo elétrico constante ou mesmo nulo, a diferença entre \vec{E} e \vec{e} torna-se desnecessária. A equação (2.18) também pode ser escrita como $\nabla^2 \vec{h} = \lambda^{-2} \vec{h}$, visto que localmente $\vec{b} = \mu_0 \vec{h}$.

muito menor que o campo crítico da amostra¹¹. A teoria de London também não pode ser aplicada a sistemas onde a densidade de elétrons supercondutores varia consideravelmente, equivalente a existir na amostra oscilações locais de temperatura. Oscilações na densidade de superelétrons, porém, acontecem na maioria das amostras supercondutoras. Nestes casos, convém utilizar uma aproximação macroscópica que consiga descrever efetivamente o comportamento dos campos magnéticos e do parâmetro de ordem. Idealizada em 1950, a teoria de Ginzburg-Landau (GL) preenche todos estes pré-requisitos. Baseando-se na transição de fase de segunda ordem para o ferromagnetismo, a teoria de GL oferece uma descrição fenomenológica simples e compatível com vários resultados experimentais, permitindo inclusive estudar a dinâmica de vórtices em supercondutores. A teoria de GL prevê que se existe uma função de onda ψ que descreve o fluido quântico e esta é pequena (o que acontece em $T \rightarrow T_C$) a energia livre de Helmholtz de um supercondutor, F_s , pode ser expandida na forma dada abaixo

$$F_s = F_{n0} + \int d^3r \left\{ \alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi(\vec{r})|^4 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left[\nabla - \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) \right|^2 + \frac{\mu_0}{2} |\vec{h}|^2 \right\}. \quad (2.19)$$

Na equação (2.19), o penúltimo termo revela a contribuição para a energia livre associada às variações espaciais do parâmetro de ordem (uma das limitações da teoria de London) e pode ser lido como $\frac{\vec{P}^2}{2m^*}$, onde \vec{P} é o momento canônico invariante de calibre. A densidade de fluxo magnético contribui com o último termo e corresponde à energia necessária para expulsar as linhas de fluxo do supercondutor e manter as correntes de blindagem. Os dois primeiros termos correspondem a contribuição do condensado à energia livre (expansão direta no parâmetro de ordem). Também na equação (2.19), $m^* = 2m$ e $e^* = 2e$ são, respectivamente, a massa e a carga dos pares de elétrons. A função de onda pode ser escrita sob a forma

$$\psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})| e^{i\phi(\vec{r})} \quad (2.20)$$

¹¹Desta forma, a teoria de London não é válida para campos de alta intensidade.

de modo que o parâmetro de ordem da transição fornecerá a concentração de elétrons supercondutores dependente da temperatura¹²

$$n_s = \psi\psi^* = |\psi(\vec{r})|^2 = n_0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]. \quad (2.21)$$

Na equação (2.21) a dependência de n_s com a temperatura pode ser obtida através da equação (2.1).

Ainda analisando a equação (2.19), deve-se destacar que as constantes α e β possuem magnitude e sinais específicos. A forma mais simples de observar isto é estudar o supercondutor no limite $T \rightarrow T_c$ em campo magnético nulo. Neste caso, o gradiente de ψ se anula de modo que a energia livre pode ser expandida em uma série de potências de $|\psi|^2$. Nessa aproximação, apenas os dois primeiros termos da equação (2.19) são utilizados e logo

$$F_s = F_{n0} + \int d^3r \left[\alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi(\vec{r})|^4 \right]. \quad (2.22)$$

Desde que o último termo domina para $|\psi|^2$ suficientemente alto, o coeficiente β precisa ser positivo, pois caso contrário a energia não apresentaria mínimo global (exceto para valores infinitos de ψ onde a expansão não é válida). Ao mesmo tempo, se $\beta > 0$, α precisa ser negativo, já que $\alpha > 0$ faz com que o único mínimo possível na energia livre seja em $\psi = 0$, onde o material está no estado normal. Logo, $\alpha < 0$ faz com que haja um mínimo na energia livre dado por $|\psi_\infty|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$. Utilizando este valor de mínimo na equação (2.22) tem-se que a diferença de energia livre entre os estados supercondutor e normal (necessária por

¹²Na equação (2.20), $\phi(\vec{r})$ é a fase da função de onda descrevendo o estado supercondutor dependente da posição. Seu valor absoluto não consegue ser medido, porém diferença de fase pode ser estimada levando em consideração pontos distintos de um supercondutor que, na maioria das vezes, são fracamente conectados.

manter fluxo magnético, vórtices, fora do supercondutor), neste limite, é dada por

$$F_s - F_{n0} = \int d^3r (f_s - f_{n0}) - \int d^3r \left(-\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\beta} \right), \quad (2.23)$$

onde f_s e f_{n0} são as densidades de energia livres da fase normal e supercondutora, respectivamente.¹³

No caso geral, onde existe campo magnético externo e gradiente de ψ , a presença de vínculos impostos por estes mesmos campos e pelas correntes induz a uma situação onde o equilíbrio do material se dá quando a energia livre do sistema é minimizada. Assim, as variações da energia livre em relação a ψ e $\vec{A}(\vec{r})$ devem ser nulas e expressas, respectivamente, por

$$\frac{\partial F_s}{\partial \psi} = \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A} \right)^2 \psi = 0 \quad (2.24)$$

e

$$\frac{\partial F_s}{\partial \vec{A}} = i\frac{\hbar e^*}{2m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{\vec{A} e^{*2}}{m^*} + \frac{\partial}{\partial \vec{A}} \left(\frac{b^2}{2\mu_0} \right) = 0. \quad (2.25)$$

Usando o gauge de Coulomb ($\nabla \cdot \vec{A} = 0$) e lembrando que $\mu_0 \vec{h} = \nabla \times \vec{A}$ tem-se que as duas equações anteriores podem ser transformadas em

$$\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A} \right)^2 \psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0 \quad (2.26)$$

e

$$\nabla^2 \vec{A} = -\vec{j}_s = -\nabla \times \vec{h} = \frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{\vec{A} e^{*2}}{m^*} |\psi|^2, \quad (2.27)$$

¹³Lembre que $G_s - G_n = \mu_0 \frac{H_c^2}{2}$. Como a diferença de energia livre de Gibbs e Helmholtz, na ausência de campos externos, equivalem-se, α e β podem dar uma estimativa do campo crítico da amostra de modo que $\frac{\alpha^2}{2\beta} = \frac{\mu_0}{2} H_c^2$.

respectivamente.¹⁴Na equação (2.27), \vec{j}_s é a densidade de corrente dos superelétrons. As equações (2.26) e (2.27) são duas equações diferenciais acopladas envolvendo o parâmetro de ordem e o potencial vetor e correspondem, respectivamente, à primeira e à segunda equação de Ginzburg-Landau. A resolução deste sistema de equações dá, na presença de condições de contorno apropriadas, as propriedades do estado supercondutor.

2.5.3 Comprimentos característicos

As duas escalas importantes de comprimento característico λ e ξ podem ser derivadas das equações de GL (2.26) e (2.27). Para isto, suponha que o valor do campo magnético aplicado e das correntes sejam nulos de modo que $\psi = \psi^*$. Assim, $\vec{A} = 0$ e, levando em consideração apenas uma dimensão (no eixo x), a equação (2.26) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\psi + \beta\psi^3 = 0. \quad (2.28)$$

Para o caso de um supercondutor homogêneo, a última equação pode ser reescrita sob a forma (Tinkham, 1996)

$$\xi^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + f - f^3 = 0, \quad (2.29)$$

onde $f = \frac{\psi}{\psi_\infty}$ e

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha(T)|^2}. \quad (2.30)$$

ξ é um dos comprimentos característicos de um supercondutor e mede a extensão de coerência do parâmetro de ordem ψ , distância em que ψ varia apreciavelmente, próximo a uma região no estado normal. Levando em consideração que a

¹⁴Note que a equação (2.26) tem a forma de uma equação de Schrödinger para uma partícula de carga $e^* = 2e$ e autoenergia $-\alpha$. Além disso, o termo não-linear contido nela atua como um potencial repulsivo de modo a favorecer funções de onda ψ descrevendo estados tão espacialmente espalhados e uniforme quanto possíveis.

dependência de α com a temperatura é dada por¹⁵

$$\alpha(T) = \alpha_0(T - T_c), \quad (2.31)$$

onde α_0 é uma constante dependente do material, o comprimento de coerência pode ser escrito na forma

$$\xi(T) \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2}. \quad (2.32)$$

Assim, como poderia se esperar, ξ diverge em $T \approx T_c$. Além disso, deve-se frisar que $\xi(T)$ encontrado na equação (2.30) relaciona-se diretamente com ξ_0 obtido na teoria BCS, de maneira que

$$\xi(T) = 0,74 \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}}, \text{ se } \ell_{el} \gg \xi_0 \quad (2.33)$$

e

$$\xi(T) = 0,855 \sqrt{\frac{\xi_0 \ell_{el}}{\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}}, \text{ se } \ell_{el} \ll \xi_0. \quad (2.34)$$

Nas duas últimas expressões, ℓ_{el} é o caminho livre médio elástico dos elétrons normais. A equação (2.33) só é válida no “limite limpo” quando $T \approx T_c$. Em contrapartida, o “limite sujo” faz com que a equação (2.34) seja válida para um largo intervalo de temperatura.

Da mesma forma, o outro comprimento característico, λ , pode ser obtido usando a segunda equação de GL. Usando condições semelhantes, isto é, para campo magnético fraco e baixas temperaturas, $|\psi|^2 \approx |\psi_\infty|^2$ e a equação (2.27)

¹⁵Lembre que se $\alpha > 0$, o único mínimo na energia livre é dado em $|\psi|^2 = 0$. Se $\alpha < 0$, o mínimo será dado em $|\psi|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$. Assim, $\alpha(T)$ deve mudar de sinal em $T = T_c$. Fazendo uma expansão em série de Taylor de $\alpha(T)$ em torno de T_c e mantendo apenas o termo superior chega-se a equação (2.31)

torna-se

$$\vec{j}_s = -\frac{\vec{A}e^{*2}}{m^*}|\psi|^2. \quad (2.35)$$

Aplicando o rotacional em ambos os lados da equação (2.35) e usando o gauge de Coulomb tem-se que

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

o que retorna a equação (2.16). Assim, do mesmo modo como foi obtido na seção 1.5.1

$$\lambda = \left(\frac{m^*}{\mu_0 e^{*2} |\psi_\infty|^2} \right)^{1/2}. \quad (2.37)$$

Desde que¹⁶ $|\psi|^2 \propto |\alpha| \propto (T_c - T)$, $\lambda(T)$ pode ser escrito como

$$\lambda(T) \approx \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}}. \quad (2.38)$$

Note que $\lambda(T)$ possui a mesma dependência com a temperatura que $\xi(T)$. Usando este fato, pode-se definir uma grandeza independente da temperatura e adimensional κ . κ é conhecido como o parâmetro de Ginzburg-Landau e é dado por $\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)}$. Seu valor é extremamente importante para a definição do tipo de supercondutor.

Finalmente, semelhante ao que ocorre com ξ , o valor de λ encontrado nas equações de GL e na teoria BCS relacionam-se de modo que no “limite limpo” e “limite sujo” tem-se, respectivamente

$$\lambda(T) = 0,71 \frac{\lambda_L(0)}{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}}, \text{ se } \ell_{el} \gg \xi_0 \quad (2.39)$$

¹⁶Lembre que β é uma constante independente da temperatura.

e

$$\lambda(T) = 0,64\lambda_L(0) \sqrt{\frac{\xi_0}{\ell_{el} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}}, \text{ se } \ell_{el} \ll \xi_0. \quad (2.40)$$

2.5.4 Validade da teoria de Ginzburg-Landau (GL)

Como mencionado no início da seção 2.5.2, a teoria de GL é baseada na transição de fase de segunda ordem em ferromagnetos. Logo, a energia livre do estado supercondutor é uma soma de potências de ψ , visto que a magnitude da função de onda próximo a T_c é pequena. Porém, em geral, assumir que a energia livre pode ser expandida de tal forma não é válido, especialmente na presença de efeitos de curto alcance que torna a eletrodinâmica não-local. Em 1959, L. P. Gorkov (de Gennes, 1975) estimou os limites de aplicabilidade das equações de GL levando em consideração a pureza das amostras. Para isto, Gorkov demonstrou ser possível a obtenção das equações a partir da teoria microscópica BCS enfatizando os seguintes critérios (Milosevic, 2004):

- A função de onda ψ deve variar suavemente em distâncias da ordem de ξ_0 . Assim, uma condição necessária para a validade da teoria é que $\xi(T) \gg \xi_0$. Usando a relação dada por (2.34), no “limite sujo” tem-se que a última condição é o mesmo que $1 - \frac{T}{T_c} \ll 1$, e logo, neste limite, a teoria de GL é aplicável em um largo intervalo de temperatura.
- As relações locais entre a corrente e o potencial vetor usadas na teoria de GL devem ser válidas apenas se \vec{H} e \vec{A} variarem suavemente em distâncias da ordem de ξ_0 . Para que isto seja verdade, tem-se que $\lambda(T) \gg \xi_0$ que é equivalente a, usando a relação (2.39), $1 - \frac{T}{T_c} \ll \left(\frac{\lambda(0)}{\xi_0}\right)^2$. Assim, no “limite limpo”, a teoria GL é válida estritamente para $T \approx T_c$.

Enfim, embora a teoria de GL seja, a princípio, limitada a temperaturas próximas à T_c , o fato de que a ampla maioria das amostras supercondutoras utilizadas hoje em dia na tecnologia seja enquadrada como estando no “limite sujo” torna a teoria uma boa ferramenta para estudar as propriedades do supercondutor.

2.6 O estado Misto (Fase de Shubnikov)

Como já citado anteriormente, os materiais supercondutores podem ser classificados, referente à sua resposta a um campo magnético externo, em duas principais categorias: supercondutores do tipo I e supercondutores do tipo II. Supercondutores do tipo I apresentam comportamento semelhante ao encontrado por Meissner, isto é, duas fases, supercondutora e normal, caracterizando a expulsão das linhas de fluxo da amostra em uma transição de segunda (primeira) ordem na ausência (presença) de campo externo. Em contrapartida, supercondutores do tipo II possuem diagrama de fase mais complexo. O estado Meissner, isto é, a total expulsão das linhas de campo, só ocorre para uma estreita faixa $H < H_{c1}$, onde H_{c1} é definido como o campo crítico inferior. Este valor de campo é menor que o campo crítico termodinâmico H_c . Quando o material é submetido a campos superiores a H_{c1} o estado Meissner é substituído por uma fase onde magnetismo e fase supercondutora coexistem. Tal fase, chamada de fase mista ou fase de Shubnikov, caracteriza-se pela presença de linhas de fluxo magnético quantizadas (estas linhas de fluxo, conhecidas como vórtices, nada mais são do que defeitos topológicos no condensado supercondutor). Quando o campo aplicado alcança valor superior a H_{c2} , supercondutividade é totalmente destruída. O campo crítico superior, H_{c2} , é geralmente muito superior ao campo crítico termodinâmico H_c .¹⁷

Uma forma alternativa e direta de classificar o supercondutor é observar a magnitude do seu parâmetro de Ginzburg-Landau κ . Como mostrado na seção 2.5.3, κ é adimensional e independente da temperatura. Seu valor irá depender diretamente das propriedades do material de modo que tem-se¹⁸

$$\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ para supercondutores do tipo I} \quad (2.41)$$

¹⁷Supercondutividade pode existir também para valores acima de H_{c2} . Em supercondutores tipo II semi-infinitos, a interface supercondutor/vácuo apresenta o fenômeno em uma fina camada de espessura da ordem de $\xi(T)$ até valores de campo de $H_{c3} = 1,69H_{c2}$. H_{c3} é conhecido como campo crítico de superfície.

¹⁸O valor de $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$ é exato e foi calculado por Abrikosov.

e

$$\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ para supercondutores do tipo II.} \quad (2.42)$$

A diferença entre supercondutores do tipo I e do tipo II pode, também, ser explicitada pelo comportamento da magnetização frente ao campo, como mostrado na figura (2.6). Se a magnetização \vec{M} é dada por

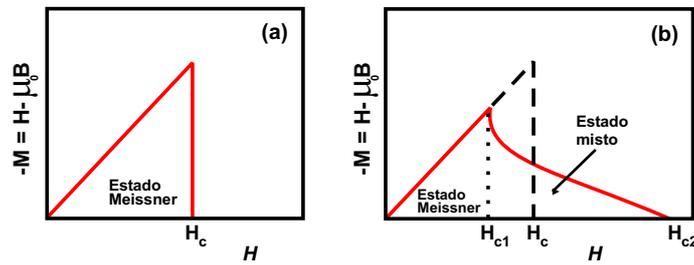


Figura 2.6: Magnetização de equilíbrio em função do campo magnético externo em um supercondutor do tipo I (a) e II (b). Perceba os diferentes comportamentos dos dois tipos e os campos críticos referentes.

$$\mu_0 \vec{M} = \vec{B} - \mu_0 \vec{H}, \quad (2.43)$$

tem-se que para supercondutores do tipo I

$$\vec{M} = \begin{cases} -\vec{H}, & \text{se } H < H_c \\ 0, & \text{se } H > H_c. \end{cases} \quad (2.44)$$

Para supercondutores do tipo II, diferente do caso acima, o valor da magnetização é dado por $\vec{M} = -\vec{H}$ até H alcançar H_{c1} . Acima deste valor, a magnetização é acrescida devido a entrada de linhas de fluxo até o valor limite de H_{c2} , onde a supercondutividade é destruída.

2.6.1 A quantização do fluxo magnético: vórtices

Como dito na seção anterior, vórtices aparecem naturalmente no estado misto

coexistindo com a fase supercondutora e podem ser interpretados como defeitos topológicos. Por sua vez, defeitos topológicos são classes de defeitos caracterizados por distorções na configuração de estado fundamental espacialmente constante (o que equivaleria em um supercondutor ao estado Meissner) e que resultam na impossibilidade de sua eliminação por simples deformação do meio. Estas distorções surgem da imposição de condições de contorno, de campos externos ou de flutuações térmicas e resultam, na sua maioria, na quebra da simetria contínua.¹⁹ Enfim, vórtices podem ser vistos como sendo singularidades existentes no superfluido eletrônico e, como tal, podem ser obtidos das equações fenomenológicas existentes.

2.6.2 Estrutura de um vórtice

Suponha um material supercondutor do tipo II com comprimento de coerência ξ pequeno e muito menor que o comprimento de penetração λ (características semelhantes às encontradas na maioria dos supercondutores do tipo II aplicados hoje em dia). Neste limite, pode-se considerar que $|\psi|^2$ é aproximadamente constante na amostra, exceto próximo ao núcleo do vórtice, de forma que o único termo a contribuir significativamente para a variação espacial de ψ é a sua fase. Assim, utilizando-se das equações (2.20) e (2.27) tem-se que a densidade de corrente superflúida é dada por

$$\vec{j}_s = \frac{e^*|\psi|^2}{m^*} (\hbar\nabla\varphi - e^*\vec{A}). \quad (2.45)$$

Em face da equação (2.45), pode-se obter a quantização do fluxo magnético bem como a equação eletromagnética de um supercondutor na presença de vórtices.

¹⁹Pode ser demonstrado que defeitos topológicos como vórtices não desaparecem através de deformações contínuas do parâmetro de ordem que caracteriza o estado (em supercondutores, $n_s = |\psi|^2$), pois são eles estruturas estáveis. Além disso, apesar de terem energia livre maior que a do estado fundamental, o custo energético para transformar uma região na presença de vórtices em uma estrutura estável fundamental sem defeitos é alto. Consequentemente, não existe caminho para o estado fundamental que seja energeticamente viável.

No primeiro caso, basta integrá-la em um circuito fechado Γ , de modo que

$$\Phi = \oint_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{\Phi_0}{2\pi} \oint_{\Gamma} \nabla\varphi \cdot d\vec{l} - \lambda^2 \oint_{\Gamma} \vec{j}_s \cdot d\vec{l}, \quad (2.46)$$

onde $\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 2,07 \times 10^{-15} \text{ T m}^2$ é conhecido como o quantum de fluxo magnético. Se o circuito fechado for um anel supercondutor com diâmetro muito maior que λ , pode-se escolher uma região distante o bastante para que \vec{j}_s seja aproximadamente zero e, logo, o segundo termo na expressão (2.46) seja desprezível. O termo restante, $\oint_{\Gamma} \nabla\varphi \cdot d\vec{l}$, dá simplesmente $\Delta\varphi = 2\pi n$ e assim

$$\Phi = n\Phi_0 \quad (2.47)$$

vai dar o fluxo total na amostra, fluxo este quantizado em unidades de Φ_0 , com número de “ondulação” n . No segundo caso, a obtenção da equação do estado supercondutor na presença de vórtices, aplicando o rotacional em ambos os lados da equação (2.45) tem-se que

$$\nabla \times \vec{j}_s = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\lambda^2} \nabla \times \nabla\varphi - \frac{1}{\lambda^2} \vec{h}. \quad (2.48)$$

Considerando a presença de apenas um vórtice (vórtice i) paralelo ao eixo z e estando este localizado em $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$ no plano xy pode-se obter, integrando a equação acima na superfície xy ,

$$\begin{aligned} \int d^2r \vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{j}_s) &= \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\lambda^2} \int d^2r \vec{n} \cdot (\nabla \times \nabla\varphi) - \frac{1}{\lambda^2} \int d^2r \vec{n} \cdot \vec{h}. \\ &= \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\lambda^2} \oint d\vec{l} \cdot \nabla\varphi - \frac{1}{\lambda^2} \int d^2r \vec{n} \cdot \vec{h} \\ &= \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\lambda^2} 2\pi L - \frac{1}{\lambda^2} \int d^2r \vec{n} \cdot \vec{h}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde L , assim como n na equação (2.47), representa a força ou ondulação do vórtice. Note que na equação (2.49) utilizou-se o teorema de Stokes na parcela que manipula a variação da fase do parâmetro de ordem. Este termo está ligado à vorticidade da fase supercondutora. Segundo a última equação, a vorticidade

pode ser dada por

$$\vec{\nu}(\vec{r}, \vec{r}_i) = \hat{z} L \delta(\vec{r} - \vec{r}_i). \quad (2.50)$$

Desse modo, usando o valor da vorticidade dada pela equação (2.50), pode-se reescrever a expressão (2.48) na seguinte forma

$$-\lambda^2 \nabla^2 \vec{h} + \vec{h} = \frac{\Phi_0}{\mu_0} \vec{\nu}(\vec{r}, \vec{r}_i) \quad (2.51)$$

Como pode-se notar, a equação acima corresponde à mesma obtida em (2.18) por London, porém agora incluindo o termo correspondente à presença de um vórtice em $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$. Assim, a teoria de London é uma boa aproximação do comportamento dos campos em um supercondutor do tipo II se a presença de vórtices for inserida na forma de singularidades. Isto é equivalente a impor o limite $\xi \rightarrow 0$, o que é verdadeiro para um supercondutor onde $\lambda \gg \xi$.

A resolução da equação (2.51) pode ser obtida tanto diretamente no espaço real quanto usando transformada de Fourier. No espaço real, é adequado, em virtude da simetria do problema, escrever a expressão (2.51) em coordenadas cilíndricas de modo que

$$h_z - \lambda^2 \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dh_z}{dr} \right) \right) = \frac{\Phi_0}{\mu_0} L \delta(\vec{r} - \vec{r}_i). \quad (2.52)$$

A equação (2.52) é um caso especial de equação de Bessel e, logo, conhecida por ter como solução a função de Bessel modificada de ordem zero e argumento imaginário K_0 . Assim, tem-se que

$$\vec{h} = \frac{L\Phi_0}{2\pi\lambda^2\mu_0} K_0 \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{\lambda} \right) \hat{z}. \quad (2.53)$$

No entanto, para funções de Bessel do tipo $K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \right)$, sabe-se que quando $\frac{r}{\lambda}$ é pe-

queno²⁰ $K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \approx \ln\left(\frac{\lambda}{r}\right)$. No limite oposto, para $\frac{r}{\lambda}$ grande, $K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \approx \left(\frac{\pi\lambda}{2r}\right)^{1/2} e^{-(r/\lambda)}$. Assim, \vec{h} irá divergir no núcleo do vórtice, em consequência do fato de que $\xi \rightarrow 0$, e será irregular em $r = r_i$. Uma maneira de superar esta limitação na equação de London é adotar o procedimento de truncagem de Clem²¹, um “cutoff”, de modo a possibilitar o cálculo de \vec{h} próximo a ξ (Clem, 1975). Usando este artifício, pode-se escrever a equação (2.53) na forma

$$\vec{h} = \frac{L\Phi_0}{2\pi\lambda^2\mu_0} K_0\left(\frac{(|\vec{r} - \vec{r}_i|^2 + 2\xi^2)^{1/2}}{\lambda}\right) \hat{z}. \quad (2.54)$$

2.6.3 Energia de um vórtice

Como já foi dito, um material supercondutor é um sistema composto de elétrons movendo-se de maneira coletiva, um superfluido, e assim desprovido de viscosidade (conceito retirado da física do hélio 4). A energia livre deste superfluido, F_s , consiste de duas partes principais:

$$F_s = \frac{1}{2} \int n_s m^* v^2(\vec{r}) d^3r + \frac{1}{2} \int d^3r \mu_0 |\vec{h}(\vec{r})|^2, \quad (2.55)$$

onde a primeira e a segunda parcela são a energia cinética do superfluido e a energia devido ao campo magnético aplicado. Usando as equações (2.14) e (2.17)

²⁰Note que como $K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \approx \ln\left(\frac{\lambda}{r}\right)$, para $r \gg \lambda$, se $\vec{j} = \nabla \times \vec{h} = -\frac{dh_z}{dr} \hat{\theta}$ então

$$\vec{j} = \frac{eh}{2\pi mr} n_s.$$

Usando a expressão (2.14) obtém-se que

$$\vec{v}_s = \frac{h}{2\pi mr} \hat{\theta},$$

isto é, a velocidade do superfluido é quantizada e na direção azimutal $\hat{\theta}$. Este perfil de velocidade corresponde ao modelo de um vórtice em um fluido de modo que é apropriado falar que o sistema é composto de vórtices quantizados.

²¹Entre vários, o “cutoff” de Clem é um dos mais utilizados pois, apesar de sua simplicidade, ele reproduz exatamente a solução de GL para $\lambda \gg \xi$.

pode-se obter que²²

$$\begin{aligned}
 F_s &= \frac{1}{2} \int d^3r \mu_0 \lambda^2 j_s^2 + \frac{1}{2} \int d^3r \mu_0 |\vec{h}(\vec{r})|^2 \\
 &= \frac{\mu_0}{2} \int d^3r \left[\lambda^2 |\nabla \times \vec{h}|^2 + |\vec{h}(\vec{r})|^2 \right] \\
 &= \frac{\mu_0}{2} \int d^3r \left\{ \lambda^2 \left[\vec{h} \cdot (\nabla \times \nabla \times \vec{h}) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \nabla \cdot (\vec{h} \times \nabla \times \vec{h}) \right] + |\vec{h}(\vec{r})|^2 \right\}. \tag{2.57}
 \end{aligned}$$

Pelo teorema da divergência

$$\int \nabla \cdot (\vec{h} \times \nabla \times \vec{h}) d^3r = \oint (\vec{h} \times \nabla \times \vec{h}) \cdot \hat{n} d^2r \tag{2.58}$$

de modo que a equação (2.57) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 F_s &= \frac{\mu_0}{2} \int d^3r \left[\lambda^2 \vec{h} \cdot (\nabla \times \nabla \times \vec{h}) + |\vec{h}(\vec{r})|^2 \right] + \\
 &\quad + \frac{\mu_0 \lambda^2}{2} \oint d^2r \cdot (\vec{h} \times \nabla \times \vec{h}). \tag{2.59}
 \end{aligned}$$

Como nesta aproximação o núcleo do vórtice não é levado em consideração, a primeira parcela da lado direito da equação (2.59) é nula (veja equação (2.51) onde $\nu = 0$). A segunda integral é resolvida usando dois caminhos circulares com conexões do círculo maior ao menor (e vice-versa) próximos um ao outro no intuito

²²Aqui faz-se necessária a utilização da identidade vetorial dada abaixo (Jackson, 1999):

$$\nabla \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{b} \cdot (\nabla \times \vec{a}) - \vec{a} \cdot (\nabla \times \vec{b}),$$

válido para vetores \vec{a} e \vec{b} quaisquer. Se $\vec{a} = \nabla \times \vec{b}$, tem-se que

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{b} \times \vec{b}) = \vec{b} \cdot (\nabla \times \nabla \times \vec{b}) - |\nabla \times \vec{b}|^2,$$

e assim

$$|\nabla \times \vec{b}|^2 = \vec{b} \cdot (\nabla \times \nabla \times \vec{b}) + \nabla \cdot (\vec{b} \times \nabla \times \vec{b}) \tag{2.56}$$

de cancelar a contribuição do elo de ligação entre eles, como mostra a figura (2.7).

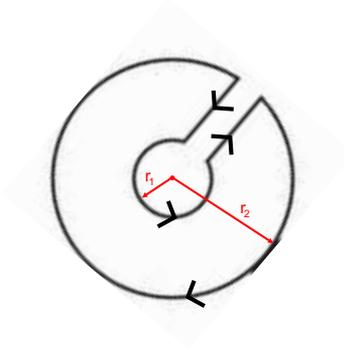


Figura 2.7: Caminho de integração realizada na equação (2.59).

Assim, adota-se um caminho com raio infinito e outro de raio igual a ξ de modo a obter da equação (2.59)

$$\begin{aligned} F_s &= -\frac{\mu_0}{2}\lambda^2 \oint d^2r \cdot \left(\vec{h} \times \left(\hat{\phi} \frac{\partial h_z}{\partial r} \right) \right) \\ &= \frac{\mu_0 \lambda^2}{2} \left[h \frac{dh}{dr} 2\pi r \right]_{r=\xi} - \left[h \frac{dh}{dr} 2\pi r \right]_{r \rightarrow \infty}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Como $h(r \rightarrow \infty) = 0$, o segundo termo da equação acima se anula. Quanto ao primeiro termo, adote uma aproximação (“cutoff”) e assim, como $\xi \ll r \ll \lambda$, pode-se escrever (Tinkham, 1996)

$$\vec{h}(\vec{r}) \approx \frac{L\Phi_0}{2\pi\lambda^2\mu_0} \left[\ln \frac{\lambda}{r} + 0, 12 \right] \quad (2.61)$$

de modo que a energia ϵ_v de um sistema contendo um vórtice é dada aproximadamente por

$$F_s = \epsilon_v = \frac{1}{4\pi\mu_0} \left(\frac{L\Phi_0}{\lambda} \right)^2 \ln \kappa. \quad (2.62)$$

Perceba na equação acima que a energia do vórtice é proporcional ao quadrado de sua vorticidade. Assim, é energeticamente mais favorável o sistema possuir mais vórtices com um quantum de fluxo cada ao invés de menos vórtices cada um com

vários quanta de fluxo.

2.6.4 Interação entre linhas de vórtices

Suponha dois vórtices i e j localizados nos pontos $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$ e $\vec{r}_j = (x_j, y_j)$, respectivamente. Estes vórtice são tubos de fluxo quantizados retilínios e paralelos ao eixo \hat{z} . Devido à distribuição local de correntes, o vórtice $i(j)$ sentirá a presença do vórtice $j(i)$. A forma da interação, por unidade de comprimento, entre eles é dada simplesmente por

$$\vec{f}_L^{(i)} = \vec{j}_s^{(j)}(\vec{r}_i) \times (\Phi_0 \hat{z}), \quad (2.63)$$

onde na equação (2.63) o vórtice i sente uma força do tipo Lorentz na sua posição \vec{r}_i devido ao outro vórtice presente na posição \vec{r}_j e que induz densidades de corrente $\vec{j}_s^{(j)}$. Usando que $\vec{j}_s = \nabla \times \vec{h}$ tem-se que

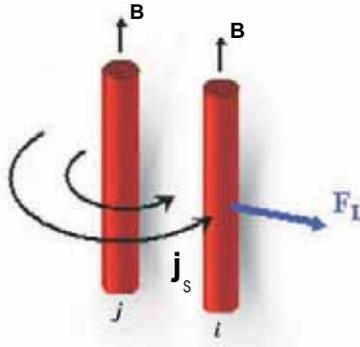


Figura 2.8: Representação da interação (tipo Lorentz) entre vórtices i e j gerada por uma corrente \vec{J}_s .

$$\vec{f}_L^{(i)} = -\hat{r}_{ij} \Phi_0 \frac{\partial h^{(j)}(\vec{r}_i)}{\partial r_i} = \frac{\Phi_0^2}{2\pi \lambda^3 \mu_0} K_1 \left(\frac{r}{\lambda} \right) \hat{r}_{ij}, \quad (2.64)$$

onde na equação (2.64) $\vec{r}_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, K_1 é a função de Bessel modificada de primeira ordem e $\frac{dK_0(x)}{dx} = -K_1(x)$. A energia de interação entre dois vórtices pode ser inferida lembrando-se que $\vec{f}_L = -\nabla U_{vv}$, de forma que usando a equação

(2.64) tem-se

$$U_{vv}(r_{ij}) = \Phi_0 h(r_{ij}) = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\lambda^2\mu_0} K_0\left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right), \quad (2.65)$$

a menos de um fator constante. Assim, a energia total E_T do sistema pode ser dada pela soma das contribuições das energias individuais de cada vórtice, equação (2.62), mais a interação vórtice-vórtice. Supondo um sistema na presença de n vórtices, tem-se que (de Gennes, 1975)

$$E_T = \sum_{i=1}^n \epsilon_{v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j(\neq i)=1}^n U_{vv}(r_{ij}). \quad (2.66)$$

2.6.5 Vórtices em sistemas bidimensionais

Considere um material de espessura d , um filme fino, pequena ao ponto que $d \ll \lambda$. Desta forma, campos e correntes são praticamente constantes ao longo da espessura e os vórtices podem ser vistos como objetos pontuais. O campo magnético dos vórtices distribui-se tridimensionalmente fora do filme e, logo, a melhor maneira de descrever tal sistema é escrever sua equação em termos do potencial vetor \vec{A} e da corrente, visto serem estes confinados no plano do filme. Então, se existe uma vorticidade dada pela equação (2.50), pode-se definir um vetor \vec{S} dado por

$$\nabla \times \vec{S} = \Phi_0 \vec{\nu} \quad (2.67)$$

de forma que a equação (2.51) pode ser escrita como

$$-\lambda^2 \nabla^2 \vec{b} + \vec{b} = \nabla \times \vec{S} \quad (2.68)$$

ou

$$\lambda^2 (\nabla \times \nabla \times \vec{b}) + \nabla \times \vec{A} = \nabla \times \vec{S}, \quad (2.69)$$

e logo²³

$$\mu_0 \lambda^2 \vec{j}_s + \vec{A} = \vec{S} = \frac{\Phi_0}{2\pi r}. \quad (2.70)$$

Tomando a média na espessura do filme, pode-se obter que, se $\vec{J}_s = \int dz \vec{j}_s = j_s d$,

$$\vec{J}_s = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} (\vec{S} - \vec{A}) d = \frac{1}{\mu_0 \Lambda} (\vec{S} - \vec{A}), \quad (2.71)$$

onde $\Lambda = \frac{\lambda^2}{d}$ é conhecido ser o comprimento de penetração efetivo. A equação acima pode ser escrita apenas em termos do potencial vetor \vec{A} e do vetor \vec{S} utilizando-se a igualdade $\mu_0 \vec{j} = \nabla \times \nabla \times \vec{A} = -\nabla^2 \vec{A}$. Desta forma, a equação (2.71) fica

$$-\nabla^2 \vec{A} + \frac{\delta(z)}{\Lambda} \vec{A} = \frac{\delta(z)}{\Lambda} \vec{S}. \quad (2.72)$$

Para resolver a equação acima introduz-se a transformada de Fourier em três dimensões. Neste caso, sendo

$$\vec{A}_{qk} = \int \vec{A}(x, y, z) e^{i(q_x x + q_y y + kz)} dx dy dz \quad (2.73)$$

e as transformações em duas dimensões

$$\vec{A}_q = \frac{1}{2\pi} \int dk \vec{A}_{qk} = \int \vec{A} \delta(z) e^{i(q_x x + q_y y)} e^{ikz} dx dy dz = i \frac{\Phi_0}{q^2} \hat{n}_z \times \vec{q} \quad (2.74)$$

integrando a equação (2.72) tem-se que

$$-(q^2 + k^2) \vec{A}_{qk} + \frac{1}{\Lambda} \vec{A}_q = \frac{1}{\Lambda} \vec{S}_q, \quad (2.75)$$

e logo

$$\vec{A}_{qk} = \frac{1}{\Lambda} (\vec{A}_q - \vec{S}_q) \frac{1}{[q^2 + k^2]}. \quad (2.76)$$

²³Nesta equação, usou-se a identidade $\nabla \times (\frac{1}{r}) = \hat{\theta} 2\pi \delta(r)$

Segundo a equação (2.74), \vec{A}_q pode ser dado por

$$\vec{A}_q = \frac{1}{2\pi\Lambda} \int dk \frac{1}{q^2 + k^2} (\vec{A}_q - \vec{S}_q). \quad (2.77)$$

Usando a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikz}}{q^2 + k^2} = \frac{\pi}{|q|} e^{-|qz|} \quad (2.78)$$

tem-se que

$$\begin{aligned} \vec{A}_q &= \frac{1}{2\pi\Lambda} \int dk \frac{1}{q^2 + k^2} \left[\int \vec{A}\delta(z) e^{i(q_x x + q_y y + kz)} \right. \\ &\quad \left. - \int \Phi\delta(z) e^{i(\Phi_x x + \Phi_y y + kz)} \right] dx dy dz \\ &= \frac{1}{2\pi\Lambda} \frac{\pi}{q} \left\{ \int \left[\vec{A}\delta(z) e^{i(q_x x + q_y y - qz)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \Phi\delta(z) e^{i(\Phi_x x + \Phi_y y - qz)} \right] dx dy dz \right\} \\ &= -\frac{1}{2q\Lambda} (\vec{A}_q - \vec{\Phi}_q). \end{aligned} \quad (2.79)$$

A última expressão pode ser re-escrita lembrando que $\vec{\Phi}_q = \vec{S}_q$ e, assim,

$$\vec{A}_q = \vec{\Phi}_q \left(\frac{1}{1 + 2q\Lambda} \right). \quad (2.80)$$

Usando a equação (2.80) na expressão (2.71) encontra-se que

$$\vec{J}_q = \frac{1}{\mu_0\Lambda} (\vec{S}_q - \vec{A}_q) = \frac{1}{\mu_0\Lambda} \vec{S}_q \frac{2\Lambda q}{1 + 2q\Lambda}. \quad (2.81)$$

Considerando que

$$\vec{S}_q(\vec{q}) = i\Phi_0 \frac{\hat{z} \times \vec{q}}{q^2}, \quad (2.82)$$

tem-se que a equação (2.81) pode ser escrita como

$$\vec{J}(\vec{q}) = \frac{i\Phi_0}{\mu_0\Lambda} \frac{(\hat{z} \times \vec{q})}{q^2 + q(2\Lambda)^{-1}}. \quad (2.83)$$

A equação (2.83) é conhecida ser a solução de Pearl (Pearl, 1964) para vórtices em duas dimensões. Sendo a interação entre dois vórtices integrada sob o comprimento do fluxo dada pela equação (2.63) no espaço de Fourier, tem-se que a força de Lorentz em duas dimensões é dada por

$$\vec{F}_L(\vec{q}) = \Phi_0 \vec{J}(\vec{q}) \times \hat{z} = iq \frac{\Phi_0^2}{\mu_0\Lambda} \frac{1}{q^2 + q(2\Lambda)^{-1}}. \quad (2.84)$$

Além disso, a energia de interação entre dois vórtices pode ser dada por

$$U_{vv}(q) = \frac{\vec{F}_L(\vec{q})}{-i\vec{q}} = -\frac{\Phi_0^2}{\mu_0\Lambda} \frac{1}{q^2 + q(2\Lambda)^{-1}}. \quad (2.85)$$

No espaço real, a energia de interação é uma combinação linear das funções de Struve H_0 e Bessel Y_0 de segunda ordem de modo que

$$U_{vv}(r) = \frac{\Phi^2}{2\pi\Lambda} \left[H_0\left(\frac{r}{\Lambda}\right) - Y_0\left(\frac{r}{\Lambda}\right) \right]. \quad (2.86)$$

Em curtas distâncias, $r \ll \Lambda$ ou $q \gg \Lambda^{-1}$ de modo que $q\Lambda \gg 1$ e

$$\vec{J}(\vec{q}) \approx \frac{1}{\mu_0\Lambda} \vec{S}(\vec{q}). \quad (2.87)$$

No espaço real, tem-se que

$$\vec{J}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\mu_0\Lambda} \frac{\Phi_0}{2\pi r} \hat{\theta}. \quad (2.88)$$

E finalmente, nesta aproximação, a interação entre dois vórtices é dada por

$$U_{vv} = -\frac{\Phi_0^2}{2\pi\Lambda} \ln\left(\frac{r}{\lambda}\right). \quad (2.89)$$

Note que neste limite de curtas distâncias os vórtices de Pearl possuem o mesmo

potencial de interação dos vórtices de Bessel. Também percebe-se que esta interação é de longo alcance, o que contradiz o que é encontrado para supercondutores tridimensionais, acarretando ordem de longo ou quase longo alcance. Assim, perturbações na densidade de linha de vórtices são desfavoráveis mesmo a distâncias muito superiores à λ e, logo, “bolhas” de fluxo magnético são possíveis apenas na presença de forças de ancoragem de alta magnitude.²⁴

2.6.6 Rede de vórtices

Como demonstrado nas seções anteriores, a forma com que os vórtices se relacionam em um supercondutor é estritamente repulsiva. Baseado nisso, pode-se observar que esta interação eletromagnética repulsiva resulta na formação de uma rede de linhas de fluxo magnético posicionados tanto mais distantes entre si quanto possível. Um dos primeiros pesquisadores a estudar como tais vórtices orientam e estabilizam-se foi Alexei Abrikosov em 1957. Abrikosov usou a solução da equação de GL linearizada (equação (2.26) com o termo $\beta|\psi|^2\psi = 0$ e válida para $H \rightarrow H_c$) para estimar o comportamento do supercondutor a campo magnético alto, porém ligeiramente distantes de H_{c2} . Neste caso, Abrikosov apontou que se a solução da equação de GL linearizada em $H = H_{c2}$ é dada por²⁵

$$\psi(x, y) = C e^{iky} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\xi^2}} \quad (2.90)$$

um supercondutor a campo externo H menor que H_{c2} terá função de onda muito

²⁴O caráter bidimensional também acarreta alterações nos valores da temperatura crítica e campos críticos inferior H_{c1} e superior H_{c2} . Considerando um filme de espessura d , pode-se encontrar que para campos magnéticos aplicados perpendiculares ao filme o campo crítico inferior irá ser reduzido por um fator de $\frac{d}{R}$ de forma que $H_{c1\perp} \approx \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda_{\parallel}^2} \frac{d}{R} \ln \frac{\lambda_{\parallel}}{\xi_{\parallel}}$, onde R é o raio do filme fino. Em contrapartida, para campos paralelos ao filme tem-se que $H_{c1\parallel} \rightarrow 0$, $H_{c2\parallel} \approx \frac{(12)^{1/2}\Phi_0}{2\pi\xi d}$ e $T_c = T_{c0} - \frac{\hbar\pi^2}{2m^*d^2}$, onde T_{c0} e T_c são as temperaturas de transição para o material tridimensional e bidimensional, respectivamente.

²⁵A equação (2-98) corresponde à solução da equação de GL linearizada para campo uniforme $H_0 \parallel \hat{z}$ usando o gauge de Landau ($\vec{A} = H_0 x \hat{y}$). A equação é semelhante a equação de Schrödinger de um oscilador harmônico com frequência $\omega_c = \frac{|e^*|H_0}{2m^*}$ e energia $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$ (frequência de ciclotron da partícula) para $n = 0$ e $k_z = 0$. A constante x_0 é o ponto de origem da oscilação e é dado por $x_0 = \frac{\hbar c}{e^*H_0} k_y = \frac{\phi_0}{2\pi H_0} k_y$.

parecida e dada pela combinação linear abaixo (Ketterson & Song, 1999)

$$\psi(x, y) = C \sum_{n=-\infty}^{-\infty} e^{inky} e^{-\frac{(x-x_n)^2}{2\xi^2}}. \quad (2.91)$$

Neste limite, o campo local h pode ser escrito como

$$h = H - \frac{H_c}{\sqrt{2}\kappa} |\psi|^2 \quad (2.92)$$

e a indução magnética dada por

$$B = \mu_0 \langle h \rangle = \mu_0 H - \mu_0 \frac{H_{c2} - H}{\beta_A (2\kappa^2 - 1)}. \quad (2.93)$$

Usando o valor da indução magnética dada pela equação (2.93) pode-se obter que a energia livre do condensado é dada por

$$\langle F_s \rangle = F_n + \frac{1}{2\mu_0} \left(B^2 - \frac{(\mu_0 H - B)^2}{1 + \beta_A (2\kappa^2 - 1)} \right), \quad (2.94)$$

onde o valor β_A ($\beta_A = \frac{\langle |\psi|^4 \rangle}{\langle |\psi|^2 \rangle^2} \geq 1$) é hoje conhecido como parâmetro de Abrikosov. Desde que para supercondutores do tipo II, $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$, F_s é uma função crescente de β_A . Assim, achar a configuração de vórtices com menor energia livre (configuração mais estável) nada mais é do que achar qual a maneira que as linhas de fluxo devem se distribuir ao longo da amostra no intuito de obter o menor valor de β_A . Em outras palavras, β_A deve ser pequeno o bastante para tornar a função de onda ψ mais suave e distribuída possível. Em seu artigo original, Abrikosov obteve que o menor valor possível de β_A era dado pela rede de vórtices de simetria quadrada, com $\beta_A = 1.18$. Contudo, Kleiner (Kleiner & Autler, 1964) demonstrou, sete anos depois, que a configuração energeticamente mais favorável é dada pela rede de vórtices de simetria triangular, com valor $\beta_A = 1.16$.

Hoje em dia, é experimentalmente demonstrado que uma rede de linhas de fluxo consiste de um arranjo regular de tubos de simetria triangular²⁶, paralelos

²⁶A simetria triangular é alcançada apenas no limite de supercondutores infinitos ausentes

ao campo magnético aplicado, cujo parâmetro de ordem ($|\psi|^2$) anula-se no núcleo do vórtice. O núcleo do vórtice, região de fase normal, possui extensão da ordem de ξ , onde concentra-se a maior parte do fluxo, e é gerado por correntes circulares que amortecem ao longo de um comprimento característico λ .

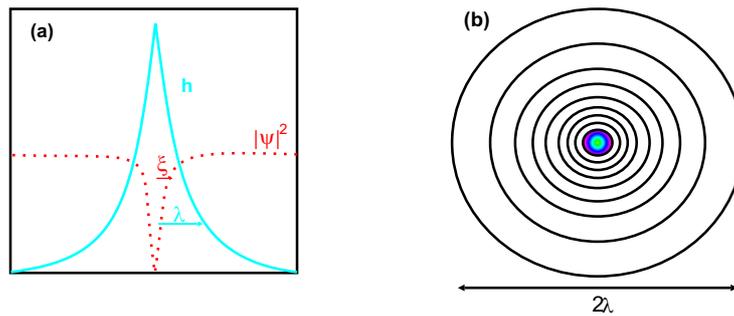


Figura 2.9: (a) Perfil de campo \vec{h} (linha azul sólida) e do parâmetro de ordem supercondutor $|\psi|^2$ (linha vermelha pontilhada). (b) Linhas de contorno do campo magnético de um vórtice em torno de seu núcleo, e cuja extensão é dada por 2λ .

A origem das linhas de fluxo se dá quando o campo magnético aplicado torna-se superior ao campo crítico inferior H_{c1} e inferior ao campo crítico superior H_{c2} . Neste intervalo de campo, a energia superficial do supercondutor em contato com uma região de fase normal torna-se negativa e dada aproximadamente por $F_{superficial} = (\xi - \lambda)\frac{H_c^2}{2}$ (lembre que em supercondutores do tipo II, $\lambda > \xi$). A natureza negativa desta energia induz a formação de múltiplos domínios. Estes domínios aparecem no intuito de maximizar a superfície e com isso minimizar a energia livre. A forma energeticamente mais favorável se dá com a formação de regiões (domínios) caracterizadas por unidades indivisíveis de fluxo magnético (vórtice com um quantum de fluxo). Os campos H_{c1} e H_{c2} estão, pois, intimamente relacionados à presença dos vórtices no material. O campo crítico inferior, H_{c1} , nada mais é do que o campo que doa a energia necessária para a entrada do

de irregularidades estruturais. Assim, como irá ser visto adiante, a presença de centros de ancoragem intrínsecos do material ou mesmo gerados artificialmente perturba a configuração de maior estabilidade e induz, por vezes, diferentes simetrias.

primeiro vórtice na amostra e, segundo a equação (2.62), pode ser dado por

$$H_{c1} = \frac{\epsilon_v}{\Phi_0}. \quad (2.95)$$

Por sua vez, o campo crítico superior relaciona-se ao campo necessário à total destruição do estado supercondutor e pode ser escrito como²⁷

$$H_{c2}(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\xi^2(T)} = \sqrt{2}\kappa H_c(T). \quad (2.96)$$

2.6.7 Aproximação elástica para uma rede de vórtices

A aproximação elástica para uma rede de vórtices é uma maneira alternativa de caracterizá-la, ignorando os aspectos microscópicos do estado supercondutor, porém resultando numa descrição fácil e de bons resultados. Nesta aproximação, o núcleo do vórtice comporta-se como um pedaço de “corda” e as supercorrentes geram a força repulsiva resultante necessária para a formação da rede. Esta rede, por sua vez, pode ser deformada em pequenas distâncias $|\vec{u}_\nu(z)|$, onde $|\vec{u}_\nu(z)| \ll a_\Delta$. a_Δ é a constante de rede e, no limite de London, é muito maior que o comprimento de coerência ξ ²⁸. O sistema composto pelos vórtices é descrito pela presença de objetos pontuais no plano xy tendo posições de equilíbrio \vec{R}_ν dado por (Blatter *et al.*, 1994)

$$\vec{R}_\nu = \left[n \frac{\sqrt{3}}{2} a_\Delta, (2m+n) \frac{a_\Delta}{2} \right], \quad (2.97)$$

onde $\nu = (m, n)$, e um vetor deslocamento $\vec{u}_\nu(z)$, este simbolizando distorções dos vórtices em relação às respectivas posições de equilíbrio (posições \vec{R}_ν). Em um material homogêneo, isotrópico e infinito, pode-se observar a formação de uma

²⁷Note que na equação (2.96) se $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$, $H_{c2} < H_c$ e não haverá estado misto, o que prova as desigualdades explanadas nas equações (2.41) e (2.42).

²⁸Logo, no limite de London tem-se que $\xi \ll \lambda, a_\Delta$.

rede de vórtices triangular cuja constante de rede a_Δ é dada por

$$a_\Delta = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^{1/2} \left(\frac{\Phi_0}{B}\right)^{1/2}, \quad (2.98)$$

já que $n = \frac{B}{\Phi_0}$ = densidade de vórtices por célula unitária = $\frac{2}{a_\Delta^2 \sqrt{3}}$. Porém, na maioria dos casos, a rede de vórtices está imersa em um sistema não-homogêneo e, assim, fora do equilíbrio. A energia da rede é então descrita pelo campo de deslocamento $\vec{u}_\nu(z)$, cuja transformada de Fourier é dada por

$$\vec{u}(\vec{k}) = a_\Delta^2 \int dz \sum_\nu e^{-ikz} \vec{u}_\nu(z). \quad (2.99)$$

No regime linear ($|\vec{u}(\vec{k})| \ll a_\Delta$), a energia do estado distorcido é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[u] &= \frac{1}{2} \int_{BZ} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[u_\alpha(\vec{k}) C_{\alpha\beta}(\vec{k}) u_\beta(-\vec{k}) - f_\beta(\vec{k}) u_\beta(-\vec{k}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k_z}{2\pi} \int_{ZB} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} C_{\alpha\beta}(\vec{q}, k_z) u_\alpha(\vec{q}, k_z) u_\beta^*(\vec{q}, k_z), \end{aligned} \quad (2.100)$$

onde a segunda integral é realizada na primeira zona de Brillouin da rede de vórtices com $k \lesssim k_{BZ} = \frac{\sqrt{4\pi}}{a_0}$ e a primeira integral em z tem truncamento (“cutoff”) em k_z dado por $|k_z| \lesssim \frac{2\pi}{\xi}$.

Os coeficientes $C_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$ ou z), mostrados na última equação, são conhecidos serem os elementos de uma matriz elástica que é real e simétrica no espaço de Fourier. Para uma rede triangular perfeita, esta matriz elástica é simplificada pois apenas três módulos elásticos são não-nulos: o módulo de compressão $C_L = C_{11} - C_{66}$, o módulo de cisalhamento C_{66} e o módulo de “entortamento” C_{44} (C_{11} sozinho é conhecido ser o módulo de compressão uniaxial), como mostra esquematicamente a figura abaixo.

Seguindo a teoria da elasticidade local, uma completa descrição das propriedades elásticas da rede será obtida se os módulos C_{11} , C_{44} e C_{66} , ou mesmo uma combinação linear deles, forem calculados. Neste caso, é fácil encontrar que

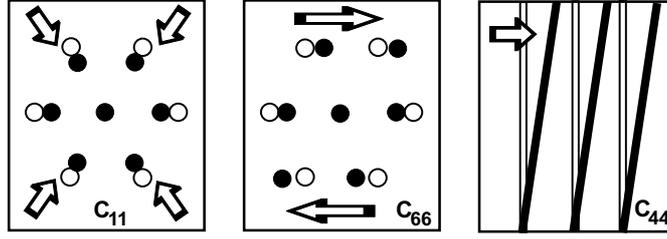


Figura 2.10: Da esquerda à direita: Módulo elástico de compressão (C_{11}), cisalhamento (C_{66}) e “entortamento” (C_{44}) de uma rede de vórtices triangular.

(Ketterson & Song, 1999)

$$C_L = V \left[\frac{\partial^2 (V\mathcal{F})}{\partial V^2} \right]_{N=\text{constante}} = \frac{B^2}{\mu_0} \frac{\partial H(B)}{\partial B}, \quad (2.101)$$

$$C_{44} = \frac{BH}{\mu_0} \quad (2.102)$$

e

$$C_{66} = \frac{0,48 H_c^2}{\mu_0} \frac{\kappa^2(2\kappa^2 - 1)}{[1 + (2\kappa^2 - 1)\beta_A]^2} \left(1 - \frac{B}{H_{c2}} \right)^2. \quad (2.103)$$

Para supercondutores do tipo II ($\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$), a comparação de C_{66} com os outros módulos ($\frac{C_{66}}{C_{11}} \approx \frac{C_{66}}{C_{44}} \approx \frac{1}{10\kappa^2}$) demonstra que a deformação por cisalhamento é predominante, visto que este envolve menor energia. Além disso, enquanto C_L e C_{44} são finitos e crescentes quando o campo externo $H_a \rightarrow H_{c2}$, C_{66} vai, neste limite, quadraticamente à zero, o que significa ser a rede suave para deformações por cisalhamento. Em contrapartida, se a aproximação contínua não-local for utilizada, os módulos C_{11} , C_{44} e C_{66} terão valores diferentes dados por

$$C_{11}(\vec{q}, k_z) \simeq C_{44}(\vec{q}, k_z) \simeq \frac{B^2}{\mu_0} \frac{1}{1 + \lambda^2(q^2 + k_z^2)} \quad (2.104)$$

e

$$C_{66} \simeq \frac{\Phi_0 B}{16\pi\mu_0\lambda^2}, \quad (2.105)$$

onde n_v é o número de vórtices por unidade de área. Apesar de valores distintos, a razão entre os módulos ainda aponta, no limite que $\vec{q} \rightarrow 0$ e $k_z \rightarrow 0$, a existência de um sólido incompressível ($C_{11} = C_{44} = \frac{B^2}{2\mu_0} \gg C_{66}$)²⁹.

2.6.8 Defeitos em redes de vórtices

Do mesmo modo que em qualquer outro sistema caracterizado por uma rede regular de pontos, descrever uma rede de vórtices na aproximação elástica, além da possibilidade de achar os módulos vibracionais inerentes, $C_{\alpha\beta}$, possibilita encontrar o surgimento de defeitos e avaliar a interação entre eles. A relação direta entre rede de vórtices e redes cristalinas quaisquer abre margem para uma verdadeira gama de resultados conhecidos e estudados até mesmo bem antes da idéia da natureza periódica dos sólidos ideais. Assim, nesta subsecção, valer-se-á desta conexão direta para descrever propriedades de uma rede de vórtices. Nos próximos parágrafos, ao ler rede cristalina em sólidos, entenda rede de vórtices e vice-versa.

O estudo de defeitos em sólidos começou no início do século XX (1905) com Volterra e Somigliana (Chaikin & Lubensky, 1995), estudando singularidades e soluções da equação da elasticidade linear, e descobrindo que estas singularidades seriam defeitos do material. Passados cem anos, hoje sabe-se que um defeito em uma rede cristalina surge da incapacidade do sistema satisfazer simultaneamente regras de empacotamento local e vínculos de empacotamento global. O empacotamento local de partículas é determinado predominantemente pela interação repulsiva entre elas, evitando a aproximação energeticamente indesejável. Se no caso ideal, em vórtices, encontram-se redes perfeitas triangulares, é natural, à temperatura $T \neq 0$, que o sistema permeie em configurações de não equilíbrio. O papel dos defeitos está, pois, na quebra desta simetria de rede à medida em que a temperatura no sistema é acrescida.³⁰

²⁹A aproximação contínua não-local é utilizada para descrever grandes deformações espaciais da rede de vórtices (pequeno comprimento de onda λ) em relação à configuração mais estável. Neste limite, onde $k > \frac{1}{\lambda_L}$, o deslocamento do núcleo do vórtice é desacoplado do modelo de campos e correntes de modo a suavizar os módulos elásticos. Além disso, note que, neste limite, os módulos de cisalhamento e de compressão uniaxial são estritamente dispersivos, isto é, dependentes de \vec{q} e k_z .

³⁰Um cristal periódico é invariante com respeito a apenas um conjunto discreto de translações,

De um modo geral, defeitos cristalinos podem ser de quatro principais tipos: defeitos pontuais (vacâncias, interstícios, impurezas, defeitos de anti-sítio e complexos), defeitos lineares, defeitos planares (contorno de grãos, falha de empilhamento e contorno de anti-fases) e defeitos de “corpo”(lacunas e impurezas). Pela sua maior incidência em sistemas bidimensionais, esta tese estará preocupada em descrever principalmente os defeitos lineares.

Quanto à simetria de rotação ou translação da rede, defeitos lineares podem ser de dois principais tipos: deslocações e disclinações:

- Deslocações são defeitos lineares associados à simetria de translação da rede cristalina. Eles apresentam-se sob duas principais formas: as deslocações do tipo “edge” (“deslocações de borda”) e as deslocações do tipo “screw” ou helicoidal.³¹ As deslocações de borda podem ser descritas como resultado da inserção de um plano extra no meio de uma estrutura base periódica, ou mesmo podem ser descritas como translações perpendiculares a um eixo específico, ao longo da superfície de corte. Por sua vez, deslocações do tipo “screw” ou helicoidal são defeitos resultantes da translação paralela ao eixo definido pela superfície de corte. Como o próprio nome sugere, este tipo de defeito forma uma estrutura em que um caminho helicoidal é traçado em torno de uma linha de deslocação. A presença de deslocações resulta em tensões na rede (distorções). A magnitude e direção destas distorções são expressas em termos de um vetor conhecido como o vetor de Burgers \vec{b} . Para o tipo “edge” e o tipo helicoidal, $\vec{b} \perp \vec{l}$ e $\vec{b} \parallel \vec{l}$, respectivamente. O vetor \vec{l} nada mais é do que a linha de deslocação contida na superfície de corte do defeito. As figuras (2.11) e (2.12) dão uma idéia melhor dos tipos de deslocações existentes e a forma de caracterizá-las através do vetor de Burgers \vec{b} .

Note que dentro da área de “circuitação”, realizada com o objetivo de obter o

diferente do caso de altas temperaturas. Associado com cada quebra de simetria estão as distorções, os defeitos e modos dinâmicos que dão “caminhos” para restaurar à simetria rotacional e translacional total no espaço livre da fase aquecida e desordenada.

³¹Em alguns casos, pode-se presenciar a existência de deslocações mistas, combinando aspectos das deslocações do tipo “edge” e “screw”.

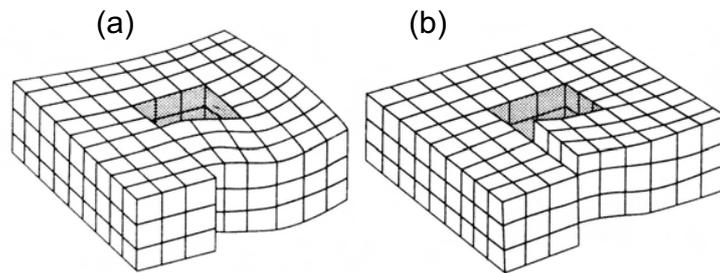


Figura 2.11: Deslocação em sólidos (a) do tipo “edge” e (b) do tipo helicoidal (Chaikin & Lubensky, 1995).

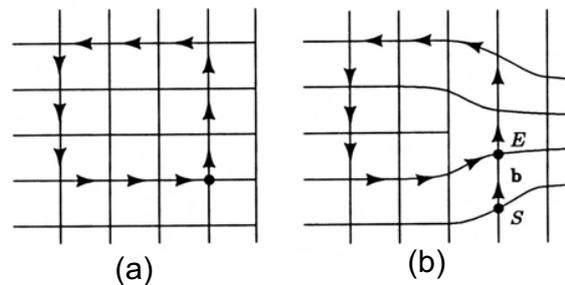


Figura 2.12: (a) Circuitação em uma rede sem defeitos e (b) com uma deslocação do tipo “edge”. Neste último, o vetor de Burgers \vec{b} é definido pelo segmento SE . Note que o vetor de Burgers é aquele vetor complementar que tranforma a rede defeituosa em uma rede regular (Chaikin & Lubensky, 1995).

vetor de Burgers, existem dois pontos, pontos estes que representam vórtices em supercondutores ou átomos em um rede cristalina, onde o número de primeiros vizinhos é diferente de seis. Assim, outra forma de visualizar uma deslocação é identificar a presença de um par de elementos da rede com cinco e sete primeiros vizinhos (no caso em que a estrutura mais estável é a rede triangular).

No caso específico de rede de vórtices, Brandt (Brandt, 1986) obteve que as auto-energias das deslocações “edge” J_{edge} e helicoidal $J_{helicoidal}$ são, como esperado, da mesma ordem de grandeza obtido para uma rede cristalina. De fato, sendo R um “cutoff” superior, b o vetor de Burgers e λ' um “cutoff”

inferior, tem-se que

$$J_{edge} = \frac{C_{66}b^2}{4\pi} \ln \left(\frac{R}{b} \right) \quad (2.106)$$

e

$$J_{helical} \approx (C_{44}C_{66})^{1/2} \left(\frac{a^2}{4\pi} \right) \ln \left(\frac{R}{\lambda'} \right) \quad (2.107)$$

- Além das deslocções, pode-se observar em sólidos a existência de outra classe de defeitos relacionadas à simetria de rotação da rede. Estes defeitos são denominados disclinações. Eles possuem alto custo energético e ocorrem apenas sob circunstâncias específicas na fase sólida. Em cristais, a simetria da rede impõem restrições às disclinações, pois as estruturas têm um ângulo de rotação específico. Em uma rede cúbica, por exemplo, precisa-se cortar setores da rede em ângulos de no mínimo 90°. Desta forma, não se observa a presença de disclinações em sólidos cristalinos. Contudo, em sólidos amorfos ou cristais líquidos bidimensionais, eles são de fundamental importância e existem em grande quantidade devido à falta de ordem de longo alcance. Por fim, é adequado notar que diferentes disclinações podem ser caracterizadas pela sua magnitude e pelo sentido, podendo através deste último critério ser positiva ou negativa. Usando o mesmo procedimento para encontrar o vetor de Burgers em deslocções, disclinações são caracterizados pela existência de um elemento da rede com número de primeiros vizinhos diferentes de seis. Caso a disclinação seja positiva, este elemento tem cinco primeiros vizinhos. Caso a disclinação seja negativa, sete. Logo, pode-se concluir que um par de disclinação pode combinar-se e produz uma deslocção. Por transitividade, um par de deslocção combina-se e, por se anular, produz uma rede sem defeitos.

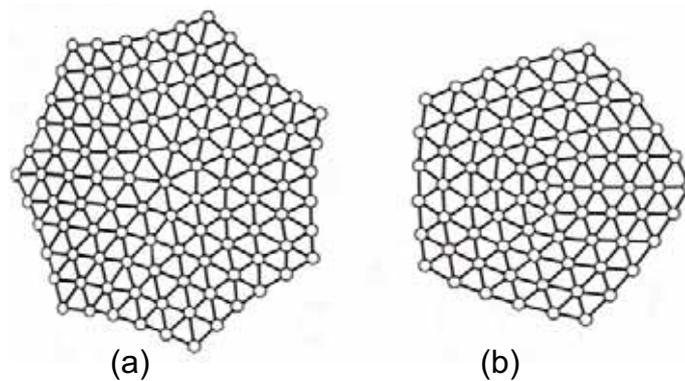


Figura 2.13: (a) Disclinação negativa e (b) disclinação positiva em uma rede cristalina triangular. Note que em (a) tem-se um átomo na posição central com sete primeiros vizinhos. Em (b) o átomo central possui cinco primeiros vizinhos. Ambos os átomos centrais diferem do restante dos átomos da rede e tornam fácil a caracterização do tipo de defeito que o cristal apresenta (Chaikin & Lubensky, 1995).

Capítulo 3

Confinamento e fusão de redes de vórtices

3.1 Introdução

Como explicitado no capítulo anterior, um material supercondutor submetido a campo magnético externo acima de H_{c1} e abaixo de H_{c2} apresenta-se preenchido por uma rede de fluxo magnético quantizado (vórtices) cuja simetria irá depender da temperatura e do tipo de amostra. Para um supercondutor isotrópico infinito, uma rede de vórtices de simetria hexagonal se forma quando o material está próximo ao zero absoluto.¹ Porém, para temperaturas $T \neq 0$, é de se esperar que cada vórtice que compõe a rede oscile em torno do seu ponto de equilíbrio de forma a destruir a simetria da estrutura original. A temperatura é, pois, fator deletério na estabilização da rede de vórtices, assim como é em vários sistemas da física da matéria condensada.

Além da temperatura, outro fator que causa destruição da rede é a não-homogeneidade das amostras reais ou a presença de um substrato rugoso. De fato, toda e qualquer amostra supercondutora apresenta-se composta de pequenos defeitos (regiões com diferentes espessuras, bordas ou fronteiras de grãos, “grain-boundaries”, na rede cristalina e assim por diante) conhecidos por serem defeitos

¹Em alguns casos, porém, redes triangulares podem ser encontradas a temperaturas próximas de T_c para campo $H \rightarrow H_c$.

intrínsecos e capazes de desestabilizar a estrutura hexagonal de menor energia. Tal desestabilização e indução da rede a configurações de maior energia gera estruturas cuja corrente crítica J_c é inferior ao caso ideal, o que torna o material tecnologicamente menos apropriado.

Em vista de todas essas dificuldades, uma nova classe de substratos, os substratos regulares artificiais, está sendo estudada desde a década de 70. Neste caso, centros de aprisionamento de vórtices são construídos na forma de redes regulares (quadradas, triangulares etc.) e acabam por gerar configurações de linhas de fluxo com corrente crítica muito superior à encontrada usando centros de ancoragem aleatoriamente dispostos, sejam estes naturais ou artificiais (Reichhardt *et al.*, 1996). Paralelamente, na mesma época, descobriu-se que, em supercondutores bidimensionais, a rede de vórtices comporta-se de maneira semelhante a um simples sistema de partículas repulsivas confinadas em duas dimensões. Tal similaridade possibilitou o amadurecimento do tema (rede de vórtices em supercondutores do tipo II) visto ser o problema de partículas em duas dimensões (derretimento de rede, aprisionamento de partículas etc.) largamente estudado durante os últimos cem anos. Porém, apesar da forte semelhança entre vários modelos na física, e mais de 30 anos de estudos em supercondutores modulados por centros de ancoragem periódicos, muito, hoje em dia, há por fazer no intuito do seu conhecimento pleno.

Enfim, estudar a interação da rede de vórtices com centros de ancoragem, sejam estes intrínsecos ou artificiais, regulares ou aleatórios, bem como a forma que estas estruturas comportam-se frente a temperaturas $T \neq 0$ é de suma importância para aplicação tecnológica futura ou atual.

Neste capítulo, estar-se-á interessado em descrever as diferentes formas de aprisionamento, intrínseca ou artificial, de linhas de fluxo magnético e o modo como se dá a fusão de uma rede de vórtices na presença ou não destes defeitos. Para isto, duas principais seções serão explanadas: a primeira falando do fenômeno do derretimento em geral (na presença ou ausência de centros de aprisionamento) e destacando o caso de uma rede de vórtices em duas dimensões (alvo da Tese), e a segunda apontando as diversas formas de defeitos em amostras supercondutoras

e destacando os centros artificiais regulares.

3.2 Fusão

Dentre tantos fenômenos existentes na física da matéria condensada, a fusão é aquele que consegue aglutinar sentimentos tão antagônicos como excitação e decepção. Pois, embora seja um dos temas mais fascinantes a discutir um caso específico de mudança de estado e mesmo com mais de cem anos de pesquisa, não há, até o presente momento, uma imagem geral aceita sobre o modo que um sólido derrete ao nível atômico (Dash, 1999; Strandburg, 1988).

Porém, apesar da falta de uma interpretação completa do fenômeno, todas as pesquisas sobre o assunto resultaram em uma série de técnicas experimentais e critérios fenomenológicos largamente utilizados hoje em dia (Lowem, 1994). No campo experimental, por exemplo, práticas de espalhamento em cristais com resolução microscópica foram aperfeiçoadas. No lado oposto, teorias microscópicas e fenomenológicas, bem como simulações computacionais, conseguiram descrever os mecanismos físicos relevantes para a termodinâmica e dinâmica do derretimento em sistemas particulares.

Em relação aos critérios fenomenológicos, estes, apesar de serem aproximações simples utilizando apenas as propriedades de um dos estados que coexistem na transição (fase sólida ou fase líquida), são extremamente vantajosos, pois permitem estimar a linha de coexistência sólido-líquido sem realizar algum cálculo que envolva a energia livre do sistema.² Entre vários critérios existentes, pode-se destacar o critério de Lindemann (Lindemann, 1910) e o critério de Born (Born, 1939).

- **Critério de Lindemann :** Foi a primeira “regra” fenomenológica aplicada ao derretimento. Ele assume que um sólido derrete quando a amplitude das vibrações térmicas excede uma fração do espaçamento interatômico. Em outras palavras, um cristal se torna instável a flutuações térmicas quando a raiz do desvio quadrático médio (ou desvio padrão) da partícula excede

²O uso da energia livre entre os dois estados envolve o conhecimento prévio das interações físicas existentes no sistema, o que induz o caráter não-universal do estudo.

uma fração c_L da constante de rede do cristal a_Δ de modo que

$$\sqrt{\langle u^2(T_L) \rangle} = c_L a_\Delta. \quad (3.1)$$

O valor empírico de c_L para muitos sólidos simples indica que o derretimento ocorre quando c_L é em torno de $\frac{1}{8}$ da constante de rede do cristal. O mais interessante nesta aproximação é que, supondo uma constante variando entre $c_L = 0,1 - 0,2$ e mesmo sendo c_L dependente da forma da interação microscópica, o critério pode ser usado para uma verdadeira gama de materiais, descritos pelos mais diversos tipos de interação: $c_L \approx 0,17$ (Stevens & Robbins, 1993) para sistemas descritos pelo potencial de Yukawa, $c_L \approx 0,129$ (Ohnesorge & Wagner, 1993; Young & Adler, 1974) para sólidos cúbicos de face centrada etc. Porém, deve-se destacar que a aproximação de Lindemann é uma teoria de apenas uma fase. Isto é, o derretimento é descrito apenas através do sólido e nada é dito sobre o estado líquido que será formado ou mesmo por que o sólido se tornará líquido. Desta forma, o critério não é verdadeiramente uma teoria, visto ser o derretimento um processo cooperativo, e seus resultados apenas seguem um senso intuitivo do que precisa ocorrer neste materiais (para observar a aplicação do critério de Lindemann de uma forma generalizada em vários sistemas, ver Ross (1910)).³

- **O critério de Born :** Baseado no fato de que um líquido difere de um cristal por possuir resistência quase nula ao “stress” provocado em um cisalhamento. Quando um material é submetido a temperaturas crescentes, a distância entre os átomos aumenta, devido à expansão térmica, de modo que as forças restauradoras entre os elementos que compõem a rede são reduzidas. Por fim, tudo isto induz ao decréscimo dos módulos elásticos e em particular do módulo de cisalhamento (Born sugere ser este módulo o primeiro a anular-se). A suavização do módulo de cisalhamento leva o material a uma instabilidade mecânica e finalmente ao colapso da rede cristalina

³A aproximação de Lindemann leva em consideração apenas a aproximação harmônica em um arranjo espacial de átomos e, desta forma, transforma o derretimento em um problema essencialmente de empacotamento.

(“catástrofe da rigidez” (Cahn, 2001)) na temperatura de derretimento T_B . Porém, resultados experimentais posteriores ao trabalho de Born comprovaram que ao invés de anular-se, os módulos de cisalhamento estabilizam-se em valores não-nulos no ponto de derretimento. A discrepância entre a teoria e estes resultados experimentais são, em parte, devido ao fato de Born ter desprezado as contribuições do “stress” externo no material. Além disso, Born também desconsiderou o fato de que quando a temperatura é acrescida, o sistema apresenta-se na forma de um cristal com defeitos.⁴

Durante anos, os critérios de Lindemann e de Born foram extensivamente aplicados em separado. Porém, esta pseudo-separação foi quebrada com o trabalho teórico de Jin (Jin *et al.*, 2001). Jin observou que existe, em um material tridimensional infinito (com condições de contorno periódicas), relação direta entre os dois critérios de fusão. No caso, usando partículas submetidas ao potencial de Lennard-Jones, descobriu-se que o critério de Born é satisfeito quando a temperatura no material alcança em torno de 20% a mais da temperatura de fusão normal T_L . Logo, o critério de Born está intimamente relacionado à capacidade do sistema tornar-se superaquecido. Ao mesmo tempo, o critério de Lindemann aponta uma constante da ordem de $c_L \approx 0,12 - 0,13$ em T_L , o que condiz com os valores esperados da teoria, e $c_L \approx 0,22$ em T_B (80% maior que o valor em T_L), semelhante ao encontrado experimentalmente na superfície dos materiais. Além disso, Jin conseguiu provar, usando dinâmica molecular, que partículas que

⁴O critério de Born foi modificado por Tallon (Tallon, 1979) no intuito de concordar a teoria com os resultados experimentais. Para isto, Tallon mediu vários coeficientes de cisalhamento em várias substâncias em função do volume molar. Ele confirmou que o módulo de cisalhamento não se anulava no ponto de transição. Porém, Tallon apontou a possibilidade de alcançar a temperatura em que o módulo de cisalhamento colapsava por simples extrapolação contínua. Neste caso, como o módulo de cisalhamento decrescia aproximadamente de forma linear com o acréscimo do volume do sólido chegar-se-ia a um ponto de volume crítico em que o módulo de cisalhamento era nulo. Neste ponto, cada átomo conseguiria acessar o volume inteiro da substância e o sistema se transformaria do estado sólido ao estado líquido.

Hoje em dia, entende-se que a interpretação de Born e Tallon só funciona se o cristal conseguir ser superaquecido ao ponto do volume molar alcançar o valor do volume molar na fase líquida. Porém, na maioria dos casos, o derretimento inicializado nas superfícies de materiais tridimensionais, em temperaturas abaixo do valor de derretimento dos cristais, impossibilita o sólido de ser superaquecido, evitando a observação do colapso das constantes elásticas.

possuem $c_L > 0$,²² têm em média módulo de cisalhamento nulo, embora o cristal como um todo permaneça com valor de $c_L \neq 0$, numa clara alusão à fusão local do sistema. Desta forma, partículas na fase superaquecida dentro de um material tridimensional comportam-se da mesma forma que partículas na superfície.

3.2.1 Abordagem teórica para fusão e solidificação

No intuito de descrever fenômenos como o derretimento e a solidificação, as aproximações teóricas, utilizadas hoje em dia, podem encaixar-se em duas principais abordagens: as teorias baseadas no estado líquido e as teorias baseadas na fase sólida cristalina.

No primeiro caso, abordagem no estado líquido, o método utilizado, na maioria das vezes, é a formulação do funcional da densidade (*Density Functional Theory* - DFT) (Burke, n.d.) da mecânica estatística quântica. Através deste método, constrói-se um funcional da densidade de energia livre baseado em propriedades do estado líquido uniforme. A minimização deste funcional dará a possibilidade de encontrar a função de onda que descreve o sistema e, com isso, obter as autoenergias. A fase sólida é comparada ao estado inicial (estado líquido) por uma parametrização capaz de induzir uma rede regular. Desta forma, a principal característica de uma fase sólida estável, o ordenamento posicional de longo alcance, é imposta ao invés de ser obtida. A solidificação é vista como sendo a condensação dos modos do estado líquido e obtida quando, em uma determinada densidade, a ordem de curto alcance das fases sólida e líquida se equivalem. Dentre os vários resultados possíveis com o método, destaca-se a obtenção, com uma boa aproximação dos valores experimentais, de diagrama de fases para materiais tridimensionais em potenciais do tipo esfera dura e Lennard-Jones. Além disso, encontra-se boa equivalência de resultados para a distribuição espacial da densidade de partículas.⁵

No segundo caso, uma teoria baseada na fase sólida cristalina, o derretimento é visto ser induzido pelo acúmulo e desacoplamento de defeitos topológicos. O ponto

⁵Apesar de descrever o sistema microscopicamente e, com isto, a princípio, estar mais próximo da realidade, o método DFT utiliza-se de prerrogativas não tão ortodoxas como a construção ad hoc da funcional, o que apenas o justifica pelos resultados concordantes com os experimentos.

crítico de derretimento é identificado quando a energia livre do núcleo das deslocções torna-se negativa. Quando isto acontece, deslocções são espontaneamente criadas e preenchem o cristal de modo a este último absorver energia e perder resistência frente a forças de cisalhamento. Em sistemas bidimensionais, tema da seção futura 3.2.3, o conceito foi utilizado por Kosterlitz e Thouless (Kosterlitz & Thouless, 1973) em 1973 e aperfeiçoado por Halperin, Nelson e Young em 1980 (Nelson & Halperin, 1980). Em sistemas tridimensionais, a tentativa de adaptação da teoria do derretimento fruto dos defeitos (principalmente as deslocções) gerou resultados conflitantes com os critérios pré-estabelecidos por Lindemann e Born, como já explicado na seção 3.2. De fato, tais trabalhos mostraram que, na transição, o módulo de cisalhamento não se anula, bem como a concentração de defeitos é pequena. Além disso, o fato de que o derretimento inicia-se na superfície do material descarta a possibilidade de derretimento por geração de deslocções, viabilizando-o apenas em casos de cristais superaquecidos.

3.2.2 Ordem de longo alcance e dimensionalidade

Um dos grandes desafios da física do estado sólido envolveu, e ainda envolve, a caracterização do grau de ordenamento das fases bem como da ordem da transição em fenômenos de transição, como a fusão de uma rede cristalina. Porém, apesar da dificuldade encontrada em alguns casos, pode-se levar em consideração a equivalência das classes homotópicas dos defeitos em diferentes sistemas, como cristais bidimensionais, modelos de spin em duas dimensões etc., e obter resultados expressivos do material de seu interesse através dos modelos equivalentes mais simples (Mermin, 1979).

Assim, um dos modos mais fáceis de estudar ordenamento em função da dimensionalidade d do sistema é usar o modelo de ondas de spin. Ondas de spin são modos normais clássicos ou excitações quânticas de um sistema magneticamente ordenado. No limite de longo comprimento de onda, elas comportam-se como modos hidrodinâmicos relacionados à quebra de simetria por selecionar uma direção para o alinhamento dos spins. As relações de dispersão mais simples são dadas por $\omega \sim q$ e $\omega \sim q^2$ para ondas de spin anti-ferromagnética e ferromagnética,

respectivamente. Ondas de spin quantizadas são conhecidas como magnons.

Pode-se encontrar a relação de dispersão para $\omega \times k$ em magnons da mesma forma que encontrada em fônons. A energia encontrada é quantizada e interpretada em termos de uma reversão de spin.

Considere então um sistema ferromagnético. O estado fundamental de um ferromagneto tem todos os spins paralelos, como mostra a fig. 3.1a.

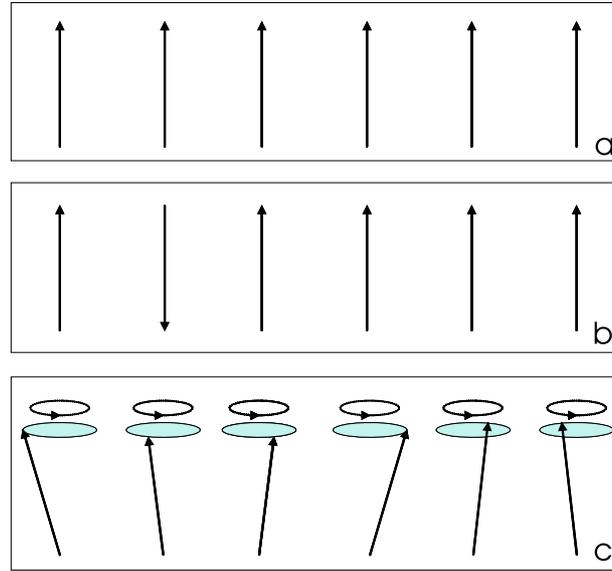


Figura 3.1: Representação esquemática de um modelo de spins com (a) todos os termos paralelos (configuração de menor energia) (b) apenas um termo antiparalelo aos demais e (c) todos os termos distintos um ao outro por um pequeno ângulo ka .

Com N spins, cada um de magnitude S sobre uma linha ou anel, os vizinhos irão interagir segundo o modelo de Heisenberg (Kittel, 1986):

$$U = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p+1}, \quad (3.2)$$

onde J é a constante de troca e $\hbar \vec{S}_p$ é o momento angular do spin no sítio p . Se os \vec{S}_p 's são vetores clássicos, o estado fundamental é tal que $\vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p+1} = S^2$, e a energia de troca do sistema é dada por $U_0 = -2JNS^2$. Um exemplo de

estado excitado de baixa energia pode ser dado pela configuração demonstrada na fig. 3.1.b. Neste caso, pode-se obter que, supondo uma rede de $N = 6$ spins, $U = U_0 + 8JS^2$. Porém, consegue-se excitar o sistema com uma energia muito menor que esta se todos os spins são deformados sequencialmente por uma fase constante, como mostra a fig. 3.1.c. Estas excitações de fase, análogas as vibrações em uma rede cristalina (fônons), são conhecidas como magnons. Assim, ondas de spins (magnons), diferente das vibrações na rede (vibrações nas posições relativas das partículas) são oscilações nas orientações relativas dos spins na rede.

Enfim, a relação de dispersão do magnon pode ter origem clássica e consegue ser obtida da seguinte forma: se a interação entre os spins é dada equação (3.2)

$$U = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p+1} \quad (3.3)$$

então no p -ésimo spin tem-se que

$$U = -2J \vec{S}_p \cdot (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}). \quad (3.4)$$

O momento magnético no p -ésimo sítio é dado por $\vec{\mu}_p = -g\mu_B \vec{S}_p$, onde g é o fator de Landé

$$g = \left\{ 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right\} \quad (3.5)$$

e $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ é o magneton de Bohr. Assim, a equação (3.4) torna-se

$$U = -\vec{\mu}_p \cdot \left[\left(\frac{-2J}{g\mu_B} \right) (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}) \right], \quad (3.6)$$

que é da forma $U \propto -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_p$, onde o campo magnético efetivo ou campo de troca que atua sobre o p -ésimo sítio é dado por

$$\vec{B}_p = \left(\frac{-2J}{g\mu_B} \right) (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}). \quad (3.7)$$

A taxa de variação do momento angular $\hbar\vec{S}_p$ é igual ao torque $\vec{\mu}_p \times \vec{B}_p$ que atua sobre o spin de modo que

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} &= \vec{\mu}_p \times \vec{B}_p \\ &= -g\mu_B \vec{S}_p \times \vec{B}_p = -g\mu_B \vec{S}_p \times \left[\left(\frac{-2J}{g\mu_B} \right) (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}) \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Logo,

$$\frac{d\vec{S}_p}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [\vec{S}_p \times \vec{S}_{p-1} + \vec{S}_p \times \vec{S}_{p+1}]. \quad (3.9)$$

Em coordenadas cartesianas, tem-se que

$$\frac{dS_p^i}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [S_p^j S_{p-1}^k - S_p^k S_{p-1}^j + S_p^j S_{p+1}^k - S_p^k S_{p+1}^j], \quad (3.10)$$

onde $i = x, y$, ou z . A equação (3.10) corresponde a um conjunto de equações não-linearizadas acopladas. Se a amplitude de excitação é pequena ($S_p^x, S_p^y \ll S_p^z$) pode-se obter um conjunto aproximado de expressões lineares por supor $S_p^z \simeq S$ e por desprezar termos contendo o produto $S_p^x S_p^y$ que aparece em $\frac{dS_p^z}{dt}$. Desta forma, encontra-se que

$$\frac{dS_p^i}{dt} = \begin{cases} \frac{dS_p^x}{dt} = \frac{2JS}{\hbar} (2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y) \\ \frac{dS_p^y}{dt} = -\frac{2JS}{\hbar} (2S_p^x - S_{p+1}^x - S_{p-1}^x) \\ \frac{dS_p^z}{dt} = 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Por ser visivelmente de natureza ondulatória, e análogo ao problema de fônons, pode-se usar soluções do tipo onda viajante $S_p^{x(y)} = u(v)e^{i(pka - \omega t)}$, onde p é inteiro, u e v são constantes e a é o parâmetro de rede. Assim, encontra-se usando a equação (3.11) que

$$-i\omega u = \left(\frac{4JS}{\hbar} \right) [1 - \cos(ka)] v \quad (3.12)$$

e

$$-i\omega v = -\left(\frac{4JS}{\hbar}\right) [1 - \cos(ka)] u. \quad (3.13)$$

As equações (3.12) e (3.13) têm solução se o determinante de seus coeficientes for nulo. Logo,

$$\begin{vmatrix} i\omega & \left(\frac{4JS}{\hbar}\right) (1 - \cos(ka)) \\ -\left(\frac{4JS}{\hbar}\right) (1 - \cos(ka)) & i\omega \end{vmatrix} = 0,$$

e

$$\hbar\omega = 4JS (1 - \cos(ka)). \quad (3.14)$$

A equação (3.14) é a relação de dispersão para ondas de spin unidimensional com interação de primeiros vizinhos. No limite de longo comprimento de onda, $ka \ll 1$ e, logo,

$$\hbar\omega \simeq 4JS \left(1 - \left(1 - \frac{k^2 a^2}{2}\right)\right) \simeq 2JS a^2 k^2. \quad (3.15)$$

Assim, sendo L a dimensão linear do sistema, a energia $E_s = \hbar\omega$ de uma onda de spin de vetor $k = \frac{2\pi}{L}$ é expressa por

$$E_s \sim L^d \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2. \quad (3.16)$$

Consequentemente, excitações de longo comprimento de onda em redes tridimensionais são proibidas no limite termodinâmico, levando à presença de ordenamento de longo alcance em baixas temperaturas. Em contrapartida, em sistemas unidimensionais estas excitações são favorecidas de modo que não há fase ordenada de longo alcance. Mas, o que dizer sobre sistemas bidimensionais, onde a energia de excitação é uma constante em relação a L ?

A dúvida da existência ou não existência de ordenamento translacional de longo alcance em sistemas bidimensionais perdurou por um longo tempo. Até que,

em 1966, Mermin (Mermin, 1968; Mermin & Wagner, 1966) e Hohenberg (Hohenberg, 1967) provaram⁶, usando o mesmo modelo de Heisenberg ou as equações de Bogoliubov, que não existe magnetização espontânea, ou magnetização de uma subrede, em um sistema bidimensional isotrópico com interações de curto alcance à temperatura $T \neq 0$. Como observado em magnons, a destruição da ordem de longo alcance translacional é fruto das flutuações da rede no limite de longo comprimento de onda.

Enfim, diferente do caso tridimensional, em sistemas unidimensionais e bidimensionais não há ordenamento translacional de longo alcance a qualquer temperatura $T \neq 0$.⁷ Porém, a caracterização da inexistência desta fase em sistemas de baixa dimensionalidade corresponde apenas à “ponta do iceberg” de um problema muito maior. Como dito no início desta seção, o grau de ordenamento e a ordem das transições entre as fases é de extrema valia para a compreensão completa do fenômeno da fusão e cristalização. As seções seguintes trarão respostas para estas indagações em sistemas específicos: redes bidimensionais e particularmente, o mais importante, rede de vórtices.

3.2.3 Fusão em sistemas bidimensionais

Como explanado na seção anterior, Mermin analisou distorções térmicas em redes harmônicas e encontrou a inexistência de ordenamento de longo alcance em dimensões reduzidas.

Para chegar as suas conclusões, Mermin usou as direções das ligações entre um átomo e seus vizinhos e definiu ser ordem orientacional àquela obtida por um caminho fechado sem defeitos em torno de um átomo e sobre suas ligações. Quando a temperatura próxima a $T = 0$ é acrescida, o caminho desenhado se

⁶Trinta e três anos antes, Peierls (Peierls, 1934) já havia argumentado que o movimento térmico de fônons de longo comprimento de onda destruiria a ordem de longo alcance de um sólido bidimensional. Além dele, Frenkel (Frenkel, 1946) e Jancovici (Jancovici, 1967) já apontavam para o mesmo resultado.

⁷Abraham (Abraham, 1980) argumentou em 1980 que, em termos práticos, ordenamento translacional de longo alcance pode ser encontrado em amostras ausente de imperfeições (meios contínuos e isotrópicos).

distorce, alongando ou retraindo, mas permanece fechado. Neste caso, pode-se falar que a topologia manteve-se constante. Assim, apesar do movimento térmico destruir a ordem translacional de longo alcance para qualquer $T \neq 0$, a ordem orientacional de longo alcance persiste. Em termos físicos, os dois tipos de ordem são relacionados a duas qualidades distintas do material: estrutura cristalina e elasticidade. A perda da ordem translacional pode ser vista através do enfraquecimento das linhas de difração em um gráfico de raios-x (“alargamento” dos picos de *Bragg*) quando o cristal é aquecido, embora o material permaneça no estado sólido. Por sua vez, a idéia da aproximação elástica é perdida na medida em que, para temperaturas ainda maiores, as ligações entre os átomos são rompidas.

Em face disto tudo, Michael Kosterlitz e David Thouless formularam, em 1972, uma teoria relacionando a perda da ordem de longo alcance a transições de fase em cristais, superflúidos e magnetos, entre estados cuja resposta a uma tensão externa passa de elástica àquela de um fluido, ou seja, plástica.

A idéia de Kosterlitz e Thouless era apresentar razões físicas para o fenômeno da fusão e solidificação em duas dimensões de uma maneira mais rebuscada e plausível que a até então conhecida.

Adaptando a idéia de ordenamento de longo alcance à teoria de fusão por deslocações⁸ (Kuhlmann-Wilsdorf, 1965; Nabarro, 1967), Kosterlitz e Thouless (KT) (Kosterlitz & Thouless, 1973) argumentaram que um líquido próximo ao seu ponto de solidificação tem estrutura similar ao seu sólido correspondente, embora ambas as fases possuam configurações de equilíbrio diferentes para temperaturas distantes. No caso, apesar de na fase líquida o material estar preenchido de deslocações que conseguem mover-se livremente à superfície sob a influência de

⁸Segundo a teoria da fusão mediada por deslocações, um líquido caracteriza-se por apresentar pouca resistência frente a uma tensão de cisalhamento externo. Tal fluidez é atribuída à alta mobilidade das deslocações existentes. A energia livre de um cristal contendo um arranjo destes defeitos é comparável à energia livre de seu líquido. A energia total de um sólido preenchido por deslocações é comparável ao calor latente de fusão. Pares de deslocações de sinais opostos (vetores de Burgers de mesma magnitude e sinal oposto) são termicamente excitados e representam uma pequena perturbação no estado isotrópico inicial. A presença das deslocações reduz a energia de criação de defeitos adicionais. Se a redução é suficientemente forte, o sistema pode ser submetido a uma avalanche de deslocações em uma transição abrupta, isto é, de primeira ordem.

uma tensão externa arbitrariamente pequena, a fase sólida não possui defeitos e o sistema é rígido. Para qualquer temperatura $T \neq 0$, o sistema é capaz de criar pares de deslocações com vetores de Burgers iguais e opostos, distanciados, no máximo, pela constante de rede do cristal a . Tais pares respondem a um “stress” aplicado externamente e reduzem o módulo de rigidez do sistema. Para temperatura alta o suficiente, os pares de deslocações de maior extensão tornam-se instáveis à aplicação de uma tensão de cisalhamento externa, induzindo uma resposta viscosa cujo resultado é sua dissociação.

Quantitativamente, a teoria de KT pode ser descrita pelo seguinte argumento: existirá uma temperatura, denominada temperatura de transição T_c , onde a criação de um defeito topológico isolado (um vórtice em um modelo XY, uma deslocação em um cristal etc.) é energeticamente favorável. Usando o modelo XY⁹, a energia deste modelo planar em campo magnético externo nulo é dado por¹⁰

$$E = -J \sum_{i,j=nn(i)} [s_{i,x}s_{j,x} + s_{i,y}s_{j,y}], \quad (3.17)$$

onde, por exemplo, $s_{i,x}$ representa a componente x do i -ésimo spin e a soma é feita nos primeiros vizinhos destes (nn). Lembrando que $s_{i,x} = \cos(\theta_i)$ e $s_{i,y} = \sin(\theta_i)$, a equação (3.17) torna-se

$$E = -J \sum_{i,j=nn(i)} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (3.18)$$

onde θ_i é o ângulo entre o i -ésimo spin e o eixo x (Gould & Tobochnik, 1996). Expandindo em torno de um mínimo local de E , encontra-se que

$$E - E_0 \approx \frac{J}{2} \sum_{i,j=nn(i)} (\theta_i - \theta_j)^2, \quad (3.19)$$

⁹É bom frisar que os resultados descritos pela teoria de KT não é apenas válido para o modelo XY. Qualquer sistema bidimensional que suporta “cargas” de excitação térmica ou defeitos topológicos interagindo logaritmicamente irá sofrer este tipo de transição. Utiliza-se o modelo XY pela sua simplicidade e direta via de obter os resultados almejados.

¹⁰Note que o modelo XY é similar ao modelo de Heisenberg, exceto que este último é caracterizado por spins que podem apontar em qualquer direção em três dimensões.

onde $E_0 = -J\frac{N(N-1)}{2}$. Na equação (3.19), convertendo a soma em uma integral em uma região caracterizada pela presença de um vórtice encontra-se que

$$E - E_0 = \frac{J}{2} \int_a^L \left(\frac{2\pi}{r} \right) dr = J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right), \quad (3.20)$$

onde a é o espaçamento da rede e L é o tamanho do sistema. A contribuição entrópica de tal vórtice ligada à liberdade de colocá-lo em qualquer lugar da rede é também logarítmica, de modo que a energia livre do sistema com um vórtice é dada por

$$F = J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right) - k_B T \ln\left(\frac{L}{a}\right)^2. \quad (3.21)$$

Assim, a equação acima prediz que há uma transição de uma fase de baixa temperatura, livre de vórtices, (caracterizada por ordenamento de quase longo alcance) em outra fase de alta temperatura, com defeitos topológicos, em um ponto dado por¹¹

$$T_c = \frac{\pi J}{2k_B}. \quad (3.22)$$

Para $T < T_c$, a energia livre irá divergir positivamente se $L \rightarrow \infty$, o que inviabiliza o surgimento de um vórtice. Em contrapartida, para $T > T_c$ o sistema reduz sua energia livre por produzir vórtices. Como se pode notar, este simples argumento heurístico provém da semelhança na dependência espacial logarítmica de ambos os termos da energia livre. Caso houvesse outra forma de dependência com o tamanho do sistema, poder-se-ia encontrar diversas possibilidades como sistemas na presença de vórtices em todas as temperaturas (no caso em que $E_{\text{vort}} = \text{constante} < \infty$) ou na ausência de vórtices (no caso em que $E_{\text{vort}} \sim \left(\frac{L}{a}\right)^b$, com $b > 0$). Assim, é a dependência logarítmica com o tamanho da energia de um vórtice em duas dimensões que permite “entropicamente” a

¹¹A temperatura de transição dada pela equação (3.22) é um limite superior, pois na sua obtenção ignorou-se o efeito de outras deslocções no sistema. Estes outros pares de defeitos irão relaxar o campo de tensão do primeiro par, renormalizando o módulo de rigidez para baixo e, consequentemente, reduzindo a temperatura crítica.

criação de defeitos a partir de uma determinada temperatura.

Na mesma temperatura T_c , além do aparecimento de excitações desacopladas (vórtices ou deslocções desacopladas, dependendo do sistema), o modelo de KT prevê a divergência do comprimento de correlação $\xi(T)$, como é esperado para qualquer teoria que descreva uma transição de fase. Porém, ao invés da usual divergência algébrica, a transição de KT descreve existir uma divergência dada por

$$\xi(T) \sim \exp\left(\frac{\text{constante}}{(T - T_c)^{1/2}}\right), \text{ para } T > T_c. \quad (3.23)$$

A natureza desta divergência retrata a dependência do comprimento de correlação ξ com a distância típica D entre defeitos desacoplados. Se $\xi \sim D$ e $\langle D \rangle = \sqrt{1/n_d}$, onde n_d é a densidade de defeitos desacoplados, o fato do desacoplamento ser induzido termicamente via fator de Boltzmann $\exp(-E_{\text{vort}}/T)$ resulta na relação de escala (3.23) (Jensen & Fogedby, 1985).

Fruto da divergência de ξ , transições de fase contínuas também são caracterizadas por divergências em quantidades termodinâmicas. O exemplo mais claro é dado pelo calor específico c_v da seguinte forma (Chaikin & Lubensky, 1995): a parte singular da densidade de energia livre f é estimada como sendo $f \sim T_c/\xi^d$, devido ao fato de que uma energia térmica $k_B T_c$ está sendo absorvida por um volume ξ^d da amostra. O calor específico c_v diverge pois é dado pela segunda derivada da energia livre¹² $c_v = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \sim \frac{\partial^2 \xi^{-d}}{\partial T^2}$.

Para finalizar esta seção, deve-se frisar que em uma rede cristalina leva-se em consideração a possibilidade da existência, em $T \neq 0$, de duas deslocções próximas com vetores de Burgers opostos bem como deve levar-se em consideração

¹²A divergência de ξ em uma transição de KT é tão rápida e ocorre em uma faixa de temperatura tão estreita que, por vezes, a divergência de c_v não consegue ser obtida nas simulações e, mesmo, em experimentos. Tal efeito resulta, na maioria das vezes, em curvas de c_v em função de T com um largo pico acima da própria temperatura de transição T_c . O largo pico acima de T_c é induzido pela entropia do desacoplamento dos defeitos.

a região próxima aos defeitos. Neste caso, o hamiltoniano do sistema torna-se

$$\frac{\mathcal{H}}{T} = -\pi K \sum_{\vec{l}, \vec{l}'} k_{\vec{l}} k_{\vec{l}'} \ln \left(\frac{|\vec{R}_{\vec{l}} - \vec{R}_{\vec{l}'}|}{a} \right) + \frac{E_c}{T} \sum_{\vec{l}} k_{\vec{l}}^2, \quad (3.24)$$

onde $\vec{R}_{\vec{l}}$ são vetores em uma rede, E_c é a energia do núcleo do vórtice e $k_{\vec{l}}$ é a vorticidade para o defeito no sítio l ¹³.

Também na equação (3.24), K é conhecido ser uma constante de acoplamento. Esta constante é extremamente útil, pois na transição, caracterizada por singularidades na energia e no calor específico, o desemparelhamento de vórtices acontece e, por consequência, $K \rightarrow 0$ (semelhante à divergência da constante dielétrica em um gás de Coulomb ou a convergência a zero da dureza da onda de spin ρ_s^R).

3.2.4 A teoria de KTHNY

Apesar do aparente êxito da teoria de Kosterlitz e Thouless, o fenômeno da fusão em duas dimensões ainda possuía, na época, complicações extras em relação ao papel dos defeitos topológicos. Além destas complicações, a teoria de KT era, até então, válida apenas para um meio isotrópico, ausente de potenciais de substrato, o que o inviabiliza para a maioria dos casos reais. Frente a estes obstáculos, as idéias de Kosterlitz e Thouless foram ampliadas por Halperin e Nelson (Halperin & Nelson, 1978) e, independentemente, por Young (Young, 1979) nos anos de 78 e 79, respectivamente (Mais tarde, toda formulação teórica seria denominada teoria de KTHNY, devido à **K**osterlitz, **T**houless, **H**alperin, **N**elson e **Y**oung) (Nelson & Halperin, 1980). O objetivo foi, justamente, dar uma descrição completa da transição entre os estados sólido e líquido de um material em duas dimensões.

Segundo a teoria de KTHNY, um sólido é caracterizado por possuir, a baixas temperaturas, ordenamento translacional de quase longo alcance. O caráter de quase longo alcance translacional retrata o balanceamento entre dois principais fatores: apesar das flutuações no limite de longo comprimento de onda para os

¹³Note que o hamiltoniano da equação (3.24) é semelhante ao descrito por um gás de Coulomb bidimensional com potencial químico E_c . Além disso, na mesma equação, $\vec{k}_{\vec{l}} = 1$ ou -1 .

modos de fônons levarem à divergência logarítmica no deslocamento das partículas (e a falta de ordenamento de longo alcance), a teoria da elasticidade mostra que a fase é caracterizada por um lento decaimento por lei de potência das correlações translacionais (diferente da fase líquida, onde é de se esperar decaimento exponencial). Quando a temperatura é acrescida, o material torna-se propenso a ser preenchido por pares de deslocações com vetores de Burgers próximos e opostos. O desacoplamento destes pares se dá na primeira temperatura de transição, transição esta contínua, definida como sendo T_m . O sistema, então, passa de uma fase sólida, cuja função de correlação $g_G(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ é dada pela relação algébrica:

$$g_G(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \langle e^{i\vec{G} \cdot [\vec{u}(\vec{r}) - \vec{u}(\vec{r}')] } \rangle \sim |\vec{r} - \vec{r}'|^{-\eta_G}, \quad (3.25)$$

para uma fase caracterizada por apresentar $g_G(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ sob a forma exponencial

$$g_G(|\vec{r} - \vec{r}'|) \sim e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/\xi_+}. \quad (3.26)$$

Nas equações (3.25) e (3.26), \vec{G} é o vetor da rede recíproca, $\frac{1}{4} \leq \eta_G(T_m) \leq \frac{1}{3}$, e $\xi_+ \sim e^{(c(T-T_m)^{-\nu})}$ ¹⁴. A teoria de KTHNY prediz que se $\vec{G} = \vec{G}_1, \vec{G}_1$ sendo o menor vetor da rede recíproca, $\eta_{G_1}^{-1}(T)$ tem um “salto” descontínuo em T_m para zero do valor universal encontrado no intervalo supracitado. Logo, quando $T \rightarrow T_m$, $\eta_{G_1} \rightarrow \infty$ e, conseqüentemente, o módulo de cisalhamento μ tende a zero.

Além do ordenamento posicional, as fases podem ser descritas pelo ordenamento orientacional. Assim, embora perca ordenamento translacional em T_m , o sistema permanece orientacionalmente organizado de modo que definindo $g_6(|\vec{r} -$

¹⁴ $\eta_G(T)$ é um expoente dependente da temperatura expresso em termos do módulo de cisalhamento μ e de compressão λ da rede. Para um cristal harmônico bidimensional, pode-se obter

$$\eta_G(T) = \frac{k_B T |\vec{G}|^2 (3\mu + \lambda)}{4\pi\mu(2\mu + \lambda)} \sim \frac{k_B T |\vec{G}|^2}{4\pi\mu},$$

visto ser o módulo de compressão, nesta dimensionalidade, infinito. Note que este limite, $\lambda \rightarrow \infty$, já foi explicitado no capítulo anterior descrevendo vórtices em duas dimensões ($\lambda \equiv c_{11}$ e $\mu \equiv c_{66}$). Por sua vez, c e $\nu \approx 0,396$ na expressão para ξ_+ são constante, e $t = \frac{(T-T_m)}{T_m}$ é a temperatura reduzida.

$\vec{r}'|) = \langle e^{i6[\theta(\vec{r}) - \theta(\vec{r}')]}$ como a função de correlação orientacional, tem-se¹⁵

$$g_6(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \begin{cases} \alpha e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/\xi_6} + \varphi_6^\infty, & \text{para } T < T_m \\ |\vec{r} - \vec{r}'|^{-\eta_6(T)}, & \text{para } T_m < T < T_i. \end{cases} \quad (3.27)$$

Na definição de $g_6(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, $\theta(\vec{r})$ é o ângulo de ligação da partícula no ponto r ao seu vizinho mais próximo relativo a alguma direção de referência fixa. Na equação (3.27), α é uma constante de proporcionalidade de ordem 1, e φ_6^∞ ¹⁶ é o valor da ordem orientacional esperada na fase sólida, em um sistema bidimensional cristalino. Também na mesma equação, T_i é definido como sendo a temperatura em que o sistema perde ordenamento orientacional e passa para o estado líquido. Neste ponto, o expoente $\eta_6(T)$ tem comportamento similar a η_{G_1} , de modo que se $\eta_6^{-1}(T_i^-) \approx 4$, na transição $\eta_6^{-1}(T_i) \rightarrow 0$. O intervalo entre T_m e T_i é, pois, caracterizado por uma outra fase, fase esta denominada hexática¹⁷, nunca, até então, citada na literatura. A fase hexática corresponde ao sistema imerso em deslocacões desacopladas interagindo via o hamiltoniano dado abaixo¹⁸

¹⁵ $\eta_6(T)$ também depende da temperatura e é dado por $\eta_6 = \frac{18k_B T}{\pi K_A}$. K_A é a constante de acoplamento relacionada a distorções do campo angular e é chamada de constante de Frank.

¹⁶Em um sólido bidimensional, a relação entre φ_6^∞ e o módulo de cisalhamento de uma rede cristalina pode ser estimada. Em uma rede de vórtices, por exemplo, a teoria elástica contínua prevê que

$$\varphi_6^\infty \approx e^{-\frac{9k_B T \Lambda^2}{8\pi\mu}} = e^{-\frac{9\Lambda^2 \eta_G}{21G^2}},$$

onde $\eta_G(T)$ é dado na página anterior. Note que se $T \rightarrow 0$, $\varphi_6^\infty \rightarrow 1$, se $\mu \rightarrow \infty$, $\varphi_6^\infty \rightarrow 0$, e se $\Lambda \rightarrow \infty$ (a_v) $\varphi_6^\infty \rightarrow \infty$ como era de se esperar. Aqui, $\Lambda \sim \frac{2\pi}{a_v}$ é um truncamento ultravioleta e a_v é a separação média entre as partículas.

¹⁷O trabalho de Frenkel (Frenkel & McTague, 1979) é um bom exemplo de existência da fase hexática.

¹⁸Como se pode notar, a equação (3-28) é uma extensão da equação (3.24), visto o sistema agora possuir mais de uma deslocacão. A constante K relaciona-se com os coeficientes de Lamé μ e λ de modo que um sólido bidimensional de rede triangular tem hamiltoniano elástico dado por

$$\mathcal{H}_E = \frac{1}{2} \int d^2r (2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2),$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{desloc} = & -\frac{K}{8\pi} \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} \left[\vec{b}(\vec{r}) \cdot \vec{b}(\vec{r}') \ln \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{a} \right) \right. \\
& \left. - \frac{\vec{b}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \vec{b}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \right] \\
& + E_c \sum_{\vec{r}} |\vec{b}(\vec{r})|^2, \tag{3.28}
\end{aligned}$$

onde $\vec{b}(\vec{r})$ corresponde ao vetor de Burgers de uma deslocação em \vec{r} , e é caracterizada pelo ordenamento translacional e orientacional de curto e longo alcance, respectivamente.

Finalmente, quando o sistema é submetido a uma temperatura ainda mais alta ($T > T_i$), deslocações (pares de disclinações) rompem-se em disclinações livres e o sistema torna-se um líquido isotrópico. T_i é, logo, a temperatura em que ocorre a segunda transição de fase contínua. Na figura (3.2), demonstram-se todas as fases previstas pela teoria bem como seus respectivos valores de função de correlação angular e orientacional.

- **A Teoria de KTHNY em substratos “rugosos”** Uma das aplicações práticas da teoria de KTHNY é estudar a fusão de uma rede bidimensional de partículas submetida a um substrato “rugoso”. Os trabalhos iniciais mais freqüentes descrevem átomos como o Kr (Abraham *et al.*, 1982; Birgeneau *et al.*, 1981; Butler *et al.*, 1980; Coppersmith *et al.*, 1981; Specht *et al.*, 1984), Ar (McTague *et al.*, 1982; Migone *et al.*, 1984; Nielsen *et al.*, 1987), He (Ecke & Dash, 1983; Widom *et al.*, 1979) e o Xe (Colella & Suter, 1986; Dimon *et al.*, 1985; Heiney *et al.*, 1983; Nagler *et al.*, 1985) adsorvidos em um substrato de grafite. Neste caso, se o sistema de partículas está sobre

onde

$$u_{ij}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\vec{r})}{\partial r_i} \right]$$

e $u(r)$ é o campo de deslocamento atômico.

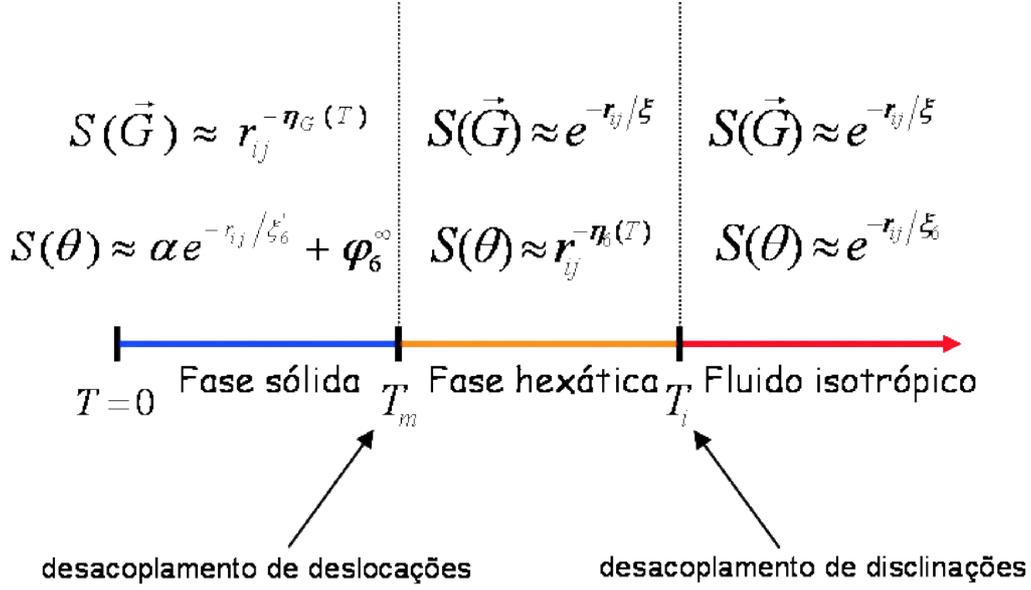


Figura 3.2: Representação esquemática das fases existentes em uma transição de fusão em sistemas 2D segundo KTHNY. Acima da seta estão indicados respectivamente os valores da função de correlação translacional $S(\vec{G})$ e orientacional $S(\theta)$ para cada fase. Para cada valor de temperatura está associada a existência da discontinuidade dos expoentes $\eta_{G_1}(T)$ e $\eta_6(T)$.

um substrato fraco incomensurável, o hamiltoniano elástico será dado por

$$\mathcal{H}_E = \frac{1}{2} \int d^2r (2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2) + \frac{1}{2} \gamma \int d^2r (\partial_y u_x - \partial_x u_y)^2, \quad (3.29)$$

onde γ é uma constante elástica adicional descrevendo resistência a deformações em virtude da tendência da rede a orientar-se ao longo do eixo do substrato. O hamiltoniano descrevendo deslocações interagentes, semelhante a equação (3.28), é descrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{desloc} = & -\frac{K_1}{8\pi} \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} \vec{b}(\vec{r}) \cdot \vec{b}(\vec{r}') \ln \left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{a} \right) \\ & + \frac{K_2}{8\pi} \frac{\vec{b}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \vec{b}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \\ & + E_c \sum_{\vec{r}} |\vec{b}(\vec{r})|^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde

$$K_1 = \frac{4a^2}{T} \left[\frac{\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda} + \frac{\mu\gamma}{\mu + \lambda} \right] \quad (3.31)$$

$$K_2 = \frac{4a^2}{T} \left[\frac{\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda} - \frac{\mu\gamma}{\mu + \lambda} \right]. \quad (3.32)$$

Assim, em face das equações (3.30) à (3.32), pode-se obter que, para um sistema na presença de um substrato periódico suave, a temperatura de transição é, comparada ao caso isotrópico ausente de substrato, apenas levemente alterada e, em geral, as predições de KTHNY continuam válidas. Porém, agora, a presença da leve rugosidade induz ao aparecimento de uma nova fase a temperaturas baixas ($T \ll T_m$), onde o sólido bidimensional é comensuravelmente ancorado ao substrato. Neste caso, a fase tem verdadeiramente ordenamento translacional de longo alcance. Em uma temperatura $T_c < T_m$, existe uma transição de um sólido ancorado a um sólido flutuante, onde a rede desacopla-se do substrato, e a correlação translacional é dada por expressões iguais às encontradas em um sólido sobre substrato uniforme ($S(\vec{G}) \sim r_{ij}^{-\eta_G(T)}$). Este sólido triangular flutuante pode ser incomensurável com o substrato periódico. Se T é acrescido, o sólido flutuante é esperado fundir em T_m , pelo mecanismo de desacoplamento de deslocções, em uma fase líquida.

Se o substrato for triangular, o líquido formado em $T = T_m$ terá ainda um ordenamento orientacional sextuplo de longo alcance. Nesta situação, quando $T = T_i$, φ_6^∞ terá uma queda significativa, reminescente da transição de desacoplamento de disclinações sobre o substrato suave. Esta queda tornar-se-á mais abrupta quando a razão período do substrato/parâmetro de rede a_v for menor.

Para um substrato quadrado, Nelson e Halperin (Nelson & Halperin, 1980) previram uma transição do tipo “Ising” abrupta em $T_i > T_m$, onde a ordem orientacional sextupla de quase-longo alcance no líquido anula-se e apenas

ordem orientacional de longo alcance quádrupla induzido pelo substrato permanece, e persiste até temperaturas maiores. Esta transição de Ising pode ser interpretada como sendo um “fantasma” da transição hexática \rightarrow líquido normal que deve ocorrer na ausência de substrato periódico.¹⁹

3.2.5 Fusão induzida por defeitos diversos

Embora defendida por muitos como o sendo o “algoritmo” regular da transição sólido-líquido em sistemas bidimensionais, a teoria de KTHNY suscita, em alguns, dúvidas quanto a sua total validade. Para estes, a fusão nesta dimensionalidade pode ser induzida por outras estruturas como contorno de grãos (“grain-boundaries”), vacâncias e defeitos intersticiais.

A primeira possibilidade, contorno de grãos, põe em “xeque” a natureza da transição sólido-líquido devido à diferente forma de interação entre os defeitos. Se, na aproximação de KTHNY, pares de deslocações têm interação de longo alcance, proporcional ao logaritmo da distância entre as excitações topológicas, correntes de deslocações (como podem ser interpretados os contornos de grãos dispostos paralelamente) interagem entre si através de um potencial de curto alcance, fruto de forças que se cancelam. Neste limite, Fisher (Fisher *et al.*, 1979) e Chui (Chui, 1983) obtiveram resultados conflitantes. Enquanto o primeiro defende a fusão viabilizada por desacoplamento de desclinações de pequenos ângulos e seguindo o mecanismo de KTHNY, Chui aponta que a transição sólido-líquido tem caráter de primeira ordem, o que exclui a existência da fase hexática, dependente da energia do núcleo do defeito (similar ao último termo da equação (3.30))²⁰.

¹⁹Nelson e Halperin apontam que é sempre possível que o desacoplamento prematuro de pares de desclinações possa levar a uma fusão direta sólido \rightarrow líquido (transição de primeira ordem). Neste caso, $\eta_{G_1}^{-1}(T_m) \geq 3$.

²⁰Chui, diferente de Halperin, calculou as contribuições longitudinais e transversais das flutuações na energia livre dos contornos de grãos. Além disso, levou em consideração as interações entre dois contornos de grãos e entre contorno de grão e deslocações. Os cálculos foram feitos no limite de baixa densidade de excitações e apontaram características de transição de primeira ordem decrescente com a energia do núcleo do defeito.

Por sua vez, defeitos pontuais, como vacâncias e interstícios, também podem desempenhar papel importante no processo de fusão. Para redes de baixa densidade, a energia das vacâncias torna-se negativa e, em sistemas como os descritos pelo modelo de Lennard-Jones, viabilizam o surgimento de “ilhas” de fase sólida separadas por vacâncias (Joos & Duesbery, 1985). Estes defeitos acabam por expandir o cristal sólido inicial e transformá-lo em um sistema de pequenas regiões com parâmetro de rede menor que na fase cristalina a T menor. Assim, ocorre uma transição de primeira ordem de uma fase sólida em outra fase coexistindo o sólido com o líquido. Em sistemas de densidade alta, em contrapartida, vacâncias e defeitos intersticiais não conseguem provocar rupturas de longa extensão, o que induz uma transição similar à transição predita por KTHNY.

3.2.6 Fusão de uma rede de vórtices em supercondutores

Como já foi dito nas seções anteriores, o comportamento de um material supercondutor frente a um campo magnético externo aplicado pode ser obtido da teoria de campo médio e leva a possibilidade de credenciá-lo em dois principais tipos: supercondutores do tipo I e supercondutores do tipo II. Enquanto em supercondutores do tipo I a fase supercondutora apresenta-se apenas no estado Meissner, supercondutores do tipo II possuem um diagrama de fase um pouco mais complexo, como demonstra a figura abaixo. Neste caso, além do estado Meissner, a supercondutividade é nucleada em “parceria” de vórtices em valores mais altos de campo aplicado (estado misto).

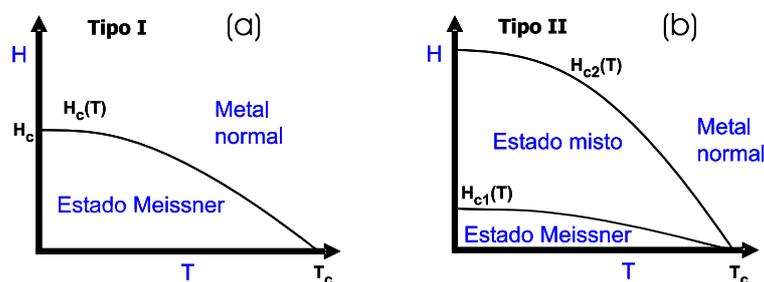


Figura 3.3: Diagrama de fases para supercondutores do tipo (a) I e (b) II.

Apesar da aparente simplicidade dos dois casos esquematizados na figura (3.3),

aqui deve-se fazer uma ressalva. Supercondutores do tipo II, caracterizados por possuir valor de $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$, englobam a maioria dos materiais conhecidos, entre eles os supercondutores de alta temperatura crítica, HTSC's (do inglês "High Temperature SuperConductors"). Nestes sistemas, a combinação de alta temperatura crítica T_c , pequeno comprimento de coerência ξ e alta anisotropia cristalina (geralmente descrita pela anisotropia da massa do superelétron $\gamma \equiv \frac{M_x}{M_z}$) altera consideravelmente a natureza do estado misto. Por exemplo, flutuações térmicas induzem a possibilidade da fusão da rede de vórtices em temperaturas bem abaixo da temperatura de transição supercondutora, predita pelas teorias de campo médio (Eilenberger, 1967). Como resultado, uma fase de líquido de vórtices pode ocupar uma faixa significativa do diagrama de fase $H - T$ e alterar o aspecto da figura 3.3b acima. Além disso, a presença inevitável de defeitos e desordem no material possibilita a ancoragem das linhas de fluxo, o que enriquece ainda mais a variedade de estados de vórtices possíveis.

Em virtude da riqueza dessas possibilidades, as próximas seções estão interessadas em caracterizar o fenômeno do derretimento da rede de vórtices em supercondutores quaisquer, em particular supercondutores bidimensionais. Destaque irá também ser dado a supercondutores de alta temperatura crítica, como o $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, por estes terem importância tecnológica.

3.2.7 Fusão da rede de vórtices em materiais supercondutores tridimensionais

Em supercondutores de alta temperatura crítica, as propriedades elásticas da rede de vórtices e, por sua vez, a estabilidade desta rede frente às flutuações térmicas depende crucialmente do valor do campo magnético B . Neste caso, pode-se distinguir três principais intervalos de campo apresentando propriedades distintas: campo magnético moderado ($H_{c1} \ll B \ll H_{c2}$), campo magnético baixo ($B \lesssim H_{c1}$) e campo magnético alto ($B \sim H_{c2}$).

No primeiro intervalo, $H_{c1} \ll B \ll H_{c2}$, trabalhos teóricos (Goldschmidt, 2005; Hetzel *et al.*, 1992; Sengupta *et al.*, 1991) e experimentais (Charalambous *et al.*, 1993; Doyle *et al.*, 1995; Fuchs *et al.*, 1996; Safar *et al.*, 1992, 1993;

Schilling *et al.*, 1996; Zeldov *et al.*, 1995) apresentaram evidências de que a transição de fusão sólido-líquido em uma rede de vórtices é de primeira ordem. A rede de vórtices é estabelecida de modo que a separação entre as linhas de fluxo é ao mesmo tempo pequena em relação ao comprimento de penetração de London λ , porém grande o bastante para que não haja superposição dos seus núcleos (possibilitando a aplicação do modelo de London para determinar a energia de uma rede elasticamente deformada). Uma aproximação semi-quantitativa usando o critério de Lindemann foi inicialmente proposta por Houghton, Pelcovits e Sudbo (Houghton *et al.*, 1989) e depois obtida por meios mais elegantes com o trabalho de Frey, Nelson e Fisher (Frey *et al.*, 1994) em 1994. Neste último trabalho, um modelo de derretimento de rede de vórtices foi proposto (conhecido como modelo *cage*) considerando apenas a flutuação térmica de uma linha de vórtice interagindo elasticamente com os seus vizinhos. Por simplicidade, Frey, Nelson e Fisher adotaram que os vizinhos do vórtice analisado são retos e fixos em suas posições de equilíbrio. Assim, supondo uma excitação ao longo da linha do vórtice da ordem de L (excitação esta oriunda das flutuações térmicas), existirá uma energia associada à interação entre o segmento de vórtice e o restante da rede cujo valor pode ser estimado em, no limite de pequenas deformações,

$$\Delta E_{\text{int}} \approx \frac{1}{2} \kappa u^2 L, \quad (3.33)$$

onde κ é a constante elástica da força harmônica e \vec{u} é o vetor que descreve o deslocamento do vórtice de sua posição de equilíbrio (veja figura 3.4). Além desta energia, a deformação da linha por L induz, nesta aproximação, uma variação na auto-energia do vórtice, estimada pela variação do seu comprimento, dada por

$$\Delta E_{\text{auto}} = \epsilon_v \left[\int_0^L dz \sqrt{1 + \left(\frac{du}{dz} \right)^2} - L \right] \approx \frac{1}{2} \epsilon_v \int_0^L dz \left(\frac{du}{dz} \right)^2 \approx \frac{1}{2} \epsilon_v \frac{u^2}{L},$$

de modo que a variação total da energia elástica é aproximadamente dada por

$$\Delta E_{\text{el}} = \Delta E_{\text{int}} + \Delta E_{\text{auto}} \approx \frac{1}{2} \kappa u^2 L + \frac{1}{2} \epsilon_v \frac{u^2}{L}. \quad (3.34)$$

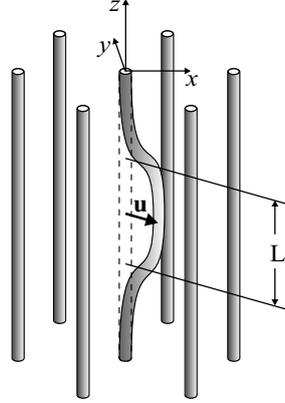


Figura 3.4: Representação esquemática do modelo *cage*. No caso, uma linha de vórtices é deslocada de sua posição de equilíbrio, indicado pelas linhas pontilhadas, por um vetor deslocamento \vec{u} e em uma extensão L , enquanto seus vizinhos estão fixos. Figura retirada de Clemente (2003)

O valor do comprimento L que minimiza a variação de energia é tal que se

$$\frac{\delta}{\delta L} (\Delta E_{\text{el}}) = 0, \quad (3.35)$$

tem-se que $L = (\frac{\epsilon}{\kappa})^{1/2}$. Usando este valor de L na equação (3.34) obtém-se que $\Delta E_{\text{el}} = \sqrt{\kappa\epsilon} u^2$. No equilíbrio, pode-se comparar a média desta energia com a energia térmica. Usando o critério de Lindemann, encontra-se que

$$T_f \approx \frac{c_L^2 a_\Delta^2}{k_B} \sqrt{\kappa\epsilon}. \quad (3.36)$$

Assim, a curva $T_f(B)$ pode ser obtida tão logo o valor de $\kappa(B)$ seja estimado. Na mesma referência, Frey, Nelson e Fisher apontaram que em uma boa aproximação

$$\kappa \simeq \left[\frac{\partial^2 U_{vv}(r)}{\partial r^2} \right]_{r=a_\Delta} \quad (3.37)$$

de modo que para campos intermediários, como a interação entre vórtices é logarítmica, encontra-se

$$T_f(B) \approx \frac{c_L^2 \epsilon a_\Delta}{k_B} = \frac{1}{k_B} \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \right)^{1/2} \frac{c_L^2 \Phi_0^{5/2}}{4\pi\lambda^2 B^{1/2}}. \quad (3.38)$$

Invertendo a equação, pode-se encontrar que $B_f \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2$. Em baixas temperaturas, ao invés de $\lambda^{-2} \propto (T_c - T)$, λ é aproximadamente constante e, logo, $B_f \propto T^{-2}$.

No segundo intervalo, campos magnéticos baixos ($B \lesssim H_{c1}$), a forma da linha de derretimento $B_f(T)$ muda drasticamente e, para baixas temperaturas, torna-se uma função crescente de B , $B_f(T \rightarrow 0) \simeq H_{c1}(0)[\ln(T/T_c)]^{-2}$. Invertendo esta equação tem-se que

$$T_f \approx \frac{c_L^2 \epsilon a_\Delta}{k_B} \left(\frac{a_\Delta}{\lambda}\right)^{3/4} e^{-a_\Delta/\lambda} \quad (3.39)$$

Este valor é obtido lembrando que, neste limite, a energia de interação decai exponencialmente.²¹ Em consequência disto, o diagrama de fases apresenta uma característica de reentrância, observada em vários trabalhos analíticos (Carmen Miguel & Kardar, 2000; Feigelman & Ziegler, 1992; Nelson, 1988; Nelson & Seung, 1989), computacionais (Ryu *et al.*, 1992) e experimentais (Akerman *et al.*, 2001).

Por último, o terceiro intervalo, com campo magnético alto ($B \sim H_{c2}$), a transição de fusão tem sido estudada por vários pesquisadores, entre eles Hikami, Fujita e Larkin (Hikami *et al.*, 1991; Tesanovic & Xing, 1991; Zhuravlev & Maniv, 2004) utilizando principalmente a aproximação dos menores níveis de Landau. Esta aproximação, válida para valores de campo magnético intenso, utiliza-se de uma expansão assintótica para a energia livre de modo que a transição é caracterizada na medida em que calcula-se o valor do parâmetro de Abrikosov β_A para cada fase. O alto valor encontrado para β_A da fase de alta temperatura líquida de vórtices indica que esta é uma fase instável a baixas temperaturas e, desse modo, sofrerá transição de primeira ordem para transformar-se em uma rede de Abrikosov.

A figura abaixo demonstra um esboço do diagrama de fases encontrado usando todas as previsões e resultados experimentais para todos os intervalos de campo

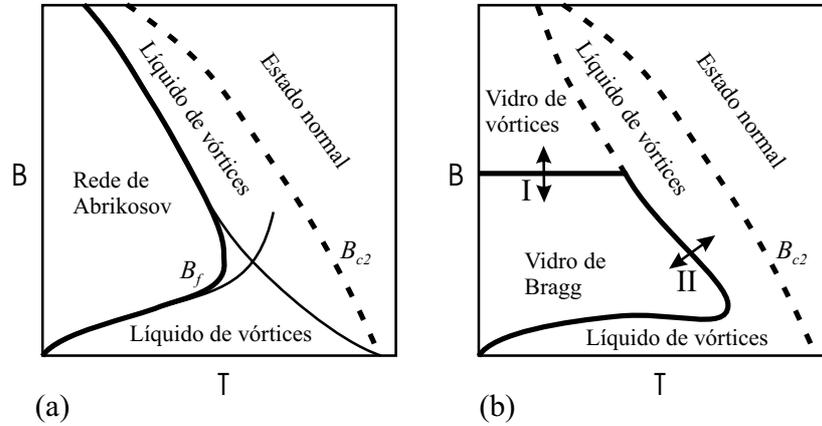


Figura 3.5: (a) Diagrama de fases $B - T$ de uma rede de vórtices em um cristal hospedeiro perfeito. As linhas contínuas indicam transição de fase de primeira ordem. As linhas mais finas apontam a região de aplicabilidade do modelo *cage*. (b) Diagrama de fases de uma rede de vórtices em cristal hospedeiro com defeitos. As setas indicam transições de fase induzidas por desordem (I) e pela temperatura (II). Figura retirada de Clemente (2003)

e temperatura.

- **Derretimento da rede de vórtices na presença de desordem aleatória**

Como já explicitado nesta seção, em um supercondutor no limite ideal, isto é, limpo (sem defeitos), uma rede de vórtices aproximadamente hexagonal é formada a medida em que a temperatura decresce. Contudo, materiais reais apresentam sempre imperfeições, sejam elas de natureza química ou estrutural, caracterizando a presença de defeitos dispostos aleatoriamente²². Quando tais materiais são resfriados abaixo da temperatura de transição, os vórtices são aprisionados nestas imperfeições, visto ser energeticamente favorável, e formam uma fase sólida conhecida como *vidro de Bragg*²³ (Fisher,

²¹Veja a equação (1.74) e utilize o limite em que $\frac{r}{\lambda}$ é grande. Desta forma, a constante elástica é reduzida para valores aproximados a $\kappa \approx \frac{\epsilon_r}{a_{\lambda}^2} \left(\frac{a_{\Delta}}{\lambda}\right)^{3/4} e^{-a_{\Delta}/\lambda}$.

²²Os defeitos aleatórios podem ser produzidos artificialmente através do bombardeamento da amostra por íons pesados, como íons de Pb a 1 GeV. O número de defeitos colunares podem ser controlados pela amostra de radiação. O resultado é a criação de defeitos colunares estendidos paralelamente ao campo aplicado. Defeitos colunares produzem uma forte ancoragem as linhas de vórtices de modo a aprisioná-lo a baixas temperaturas.

²³A fase de vidro de *Bragg* só é válida quando o material possui desordem de fraca intensidade.

1997, 1989; Giamarchi & Doussal, 1994, 1995; Gingras & Huse, 1996, 1998; Kierfeld & Hwa, 1997). Em um vidro de Bragg, embora o ordenamento translacional seja de curto alcance, menor que o comprimento de Larkin (Larkin, 1970), a ordem topológica é mantida, o que impossibilita o surgimento de defeitos topológicos. Experimentalmente, esta fase é caracterizada por apresentar picos de Bragg (e daí vem o nome da fase) em seu espectro de difração (Banerjee *et al.*, 2003; Klein *et al.*, 2001; Pardo *et al.*, 1998).

Investigações posteriores com supercondutores na presença de desordem revelaram, porém, que o diagrama de fase era um pouco mais complexo do que até então estabelecido (Khaykovich *et al.*, 1996). Os novos resultados apontavam que, além da fase de Bragg vítrea para valores de baixo campo e na presença de baixa densidade de defeitos, outra fase deve existir no limite de alta densidade de defeitos ou campo magnético intenso. Esta nova fase seria caracterizada por apresentar energia de ancoragem dominante em relação à energia elástica e uma rede de vórtices destruída na forma de linhas de fluxo emaranhadas, como é mostrado esquematicamente na figura 3.5b. Assim, nestes sistemas, pode-se encontrar transições induzidas pela temperatura e induzidas pela desordem²⁴ (visto ser o efeito deste, em sua maioria, proporcional à densidade de vórtices). Ambas as transições são de primeira ordem, como demonstrado teórica (Olson *et al.*, 2004) e experimentalmente (Avraham *et al.*, 2001), e modifica o panorama do diagrama de fases de um sistema sem desordem (veja figura 3.5).

Em face de vários resultados obtidos, hoje sabe-se que em sistemas de baixa concentração de defeitos a fase de baixa temperatura, a fase *Bragg Glass*, transforma-se na fase *Bose Glass* e, logo após, em uma fase líquida de vórtices, através de transições de primeira ordem. A fase *Bose glass* caracteriza-se por possuir vórtices arranjados em uma estrutura policristalina, com contorno de grãos separando regiões de estruturas regulares de diferentes di-

²⁴Recentemente, Banerjee *et al.* (Banerjee *et al.*, 2004) verificou, em monocristais de BiSr-CaCuO, a presença de diferentes transições de fase dependendo do valor do campo magnético aplicado.

reções. A fase líquida, por sua vez, possui caráter misto, na medida em que vórtices ancorados nos defeitos e vórtices livres fora destas regiões, os chamados vórtices intersticiais, coexistem. Este líquido parcialmente acoplado aos defeitos deve sofrer transição a um líquido completamente dissociado do substrato em temperaturas maiores. Para densidade de defeitos suficientemente baixa, a temperatura de transição *Bose*-líquido permanece próxima a temperatura de fusão da rede de vórtices (Banerjee *et al.*, 2001). A medida em que a densidade de defeitos aumenta, a temperatura de fusão da rede também aumenta, embora a transição parcialmente ancorada-totalmente ancorada na fase líquida é, em princípio, independente da temperatura. Assim, o intervalo de temperatura em que um líquido de vórtices intersticial existe reduz-se cada vez que a densidade de defeitos aumenta, ao ponto que para altas densidades a transição entre as fases *Bose*-líquido completamente desacoplado torna-se direta²⁵.

Em altas concentrações de defeitos, contudo, a fase de baixa temperatura é a de *Bose glass*, conhecida também como fase de sólido de vórtices poroso (“cristalitos nos poros”) (Tyagi & Goldschmidt, 2004). Nesta fase, aproximadamente todas as linhas de vórtices são ancoradas nos defeitos e correlação translacional e orientacional são de curto alcance. A transição de fusão é de segunda ordem, contínua (Budhani *et al.*, 1994). Depois da fusão parcial da rede, toda as linhas de vórtices desacoplam-se dos defeitos em uma temperatura maior e o líquido torna-se homogêneo. Este processo de fusão em dois passos foi observado recentemente por Goldschmidt (Goldschmidt & Cuansing, 2005), teoricamente usando simulações de Monte Carlo.

²⁵Alguns pesquisadores ainda apontam a existência de outra fase, a fase de vórtices *slush*, em valores de força de ancoragem e temperatura intermediários, isto é, entre as fases líquida e de vidro de vórtices (Worthington *et al.*, 1992). Passando da fase vítrea à fase *slush*, o material tem uma queda abrupta na resistividade.

3.2.8 Fusão da rede de vórtices em materiais supercondutores bidimensionais

Estudar a fusão da rede de vórtices em sistemas bidimensionais constitui caracterizar este fenômeno tanto em supercondutores do tipo II extremo, onde o parâmetro de anisotropia γ é alto e o acoplamento entre as camadas de condução desprezível, como em amostras efetivamente ou aproximadamente bidimensionais, no caso filmes finos de espessura d com comprimento de penetração efetivo $\Lambda \gg d$.

No primeiro caso, como já explanado na seção anterior, há uma evidência clara do caráter descontínuo da transição de fase sólido-líquido de vórtices, tanto experimental como teórica. Porém, quando o sistema torna-se quasi-bidimensional, fortemente anisotrópico, antes da fusão da rede de vórtices propriamente dita, as camadas que compõem o material desacoplam-se magneticamente em temperaturas muito baixas e, a partir disto, toda a física envolvida na transição de fase confina-se nelas. Sendo efetivamente bidimensional, o intervalo de temperatura em que ocorre a transição de fusão, em relação a sistemas tridimensionais de anisotropia moderada, alarga-se e o pico na curva do calor específico suaviza-se, à medida em que campos menores são aplicados (Zhuravlev & Maniv, 2002).

No segundo caso, filmes finos, a temperatura de fusão pode ser estimada usando o mesmo modelo utilizado no caso 3D, o modelo *cage*. Supondo a espessura do filme $d \ll \lambda$, os vórtices comportam-se como linhas rígidas cuja auto-energia é dada por $d\epsilon_v$, onde ϵ_v é dado pela equação (2.71). Sabendo ser a interação com seus vizinhos a única contribuição para a variação da energia do vórtice, o potencial efetivo é harmônico e dado por $E_{int} = \frac{1}{2}\kappa r^2$. Da mesma forma que em 3D, κ pode ser estimado como sendo a segunda derivada parcial da energia de interação vórtice-vórtice. Sabendo também que, em 2D, U_{vv} é dado pela equação (1.97), a constante elástica pode ser dada agora por

$$\kappa = \frac{\Phi_0^2}{2\pi \Lambda a_\Delta^2}. \quad (3.40)$$

Utilizando o teorema da equipartição da energia ($k_B T = \frac{1}{2}\kappa \langle u^2 \rangle$), e usando o critério de Lindemann, acha-se que em duas dimensões a temperatura de fusão da

rede de vórtices é dada por

$$T_f^{2D} = \frac{1}{2k_B} \left(\frac{\Phi_0^2 c_L^2}{2\pi\Lambda} \right). \quad (3.41)$$

Note que a equação (3.41) demonstra que a temperatura de fusão da rede de vórtices em duas dimensões é independente do campo aplicado B . Resultado semelhante pode ser encontrado usando as predições do modelo de KT, já discutido nesta tese na seção 3.2.3, para campos intermediários $\frac{1}{\xi^2} \geq \frac{B}{\Phi_0} \geq \frac{1}{\Lambda^2}$. No caso, supondo o módulo de cisalhamento C_{66} dado pela equação (2.105), a temperatura de derretimento da rede de vórtices em duas dimensões T_{KT} é dada por

$$T_{KT} = A_1 \frac{\mu_0 C_{66} a_\Delta^2 d}{4\pi k_B} = \frac{A_1}{16\pi\sqrt{3}} \frac{\Phi_0^2}{2\pi\Lambda k_B}, \quad (3.42)$$

onde A_1 é uma constante da ordem da unidade $0,4 \leq A_1 \leq 0,75$ ($0,096 \leq c_L \leq 0,13$) (Fisher, 1980). Assim, o derretimento da rede de vórtices em duas dimensões é bem descrito pela proliferação e desacoplamento de deslocções²⁶.

Em caráter mais geral, a transição de KTNHY aplicada a supercondutores prediz que a temperatura de transição de uma fase de ordenamento de quase longo alcance translacional à fase hexática é dada por

$$T_{KTHNY} = \frac{a_\Delta^2}{4\pi} \frac{\lambda(\lambda + \mu)}{\lambda + 2\mu}, \quad (3.43)$$

onde $\lambda \equiv C_{11} - 2C_{66}$ e $\mu \equiv C_{66}$ correspondem aos coeficientes de Lamé²⁷. Para

²⁶Para outros intervalos de campo, seja este alto e próximo a H_{c2} ou mesmo muito pequeno e da ordem de H_{c1} , a temperatura de fusão estimada da rede de vórtices torna-se dependente do campo aplicado e dado, respectivamente, por

$$T_f^{2D} = A_2 \frac{1}{2\pi\sqrt{3}} 0,353 \frac{1}{4} \left[\frac{H_{c2}(T_f) - B}{H_{c2}(T_f)} \right]^2 \frac{\Phi_0^2}{2\Lambda(T_f)}$$

e

$$T_f^{2D} = A_3 \frac{1}{4\pi} (0,245) \left[\frac{B}{\Phi_0} \right]^{1/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\Phi_0^2}{2\Lambda(T_f)}.$$

Nestas duas equações, A_2 e A_3 são constantes da ordem da unidade.

²⁷Note que todas as definições para temperatura de fusão da rede de vórtices em sistemas 2D

$T < T_{KTHNY}$, o fator de estrutura mostra picos semelhante aos de Bragg e é dado por

$$S(\vec{k} = \vec{G} + \vec{q}) \sim |\vec{q}|^{2-\eta_{\vec{G}}(T)}. \quad (3.44)$$

O expoente $\eta_{\vec{G}}(T)$, como demonstrado na equação (3.27), depende da temperatura e de λ . Este, por sua vez, depende quadraticamente da extensão da amostra ao ponto que

$$\eta_{\vec{G}}(T_{KTHNY}) = \frac{1}{3}. \quad (3.45)$$

Em sistemas finitos, de extensão L_s , o valor de λ não diverge e $\eta_{\vec{G}}(T_{KTHNY})$ torna-se maior. Acima da temperatura de transição T_{KTHNY} , a ordem orientacional permanece de longo alcance, diferente da ordem translacional que decai na escala de

$$L > \xi \approx \exp \left[\frac{bT_{KTHNY}}{T - T_{KTHNY}} \right]^\nu, \quad (3.46)$$

onde $\nu \approx 0,3696$. Para temperatura ainda maior, ambas as ordens (translacional e orientacional) são destruídas, e o sistema caracteriza-se por ser um líquido de vórtices isotrópico.

Assim, segundo KTHNY, o diagrama de fases, para supercondutores 2D entre os campos críticos H_{c1} e H_{c2} , compreende os estados de uma rede de vórtices, a fase hexática, e uma fase líquida²⁸. Conseqüentemente, a teoria descarta em sua totalidade as predições da teoria de Landau, onde transição sólido-líquido é dita ser *sempre* de primeira ordem²⁹.

equivalem-se. Em particular, T_{KTHNY} aproxima-se de T_{KT} no limite de uma rede incompressível ($C_{11} \geq C_{66}$)

²⁸A fase hexática foi observada em simulações recentes para o modelo XY em campos baixos (Creffield & Rodriguez, 2003). Experimentalmente, fusão via duas transições contínuas foi observado por Murray (Murray *et al.*, 1990) e Zahn (Zahn *et al.*, 1999) em colóides 2D.

²⁹A aplicação das teorias de campo médio e, em particular, a expansão do parâmetro de ordem de Landau, em problemas com simetria contínua 2D deve ser encarada com reticência, pois estes subestimam o efeito das flutuações térmicas.

Porém, indo na contramão dessas predições, Franz e Teitel (Franz & Teitel, 1994) e outros (Hu & MacDonald, 1997; Kato & Nagaosa, 1993; Tanaka & Hu, 2001; Tesanovic & Andreev, 1994) apontaram ser de primeira ordem a transição de fusão da rede de vórtices em sistemas 2D. Neste caso, ao invés de um panorama descrito por dois estágios (desacoplamento de deslocações - desacoplamento de disclinações), o sólido de vórtices transforma-se em um líquido isotrópico através do desacoplamento mútuo das deslocações e disclinações (como ocorre em sólidos 3D). O trabalho de Maniv (Maniv *et al.*, 2001), em particular, aponta que o derretimento das redes de vórtices em uma transição de primeira ordem fraca é fruto do movimento de cisalhamento das correntes de Bragg ao longo dos principais eixos cristalográficos. Este movimento possui baixo custo energético em relação à energia de condensação supercondutora.

Enfim, embora aparentemente simples, a natureza da transição de fusão de redes de vórtices em sistemas bidimensionais, sem substrato rugoso, continua em aberto (Bacghi *et al.*, 1996). Enquanto isso, grande parte dos trabalhos indicam ser os defeitos, em particular as deslocações, responsáveis pela fusão da rede. Com isso, as predições de KTHNY ganham força.

- **Fusão 2D na presença de defeitos aleatórios :** Na presença de desordem, o panorama da fusão das redes de vórtices torna-se um pouco mais complicado, embora o contexto geral encontrado para os sistemas 2D sem defeitos permaneça válido. Sabe-se, por exemplo, que na presença de defeitos intrínsecos dispostos aleatoriamente qualquer ordem cristalina de longo alcance é destruída para sistemas de dimensão $d < 4$ (Larkin, 1970). Assim, a baixas temperaturas, existe uma fase vítrea, já que a fase de Bragg é instável à formação de deslocações, com fator de estrutura, renormalizado em relação a um sistema elástico sem desordem, dado por

$$S(\vec{k} = \vec{G} + \vec{q}) \sim |\vec{q}|^{2 - \tilde{\eta}_{\vec{G}}(T) \ln(|\vec{q}| R_a)}, \quad (3.47)$$

onde $\tilde{\eta}_{\vec{G}}(T) \sim \left[\frac{(T - T_g)}{T_g} \right]^2$, T_g é a temperatura de transição e R_a é a escala de comprimento em que o deslocamento do vórtice torna-se da ordem do espaçamento da rede a_{Δ} e, logo, a distância em que correlação posi-

cional começa a cair. Tal fase, denominada fase Cardy-Ostlund-Carpentier-Le Doussal (COCD), ou fase de quase *Bragg Glass*, caracteriza-se, como mostra a última equação, por não apresentar picos de *Bragg* infinitamente abruptos, mas sim picos saturados em $qR_a \lesssim e^{2/\tilde{\eta}} \bar{c}^{30}$. Além disso, esta fase não é estável ao aparecimento de deslocações que aparecem devido ao efeito da desordem do substrato em uma escala de comprimento

$$L_{dest} \sim R_a \exp \left[\frac{(T_m - T)}{T \ln(\frac{R}{R_a})} \right]^{1/2}, \quad (3.48)$$

onde c_1 é uma constante. Desde que no limite termodinâmico $T_g = \frac{3}{2\pi} a_\Delta^2 \frac{\mu(\lambda+2\mu)}{\lambda+3\mu} \gg T_m$, onde T_m é a temperatura de derretimento, a fase vítrea é de difícil visualização experimental, de modo que espera-se uma transição de fase de baixa temperatura COCD ao líquido de vórtices³¹. Esta fase de ausência de ordem translacional de longo alcance induz a uma magnetização irreversível, diferente da encontrada na linha de derretimento, devido essencialmente ao módulo de cisalhamento não-nulo da rede.

Recentemente, trabalhos experimentais usando difração de nêutrons (Ling *et al.*, 2001) e decoração de Bitter (Menguini *et al.*, 2002), e em particular usando NbSe₂, tem dado uma idéia da estrutura, no espaço real, de vórtices em duas dimensões³². Nestes, observou-se que a fase de baixas temperaturas, em amostras submetidas a um rápido esfriamento, apresenta-se sob a forma policristalina, com deslocações isoladas, dipolos de deslocações e outras deslocações formando contorno de grãos dispostos não homoganeamente. Dentro de cada “grão”, a rede mostra significativa ordem orientacional. O tamanho do grão depende efetivamente da força de ancoragem do defeito,

³⁰É sabido que não há possibilidade da existência de fase de *Bragg*, similar à fase encontrada em sistemas 3D, em sistemas bidimensionais (Zeng *et al.*, 1999).

³¹Deve-se frisar que trabalhos recentes (Kienappel & Moore, 1997) fracassaram em visualizar a existência da fase COCD em supercondutores 2D fracamente desordenados.

³²A técnica de decoração de Bitter, por sinal, tem grande importância histórica, pois foi através dela que pode-se comprovar, pela primeira vez, efetivamente a existência de uma rede de vórtices (Essmann & Trauble, 1967).

tornado-se menor quanto maior for a força aplicada nele (Moretti *et al.* , 2004). Trabalhos teóricos posteriores (Chandran *et al.* , 2004) reiteraram estes resultados e afirmaram, além do já explanado, a existência de uma transição entre as fases totalmente isotrópica e com contorno de grãos, fruto da suavização das paredes de domínio. As regiões internas aos contorno de grãos, como um fenômeno de reminiscência ao encontrado em um sistema sem substrato rugoso, sofrem transições abruptas à fase líquida. Outro trabalho (Kashurnikov *et al.* , 2000), utilizando-se de simulações de Monte Carlo, indica a presença de uma fase de rede rotacionando, isto é, coexistência de vórtices ancorados com vizinhos flutuantes arranjados coerentemente, dando através deste modelo uma interpretação do mecanismo de formação dos contorno de grãos. Assim, a rigidez da rede triangular de vórtices compete com a forte interação atrativa que alguns sofrem nos defeitos de modo a permitir, quando a temperatura é acrescida, a quebra da rede em ilhas em torno dos defeitos.

3.3 Aprisionamento de vórtices

A utilização tecnológica de supercondutores em dispositivos que possuem alta densidade de corrente e baixa dissipação térmica já constitui uma importante motivação para o estudo de ancoragem de vórtices. Como já explanado na seção anterior, centros de *pinning* aleatórios ocasionados naturalmente ou artificialmente são capazes de aprisionar as linhas de vórtices e, com isso, aumentar o valor da corrente crítica J_c . Porém, além da motivação mencionada, estudar um sistema constituído de partículas que interagem entre si, formando uma rede periódica, e com o meio externo constitui um dos problemas básicos ainda não completamente resolvidos na física da matéria condensada. Em particular, por suas dimensões características, aprisionar vórtices constitui confinar “partículas” em potenciais artificiais cuja escala de energia é quantizada (Moshchalkov *et al.* , 1999). Assim, o sistema em questão torna-se uma excelente possibilidade de confirmação e aplicação de predições obtidas da mecânica quântica.

Seguindo esta linha de raciocínio, o estudo da interação de rede de vórtices com centros de aprisionamento regulares iniciou-se no fim dos anos 70 e consiste hoje um dos ramos da física que mais rápidos avanços obteve.

Nas próximas seções, estar-se-á interessado na descrição dos principais tipos utilizados de arranjos regulares de centros de ancoragem em supercondutores 2D. Anomalias na dependência da magnetização, resistência elétrica e corrente crítica com a temperatura e o campo aplicado aparecem naturalmente fruto da competição entre forças repulsivas entre vórtices e forças atrativas vórtices-centros de *pinning*.

3.3.1 Centros de aprisionamento periódicos: estabilidade e fusão de rede de vórtices

Um dos primeiros trabalhos estudando a interação entre vórtices e centros artificiais de aprisionamento periódicos data de 1974 (Daldini *et al.*, 1974). Neste artigo, Daldini, Martinoli, Olsen e Berner³³ utilizaram-se de filmes finos de Al com espessura modulada periódica unidimensional, e obtiveram sinais claros de *matching* entre estes e uma rede de vórtices 2D. O efeito do casamento entre rede de vórtices e substrato periódico regular foi descrito através da mudança abrupta na densidade de corrente crítica, como mostra a figura (3.6), e na voltagem, exatamente nos valores de campo cuja distância entre os vórtices, parâmetro de rede a_{Δ} , coincidem com a distância entre os pontos de diferente espessura³⁴.

Três e quatro anos mais tarde, 1977 e 1978, Hebard publicaram dois trabalhos analisando o comportamento de vórtices frente a outro tipo de aprisionamento, buracos (Hebard *et al.*, 1977). A malha de perfuração constituía-se de uma rede triangular de lacunas em um filme de Al resultando, novamente, no acréscimo da densidade de corrente crítica em valores harmonicamente relacionados ao campo aplicado. Pela primeira vez, o trabalho apontava que os efeitos na densidade de

³³O trabalho de Daldini foi inspirado pelo que aponta-se, atualmente, ser o primeiro estudo experimental sobre interação vórtice-rede de centros de ancoragem periódico em 2D (Morrison & Rose, 1970).

³⁴Martinoli (Daldini *et al.*, 1974) usou o mesmo modelo de modulação na espessura de um filme de Al e conseguiu provar experimentalmente a existência de uma transição rede ancorada - fase de vórtices flutuante.

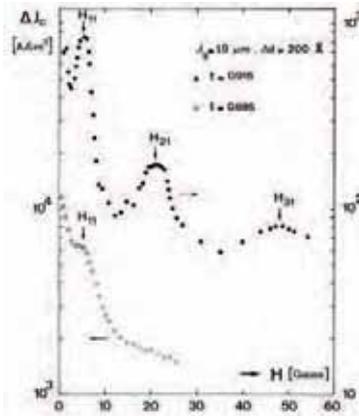


Figura 3.6: Mudança na densidade de corrente crítica ΔJ_c em valores específicos de campo para duas temperaturas relativas t diferentes ($t = \frac{T}{T_c}$). Os valores de “pico” correspondem ao perfeito casamento entre a distância entre os vórtices e a distância, em um filme de Al, entre pontos de diferente espessura. Figura retirada de Daldini *et al.* (1974).

corrente crítica em valores de campos característicos $H > H_1$, onde H_1 é conhecido ser o primeiro campo de *matching* ou campo onde todos os centros de ancoragem estão preenchidos por um vórtice, são resultados de um intrincado relacionamento entre vórtices ancorados nos buracos e vórtices posicionados nos interstícios, isto é, entre os buracos.

Os trabalhos de Hebard *et al* foram os precursores de uma série de estudos utilizando-se do que hoje é conhecido como rede de *antidots*³⁵, isto é, rede de buracos da ordem de submícrons. Estas redes de buracos é a prova cabal de que a nanotecnologia (litografia de feixe de elétrons, por exemplo e outros métodos de criação de estruturas regulares) chegou a um ponto evolutivo tal que consegue-se modelar filmes finos com lacunas extremamente pequenas e dispostas das mais diferentes maneiras. Através de uma rede de buracos quadrada, por exemplo, consegue-se obter novas configurações de rede de vórtices diferentes da simetria triangular habitual, obtida na ausência de defeitos. Estes novos arranjos, por sua vez, apresentam comportamentos anômalos nas taxas de relaxação (Baert

³⁵O termo *antidot* foi trazido de trabalhos anteriores com nanoestruturação de filmes semicondutores.

et al., 1995a) e na magnetização (Baert *et al.*, 1995b) que resultam em correntes críticas acima do valor encontrado em substratos suaves. Além disso, dependendo do valor do campo aplicado e da temperatura, pode-se encontrar, para campos $H > H_1$, redes de linhas de fluxo constituídas de vórtices ancorados com apenas um quantum ou mesmo mais de um vórtice por defeito (Moshchalkov *et al.*, 1996), bem como vórtices ancorados coexistindo com vórtices intersticiais, isto é, vórtices localizados entre os buracos³⁶. No primeiro caso, a estabilidade destes vórtices ancorados de múltiplos quanta, energeticamente desfavorável em filmes ausentes de *pinning*, é obtida através de centros de ancoragem relativamente largos (Buzdin, 1993). O número máximo de linhas de fluxo ancoradas em um buraco de raio r é determinado pelo número de saturação $n_s \cong \frac{r}{2\xi(T)}$ ³⁷ (Mkrtchyan & Shmidt, 1972). No segundo caso, a estabilidade dos vórtices intersticiais se dá por estes estarem em uma região de suave depreciação, mínimos locais, mas suficientemente forte para em temperaturas baixas mantê-los localizados³⁸.

Ainda em filmes finos estruturados com redes de *antidots*, a transição entre configurações com e sem vórtices intersticiais é responsável por mudanças drásticas nas correntes críticas e na resistividade (Metlushko *et al.*, 1999). A transição entre estes estados revela a importância de se saber a real contribuição dos centros de ancoragem, força ou potencial, no balanceamento de forças e estabilização da rede.

³⁶Trabalhos posteriores apontaram a possibilidade da existência de vórtices intersticiais mesmo em valores de campo menor que o primeiro campo de *matching* H_1 (Reichhardt & Gronbech-Jensen, 2001). Note que tal ordenamento não é possível de ser encontrado em outros sistemas como arranjos de junções Josephson (Teitel & Jayaprakash, 1983) e em sistemas utilizando-se do modelo de Falicov-Kimball (Watson, 1997).

³⁷Note que este número pode ser regulado pela temperatura, através de $\xi(T)$, ou pelo raio do buraco, neste caso determinado experimentalmente. Assim, para campos moderados, utilizando-se de uma adequada configuração de centros de ancoragem e em determinada temperatura, pode-se obter estados de mais alto valor de corrente crítica possíveis. O tamanho dos *antidots*, neste caso, é consideravelmente maior que $\xi(T)$ e, logo, o *pinning* tem contribuições tanto eletromagnéticas (devido às correntes de blindagem em torno do defeito) (Buzdin & Feinberg, 1994) quanto estruturais (devido a presença de material de estado normal, no caso o próprio buraco) (Moshchalkov *et al.*, 1998).

³⁸Vórtices intersticiais deixam de ser estáveis quando o sistema é excitado por forças maiores que a força que o aprisiona. Se a excitação for um sinal de radio frequência, por exemplo, pode-se encontrar “degraus”, semelhantes aos de Shapiro em junções Josephson convencionais (Shapiro, 1963), em voltagens $V_n = nV_0$ que revelam o movimento coerente de vórtices intersticiais entre outros vórtices fortemente ancorados (Van Look *et al.*, 1999).

Uma das possibilidades de estimar a profundidade do poço é através de medidas de técnicas indiretas como transporte, magnetização dc ou susceptibilidade ac. As medidas de susceptibilidade ac, em particular, permitem estimar o potencial de ancoragem efetivo sem modificar a distribuição de vórtices (Silhanek *et al.*, 2003). Neste caso, estima-se a força do *pinning* por analisar a dependência da susceptibilidade ac com o campo aplicado h_{ac} , em um regime de baixa dissipação conhecido como regime de Campbell (Campbell & Evetts, 1972).

Porém *antidots* e modulação na espessura não são as únicas possibilidades de tipo de centros de ancoragem de vórtices em filmes finos. Hoje, graças aos avanços nas técnicas de litografia, destacam-se entre tantos, além dos tipos já descritos, *pinning*s com pontos magnéticos e *blind holes*.

Pontos magnéticos são utilizados como centros de ancoragem para vórtices desde 1997 (Martín *et al.*, 1997). Na maioria das vezes, utiliza-se filmes de Nb sob substratos de Si e estes, por sua vez, sob pontos magnéticos de Fe, Ni ou Co. Da mesma maneira que em *antidots*, encontra-se, em medidas de voltagem V , resistividade ρ ou corrente crítica J_c , forte assinatura do efeito *matching* em valores de campo que a densidade de vórtices coincide com a densidade de defeitos ou é uma fração desta (Stoll *et al.*, 2002). O efeito *matching*, mais eficiente do que em casos com pontos não magnéticos (Hoffmann *et al.*, 2000), depende fortemente da simetria da rede de ancoragem, temperatura do sistema e da magnitude da corrente aplicada³⁹. Larga assimetria no perfil da curva $J_c \times H_{apl}$, onde H_{apl} é o campo externo aplicado, demonstra uma contribuição vetorial à interação vórtice-ponto magnético (Morgan & Ketterson, 1998), da ordem da energia do momento $E_{momento}$, proveniente da relação entre as direções do campo externo local \vec{b} e o momento magnético \vec{m} do defeito, sendo dado por

$$E_{momento} = - \int_{\text{ponto}} \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{b}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.49)$$

Para pontos com magnetização no plano, em valores de campos externos múlti-

³⁹Trabalhos recentes apontam que filmes nanoestruturados com configurações antiferromagnéticas possuem corrente crítica superior aos de configuração ferromagnética (Chen & Moshchalkov, 2006).

plos ou submúltiplos do campo de *matching* H_1 , configurações das redes de vórtices em diferentes simetrias de rede de defeitos foram obtidas. A figura (3.7), por exemplo, demonstra esquematicamente as configurações em várias densidades de vórtices (Van Bael *et al.* , 2000).

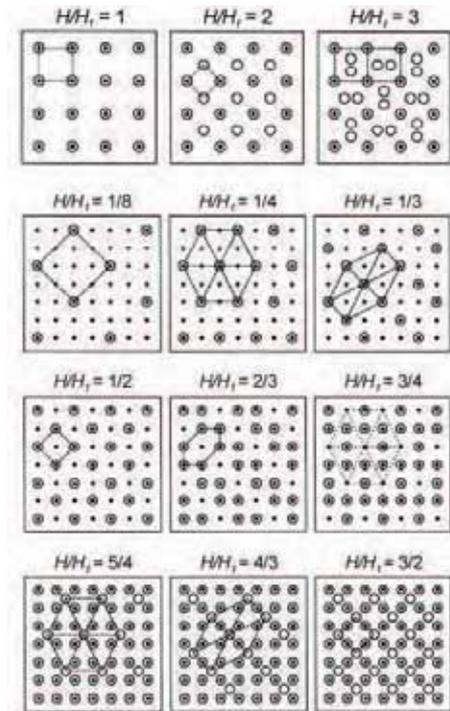


Figura 3.7: Representação esquemática das configurações de redes de vórtices submetidas a pontos magnéticos com magnetização no plano. H_1 é o primeiro campo de “matching”. Pontos pretos e círculos abertos representam centros de aprisionamento e vórtices, respectivamente. Figura retirada de Moshchalkov *et al.* (1999)

Particularmente, em redes retangulares de defeitos, vários trabalhos (Martín *et al.* , 1999) apontaram uma transição, fracamente dependente da temperatura, entre configurações de diferentes simetrias (rede retangular - rede quadrada) para campos crescentes (Martín *et al.* , 2000).

Para pontos com magnetização fora do plano do filme, experimentos comprovaram (Van Bael *et al.* , 2003) a validade da equação acima de forma que pontos magnéticos podem servir como centros atrativos ($\vec{m} \parallel \vec{H}_{apl}$) ou centros repulsivos

($\vec{m} \parallel -\vec{H}_{apl}$). Para uma rede quadrada de defeitos, a presença de densidade de vórtices um pouco acima ou abaixo dos valores de *matching* induz a formação de domínios de vórtices, em consequência da interação efetiva entre os vórtices serem de longo alcance (Grigorenko *et al.*, 2003). Pode-se demonstrar, além disso, que o número e o tamanho dos domínios dependem diretamente do comprimento de penetração efetivo do filme Λ , do parâmetro de rede dos vórtices a_Δ e do número de vórtices excedentes ou ausentes em relação ao valor de *matching*.

Redes de defeitos de *blind holes*, por sua vez, constituem-se, diferentes dos *antidots*, de cavidades não totalmente perfuradas. Estas cavidades possuem uma fina camada supercondutora em sua base, como mostra a figura (3.8a), capaz de aprisionar vários vórtices de um quantum de fluxo e mantê-los separados (Bezryadin *et al.*, 1996).

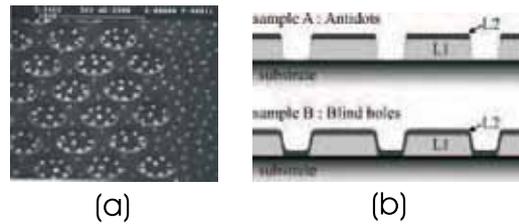


Figura 3.8: (a) Visualização de vórtices (marcas mais claras) usando decoração de Bitter em “blind holes”. (b) Diferença estrutural entre “blind holes” e “antidots”. L1 e L2 são camadas de Pb de diferentes espessuras. Figuras retiradas de Raedts *et al.* (2004) e Bezryadin *et al.* (1996).

Trabalhos recentes (Raedts *et al.*, 2004) demonstraram que este tipo defeito possui, em relação a buracos, capacidade reduzida de aprisionamento de vórtices, revelado pelo seu baixo valor do número de saturação n_s . Isto se dá porque a força efetiva de aprisionamento nestes defeitos é menor que no caso de *antidots*.

Paralelo aos avanços experimentais, diversos resultados analíticos e através de simulações foram obtidos durante estes últimos 30 anos. Charles Reichhardt, por exemplo, apontou a existência do efeito *matching* em valores particulares de campo, em sistemas 2D constituídos de redes triangulares ou quadradas de centros de ancoragem parabólicos (Reichhardt *et al.*, 1997), que assemelham-se aos *blind holes*. O balanceamento entre as forças vórtice-vórtice e vórtice-*pinning* resultou

em uma verdadeira gama de rede de vórtices de diferentes simetrias e dependentes principalmente da densidade de linhas de fluxo, da simetria do arranjo e da magnitude dos centros de ancoragem (Reichhardt & Nori, 1998). Estes resultados são semelhantes aos resultados experimentais obtidos, dois anos antes, por Moshchalkov (Harada *et al.*, 1996a) utilizando microscopia de Lorentz. Modelando a interação entre os vórtices, estritamente logarítmica, Charles Reichhardt (Reichhardt *et al.*, 2001) também observou a existência de diferentes transições de fase, dependente da força do defeito, em função da temperatura. Para *pinnings* fracos, semelhante ao encontrado em pontos magnéticos pequenos, uma rede de vórtices comensurável formada em baixas temperaturas funde-se em uma rede aproximadamente triangular flutuante, fruto de oscilações coletivas 1D ao longo do eixo de simetria da rede e em direção aos pontos intersticiais. Quando a temperatura é acrescida, o sistema é induzido à fase líquida. Centros de aprisionamento forte, experimentalmente similar ao caso dos *antidots*, impõem uma transição direta do estado sólido ancorado ao estado líquido. Redes de vórtices incomensuráveis, por sua vez, fundem-se diferentemente dos casos anteriores, em múltiplos estágios, de modo a aparecer, antes da fase líquida de vórtices, um sistema com vórtices intersticiais descorrelacionados (estado líquido intersticial) (Grigorenko *et al.*, 2001). Impondo corrente externa à rede de vórtices ancorada, o desacoplamento das linhas de fluxo pode ser elástico (para campos comensuráveis $H_n = nH_1$) ou plástico (para campos incomensuráveis $H_n \neq nH_1$) (Reichhardt & Gronbech-Jensen, 2001). No último caso, vacâncias ($H < H_n$) e interstícios ($H > H_n$) da rede de vórtices fundem-se antes do restante da rede ancorada⁴⁰.

Além dos trabalhos de Reichhardt, uma boa parte da pesquisa teórica com vórtices em sistemas bidimensionais procurou definir explicitamente os tipos e a ordem de transição, regida pela temperatura, em que eles estão envolvidos. Grande

⁴⁰Reichhardt também retratou a possibilidade de aprisionamento de mais de um vórtice por defeito (Reichhardt & Gronbech-Jensen, 2000). Nestes casos, a força de desacoplamento dos vórtices, força de *depinning* crítica f_p^c , possui valores máximos de magnitude aproximadamente iguais em todos os campos de *matching* (diferente dos casos de ancoragem de apenas um fluxo, onde f_p^c cai para $H > H_1$). Além disso, em campos comensuráveis, a força de *depinning* foi vista ser linearmente dependente da magnitude do defeito. Redes incomensuráveis, por sua vez, possui dependência um pouco mais complexa, visto nestes casos ser a fusão da rede de vórtices intermediada por duas fases, a fase sólida e a fase líquida intersticial.

parte dos resultados apontou para uma transição entre as fases sólido ancorada (ordem translacional de longo alcance) - sólido flutuante (ordem translacional algébrica) - líquida em sistemas de baixa densidade, e transição direta entre as fases sólida ancorada - líquida em sistemas de alta densidade (onde *depinning* e fusão coincidem) (Hattel & Wheatley, 1995). A temperatura de desacoplamento dos vórtices dos defeitos é linearmente dependente da densidade de vórtices e para densidades suficientemente baixas vai a zero. A transição de fusão da rede, pelo contrário, mantém-se constante a baixas densidades, o que coincide com o predito pela teoria de KTHNY. Quanto a ordem das transições, o desacoplamento dos vórtices do substrato e a fusão da rede de vórtices é vista ser, respectivamente, de primeira ordem (Gotcheva & Teitel, 2001) (o que parece ser consenso geral) e de primeira ordem fraca (a ordem desta transição ainda gera dúvidas)⁴¹ (Franz & Teitel, 1995).

Enfim, independente do tipo de *pinning*, supercondutores periodicamente nanoestruturados revelam exarcebada capacidade de aprisionamento de fluxo, frente a filmes suaves, em valores de campos aplicados $H = H_1$, onde a densidade de vórtices é igual a densidade de centros de ancoragem. Esta característica permanece, embora gradativamente em menor magnitude, para valores de campos comensuráveis $H_n = nH_1$, onde n é um número inteiro. A intrincada relação entre forças vórtice-vórtice e vórtice-*pinning* resulta em uma dependência não trivial da corrente crítica e magnetização com o campo aplicado devido aos reagrupamentos da própria configuração das redes de vórtices.

⁴¹Note que, segundo Hattel, transição de fusão de rede de vórtices em sistemas 2D é de segunda ordem, para baixa densidade f de linhas de fluxo ($f \lesssim \frac{1}{30}$) (Hattel & Wheatley, 1994). Porém, trabalhos posteriores usando gás de Coulomb apontaram ser de primeira ordem fraca a natureza da transição de fusão em duas dimensões (Choquard & Clerouin, 1983). Hu e MacDonald, por sua vez, também encontraram, usando a aproximação de Ginzburg Landau, transição de primeira ordem para derretimento de uma rede de vórtices (Hu & MacDonald, 1993), independente da densidade de vórtices. Mais tarde, Zhu demonstraria que o acréscimo de desordem em um sistema constituído inicialmente de rede periódica de defeitos levaria à redução da força de *depinning* de modo que a transição passaria ser de segunda ordem em um ponto tricrítico (Zhu & Xing, 1998).

Capítulo 4

Simetria e fusão de rede de vórtices em sistemas 2D

4.1 Introdução

O capítulo anterior demonstrou que vórtices podem estabilizar-se em diferentes configurações dependendo da simetria e do tipo da rede de ancoragem. No caso particular de armadilhas de raio r_p relativamente pequenas, simulações numéricas e técnicas de visualização experimentais apontaram o aprisionamento de apenas um fluxo de um quantum para cada defeito, de modo que o número de saturação $n_s = 1$. Se as forças produzidas por estes defeitos forem altas o suficiente para superar as tensões elásticas da rede de vórtices, estruturas comensuráveis podem ser formadas para valores de campo magnético externo tanto acima quanto abaixo do primeiro campo de *matching* H_1 . O surgimento de vórtices intersticiais também depende não trivialmente do valor do campo magnético externo aplicado, podendo configurar-se para $H \gtrsim H_1$.

Embora, em princípio, possa parecer um problema particular da área de supercondutividade, a ancoragem de vórtices pode ser interpretada como uma tentativa de casamento entre uma rede elástica e uma rede periódica de substrato rígido. Neste caso, o problema torna-se mais abrangente haja vista a sua similaridade com tantos outros na física da matéria condensada: camadas monoatômicas adsorvidas em uma superfície monocristalina (Pokrovsky, 1984), colóides (Van Blaaderen & Wiltzius, 1997), arranjos de “bolhas” magnéticas (Hu & Westervelt, 1997; Seshadri

& Westerwelt, 1992), cristais de Wigner (Andrei *et al.*, 1998; Piacente *et al.*, 2003) e redes de junções Josephson (Vu *et al.*, 1993), por exemplo.

Neste capítulo, estar-se-á interessado na obtenção das possíveis configurações de equilíbrio de redes de vórtices e na dependência da temperatura de fusão destas redes submetidas a diversas simetrias de rede de ancoragem em vários valores de campo magnético aplicado. Na primeira parte, seção (4.3.1), vórtices são submetidos a redes de *pinning* retangulares com $n_s = 1$. Na segunda parte, seção (4.3.2), o estudo é ampliado a estruturas mais simples como linhas e calhas. A terceira e última parte é destinada à análise de tamanho finito para redes de vórtices sem substrato, com o objetivo de revelar a ordem da transição de fusão em duas dimensões. Todo o estudo é feito através de simulações de Monte Carlo, cujos detalhes podem ser encontrados no apêndice A.

4.2 Os potenciais de interação e as grandezas mensuráveis

Um sistema bidimensional, com condições de contorno periódicas em x e y , foi “modelado” com N_v vórtices interagindo com um arranjo retangular de N_p centros de aprisionamento. O tamanho do sistema é dado por $L_x L_y$, onde $L_x = 2\lambda$ e $L_y = 2\gamma\lambda$ (λ é o comprimento de penetração da amostra e é adotado como a unidade de comprimento da simulação). $\gamma \equiv \frac{a_{py}}{a_{px}}$ é definido ser o grau de anisotropia do arranjo de *pinning*, sendo $a_{p_{x(y)}}$ o parâmetro de rede da malha de ancoragem na direção $x(y)$. Neste trabalho, usou-se a aproximação de London, de forma que $\xi_0 \ll a_v$, isto é, o raio do núcleo do vórtice é muito menor que a distância média de separação entre eles a_v . O método computacional utilizado foi o método de Monte Carlo, através do algoritmo de Metropolis, em um *ensemble* canônico. Conseqüentemente, o volume e o número de vórtices foram mantidos fixos.

Nesse sistema bidimensional, vórtices são tratados como partículas sem massa interagindo logaritmicamente. Esta relação, $U_{ij}^{vv} = U^{vv}(r_{ij}) = -\frac{\Phi_0^2}{2\pi\Lambda} \ln\left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right)$ está de acordo com a equação de Pearl (Pearl, 1964) no limite de distância intervórtice muito menor que o comprimento de penetração efetivo, $r_{ij} \ll \Lambda$ (equação

demonstrada na seção 2.6.5). Sendo a interação entre os vórtices estritamente de longo alcance, a simples truncagem pode resultar em erros numéricos consideráveis. Neste caso, faz-se útil a aplicação de uma série rapidamente convergente (Doria, 1991; Grobech-Jensen, 1999), válida em toda célula de simulação, dada abaixo

$$U_{ij}^{vv} = \gamma C + \pi\gamma \frac{(y_i - y_j)^2}{L_y} - \frac{1}{2} \ln \left[\prod_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\cosh \left(2\pi\gamma \left(\frac{y_i - y_j}{L_y} + k \right) \right) - \cos \left(2\pi \frac{(x_i - x_j) + k\xi}{L_x} \right)}{\cosh(2\pi\gamma k)} \right]. \quad (4.1)$$

Na equação (4.1), C é uma constante dada por

$$C(\gamma) = \frac{\pi}{6} \gamma - \frac{1}{2} \ln(2) - \ln \left[\prod_{k=1}^{\infty} (1 + \exp(-4\pi\gamma k)) \right].$$

A posição da i -ésima partícula é dada pelos termos x_i, y_i . ξ é o grau de distorção da célula de simulação, sendo zero para uma célula quadrada (valor este escolhido para toda a simulação) e $\xi = \frac{2L_y}{\sqrt{3}}$ para uma célula triangular. O potencial descreve a interação entre todos os vórtices na célula de simulação bem com destes com seus vórtices imagens.

A energia total do sistema é, então, dada por

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij}^{vv} + \sum_{ik} U_{ik}^{vp}, \quad (4.2)$$

onde além do potencial de interação vórtice-vórtice U_{ij}^{vv} , U_{ik}^{vp} é potencial de interação entre o i -ésimo vórtice e o k -ésimo centro de ancoramento.

Este último termo, referente à rede de aprisionamento, é construído através de uma função periódica bem comportada, o que evita truncamento e descontinuidades, dada por

$$U_{ik}^{vp} = U^{vp}(x, y) = -\alpha_p \frac{a_p^2 \xi^2}{\pi^2} e^{-\frac{1}{2}(\beta_x^2 + \beta_y^2)/\xi_p^2}, \quad (4.3)$$

onde $\beta_u = \sin(\frac{\pi u}{a_p})$, $u = x, y$, e $\xi_p = \sin(\frac{\pi r_p}{a_p})$. Desta forma, se $r_p \ll a_p$, o vórtice, próximo ao defeito, “sente” um potencial gaussiano dado por $U_{ik}^{vp} = U^{vp}(x, y) = -\alpha_p r_p^2 e^{-\frac{1}{2}(\frac{x^2+y^2}{r_p^2})}$, onde r_p (o raio do defeito) é justamente a posição de força de ancoragem máxima (veja figura 4.1).

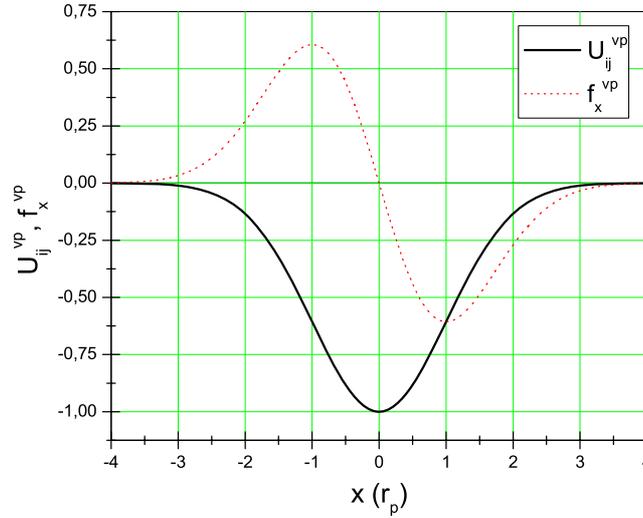


Figura 4.1: Perfil unidimensional do potencial e da força “sentida” pelo vórtice quando este aproxima-se do defeito. A distância está em unidades do raio do *pinning*.

Note que neste potencial, aumentar r_p faz com que além do trivial aumento do raio do defeito, a intensidade do *pinning* intensifique. Aumentar α_p , em contrapartida, apenas acrescenta a profundidade do poço. Note também que a maior distância do vórtice ao defeito é quando $u = \frac{a_p}{2}$, onde $U_{ik}^{vp} = -\alpha_p \frac{a_p^2 \xi_p^2}{\pi^2} \exp(-\xi_p^{-2}) \sim 0$.

Nestas simulações, adotou-se que $r_p = 0.05a_p$ e $a_p = 0.25\lambda$. Apenas um vórtice por defeito é permitido de modo que $n_s = 1$. A simulação foi feita para diferentes graus de anisotropia da rede de ancoragem γ . Para cada caso, o processo iniciou-se em temperatura alta o suficiente para caracterizar o sistema como sendo um líquido isotrópico. A temperatura foi reduzida lentamente em um processo quase adiabático (o conhecido procedimento de *annealing*), e para cada temperatura

fez-se 10^6 passos de Monte Carlo. O número elevado de passos de Monte Carlo garante que, pelo menos, configurações próximas às respectivas configurações mais estáveis foram encontradas. Ao longo dos passos de *annealing*, várias grandezas, termodinâmicas ou não, foram mensuradas, as quais são indicadas abaixo:

- **Desvio padrão posicional σ :** Para ambas as direções x e y , e mesmo $r^2 = x^2 + y^2$, utilizou-se

$$\sigma_a^2 = \frac{1}{N_v} \sum_{j=1}^{N_v} (a_j - \bar{a})^2, \quad (4.4)$$

onde $a = x, y$ ou r , e \bar{a} é o valor médio da grandeza a .

- **Calor específico $C(T)$:** Usufruindo da obtenção do valor da energia total para cada passo de Monte Carlo, pode-se estimar os vários momentos¹ desta energia de modo que o calor específico será dado por (adotando $k_B = 1$)

$$C(T) = \frac{|\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2|}{T^2} \quad (4.5)$$

- **Fração de vórtices ancorados $\chi(T)$:** O percentual de vórtices ancorados para cada temperatura foi calculado usando $\chi(T)$. Este é dado pela fração do número total de vórtices N_v com deslocamentos menores que o raio do defeito r_p , isto é,

$$\chi(T) = \frac{\langle N(T) \rangle}{N_v}. \quad (4.6)$$

Neste caso, $\langle N(T) \rangle$ é o número médio de vórtices com $|r_i - r_k| < r_p$, onde r_i e r_k são, respectivamente, a posição do i -ésimo vórtice e do k -ésimo defeito.

- **Função de correlação densidade-densidade $g(\vec{r})$:** Para esta função, usou-se

$$g(\vec{r}) = \frac{G(\vec{r})}{\rho_0} = \frac{V}{N^2} \sum_i^N \sum_j^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij}) \quad (4.7)$$

¹O n -ésimo momento da energia é dado por $\langle E^n \rangle = \int E^n P(E) dE$. Logo, o primeiro momento é a própria energia média.

onde $G(\vec{r})$ é a função de auto-correlação densidade-densidade e ρ_0 é a densidade do sistema.

Além destes, ainda obteve-se a matriz densidade de probabilidade posicional $P(x, y)$ (ou simplesmente matriz densidade), função de estrutura $S(\vec{k})$, histograma de energia $H(\epsilon)$, “snapshots” das estruturas estáveis, e suas respectivas diagramações de Voronoi e Delaunay.

4.3 Resultados

4.3.1 Configurações de equilíbrio e fusão de rede de vórtices em substratos anisotrópicos

Diferentes configurações de redes de vórtices foram obtidas em vários valores de campo magnético externo H e para vários graus de anisotropia da rede de ancoragem γ . No primeiro momento, estudou-se o caso particular $\gamma = 1$ (rede de ancoragem quadrada). Para esta simetria de rede de defeitos, todas as estruturas coincidiram com as obtidas anteriormente usando *antidots* (Harada *et al.*, 1996b) e pontos magnéticos (Moshchalkov *et al.*, 1999), exceto para $H/H_1 = 1/8$ ($N_v = 8$), mostrada na figura (4.2).

Cálculos simples podem comprovar que a configuração mostrada na figura (4.2) é realmente mais estável do que aquela obtida por Moshchalkov (Moshchalkov *et al.*, 1999). Neste caso, lembre que como todos os vórtices estão ancorados, apenas as interações vórtice-vórtice, em primeira aproximação, precisam ser utilizadas para estimar a energia da rede. Assim, a diferença de energia $\Delta E = E_n - E_v$ entre esta nova configuração e o velho perfil da rede, encontrado por Moshchalkov *et al.*, depende do parâmetro de anisotropia conforme a expressão $\Delta E = \ln \left[\frac{16\gamma\sqrt{1+\gamma^2}}{\sqrt{(1+9\gamma^2)(1+25\gamma^2)}} \right]$ e dada pela figura (4.3).

A diferença de energia entre as configurações de Moshchalkov *et al.* (1999) e a nova mostrada na figura (4.2) também pode ser obtida, porém agora precisamente, utilizando a expressão (4.1). Novamente obtém-se que a configuração nova é mais

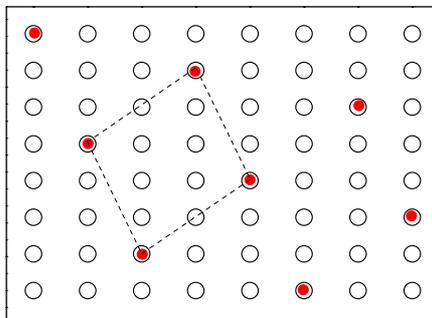


Figura 4.2: Configuração de uma rede de vórtices (pontos escuros) submetidos a uma rede de ancoragem quadrada (círculos vazados) quando $H/H_1 = 1/8$ e $T=0$.

estável do que a anterior. Em particular, o valor $\gamma = 0,866$ revela ser o ponto de menor diferença de energia.

Ainda submetidas à rede de ancoragem quadrada, configurações de vórtices para campos de *matching* acima de H_1 foram obtidas, como exemplificado na figura (4.4).

Prosseguindo com o estudo, outras configurações de equilíbrio de redes de vórtices em $T = 0$ foram obtidas, como mostra a figura (4.5), para vários valores de γ e de campos menores que o primeiro campo de *matching* H_1 .

Para redes de vórtices com densidade $H/H_1 = 1/8$, achou-se a mesma simetria em relação aos centros de ancoragem tanto para $\gamma = 0.866$ quanto $\gamma = 1$ (fig4.5a).

Porém, quando o valor de γ foi acrescido, a estrutura obtida foi semelhante a sugerida por Moshchalkov *et al.* (1999) para $\gamma = 1$ (fig4.5b). Assim, este resultado discorda do gráfico da figura (4.3) e indica que, mesmo estando todos os vórtices aparentemente ancorados, o pequeno desvio destes em relação ao ponto de potencial mínimo deve ser levado em consideração. Falando de outra maneira, a aproximação utilizada na figura (4.3) só é útil para valores de γ específicos que induzem redes perfeitamente simétricas aos centros de ancoragem. O limite de $\gamma = 0,866$ se enquadra exatamente neste caso especial pelo fato trivial de possuir parâmetro de anisotropia igual à razão entre a altura e a base de uma

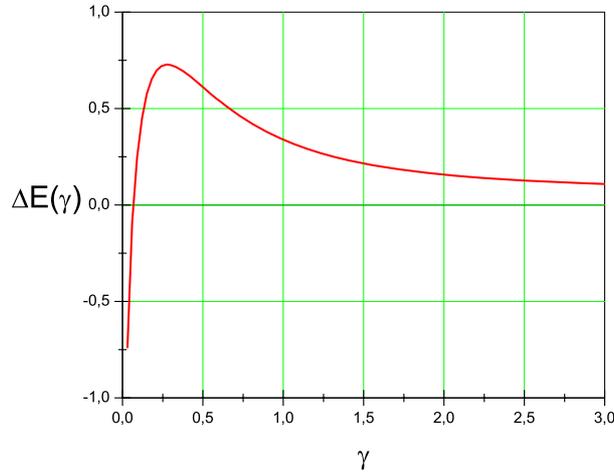


Figura 4.3: Diferença de energia ΔE entre as configurações novas (inclinadas em relação à rede de ancoragem) e as anteriormente obtidas por Moshchalkov (Moshchalkov *et al.*, 1999) em função do parâmetro de anisotropia γ . Nesta aproximação usa-se do argumento de que para densidades baixas o bastante e em específicas simetrias de ancoramento todos os vórtices que estão nos defeitos permanecem exatamente no centro destes, isto é, no mínimo de potencial.

rede triangular perfeita. O caso $\gamma = 1$, por sua vez, sugere ser um caso limite.

A estrutura da figura (4.5b) é mantida até $\gamma = 2$ quando a distância a_{py} é grande o bastante para induzir linhas de vórtices na direção y com o objetivo de diminuir a distância entre eles (fig4.5c). Para $H/H_1 = 1/4$ (fig4.5d), a estrutura é estável o bastante para permanecer até $\gamma = 3$ (semelhante ao encontrado na figura (3.7)). Neste último caso, a rede é quebrada em vários domínios facilmente identificados (fig4.5e). Para $H/H_1 = 1/2$, a estrutura é mantida até $\gamma = 1.5$ (fig4.5f). Para $\gamma = 1.732$ e $\gamma = 2$ (fig4.5g), a rede de vórtices quebra-se em vários domínios e quando $\gamma = 3$ (fig4.5h) a distância a_{py} é tão grande e, neste caso, a densidade de vórtices é tão alta que surgem vórtices intersticiais. E finalmente, para $H/H_1 = 1$ todos os vórtices são ancorados se $\gamma < 1$ (fig4.5i). Nos outros casos, permanecem 50% ancorados (fig4.5j).

Em vista das configurações obtidas, pode-se concluir que, em muitos dos ca-

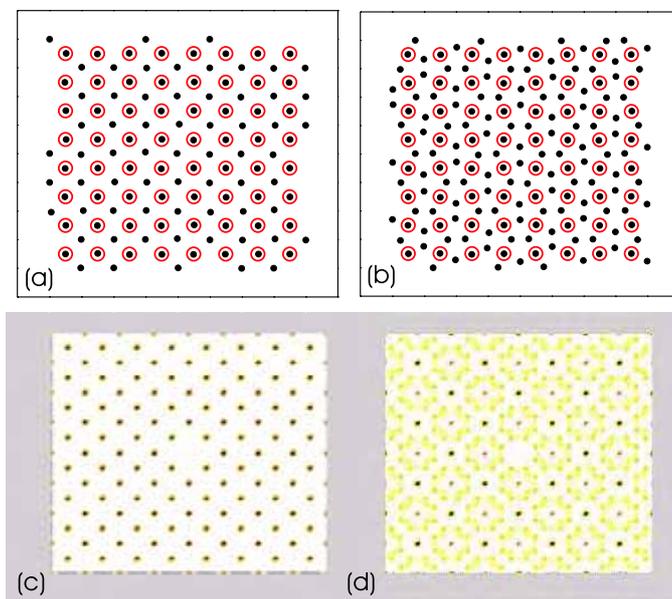


Figura 4.4: Configuração (figuras (a) e (b)) e matriz densidade-densidade (figuras (c) e (d)) de redes de vórtices submetidas a um substrato de simetria quadrada para valores de campo $H/H_1 = 2$ (figuras (a) e (c)) e $H/H_1 = 3$ (figuras (b) e (d)) em $T=0$. Perceba o aparecimento de dímeros quando $H/H_1 = 3$. As estruturas encontradas para os dois casos coincidem com as já encontradas anteriormente na literatura (figura (3.7)).

sos, estes arranjos de centros de ancoragem conseguem induzir uma deformação uniforme na rede de vórtices. Quando H/H_1 é de baixo valor ($H/H_1 < 0.5$) e $\gamma \neq 1$, a interação vórtice-defeito produz uma deformação global na rede de uma maneira que as distâncias entre os vórtices são acrescidas em uma direção e contraídas na outra direção perpendicular, mantendo, assim, constante a densidade de linhas de fluxo. Porém, sabe-se que em duas dimensões o custo energético para cisalhar uma rede de vórtices é menor que a energia desprendida para comprimir uma rede (ver seção 2.6.7), isto é, $C_{66} \ll C_{11}$. Assim, quando a densidade de vórtices é alta, a interação vórtice-vórtice é forte o bastante para induzir diferentes configurações. A energia de ancoragem dada pelos defeitos, necessária para mantê-los fixos nos *pinnings*, não é forte o bastante para compensar a energia

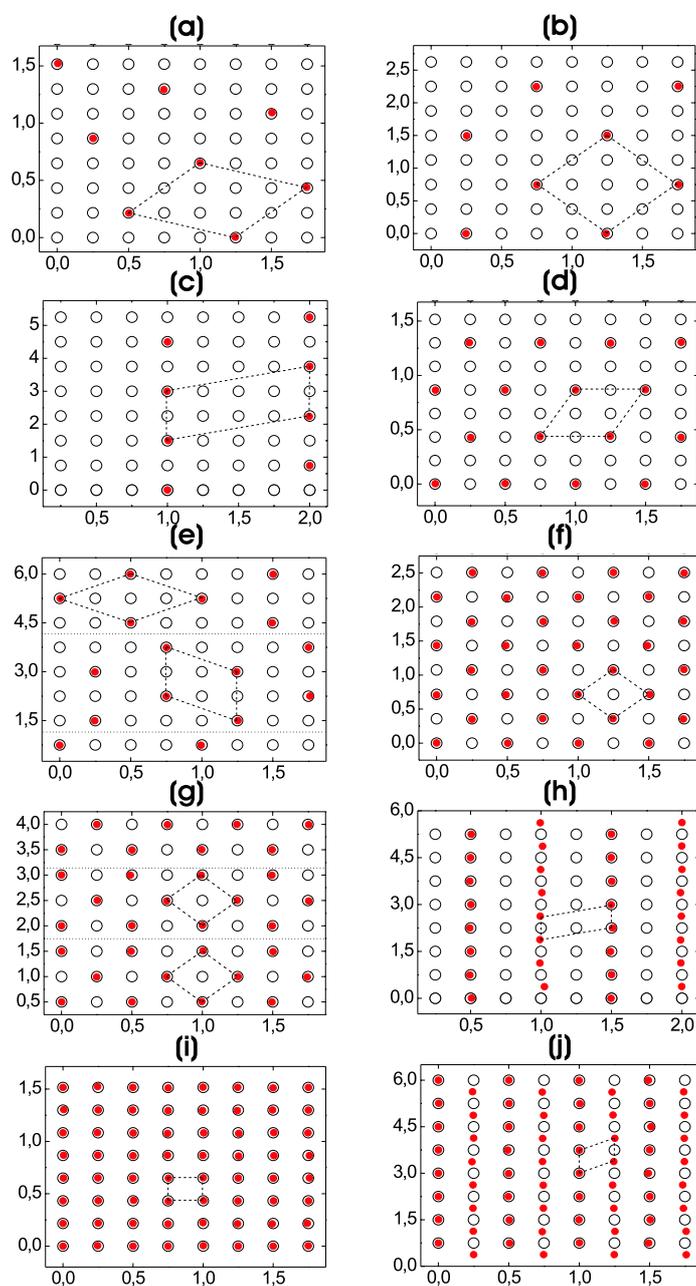


Figura 4.5: Configurações de equilíbrio de redes de vórtices (círculos fechados) para diferentes valores de anisotropia de rede de ancoragem γ e campo externo H/H_1 : $H/H_1 = 1/8$, e (a) $\gamma = 0.866$, (b) $\gamma = 1.5$ e (c) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1/4$ e (d) $\gamma = 1.433$, (e) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1/2$, e (f) $\gamma = 1.433$, (g) $\gamma = 2$ and (h) $\gamma = 3$. $H/H_1 = 1$, e (i) $\gamma = 0.866$, (j) $\gamma = 3$. Em todos os casos, $T=0$.

elástica. Nestes casos, para $H/H_1 = 0.5$ e $H/H_1 = 1$, quando respectivamente $\gamma = 3$ e $\gamma > 1$, vórtices intersticiais aparecem para reduzir a energia do sistema formando, por conseguinte, estruturas mais próximas da rede triangular (sabidamente a mais estável quando vórtices estão imersos em um material sem defeitos). Estes vórtices intersticiais, além disso, não estão exatamente no ponto médio entre os sítios de ancoragem, pois a distância entre dois vórtices intersticiais de células unitárias vizinhas é menor que entre um vórtice intersticial e o vórtice ancorado mais próximo. Isto leva a um deslocamento dos vórtices presentes nos interstícios de forma a maximizar a menor distância entre eles (e com isso reduzir a energia do sistema).

Além das configurações de equilíbrio em $T = 0$, o processo de *annealing* foi utilizado para coletar várias grandezas físicas. Todas as temperaturas de transição obtidas foram caracterizadas usando a fração de vórtices ancorados $\chi(T)$, o desvio padrão da posição do vórtice $\sigma(T)$ e o calor específico do sistema $C(T)$.

Para as curvas de fração de vórtices ancorados em função da temperatura, identifica-se uma temperatura de transição $T_{\chi=1}$ abaixo da qual todos os vórtices estão alocados nos defeitos. Assim, pode-se definir nitidamente duas fases: a primeira, uma fase ancorada de baixa temperatura onde $T < T_{\chi=1}$ e a segunda uma fase de rede de vórtices desacoplados do substrato, em altas temperaturas $T > T_{\chi=1}$. Na figura (4.6), por exemplo, mostra-se a curva $\chi(T) \times T$ para $H/H_1 = 1$. Note a presença de rede de vórtices parcialmente ancorados quando $\gamma = 3$, de acordo com a figura (4.5j). Para altas temperaturas, o efeito de aumentar o grau de anisotropia γ induz a um decréscimo na fração de vórtices ancorados, fruto da redução na densidade de centros de ancoragem, e um aumento na mobilidade dos vórtices. As curvas também mostram que a fração de vórtices ancorados decresce, em temperaturas crescentes, mais rápido para o caso $\gamma = 1$ que em relação aos demais casos (exceto o caso extremo $\gamma = 3$), o que sugere uma baixa estabilidade para uma rede interagindo com centros de ancoragem de simetria quadrada.

O estudo do comportamento do calor específico em função da temperatura é outra maneira de caracterizar uma transição de fase. O ponto de fusão da rede de vórtices será caracterizado pela presença de máximos agudos (“picos”) na curva.

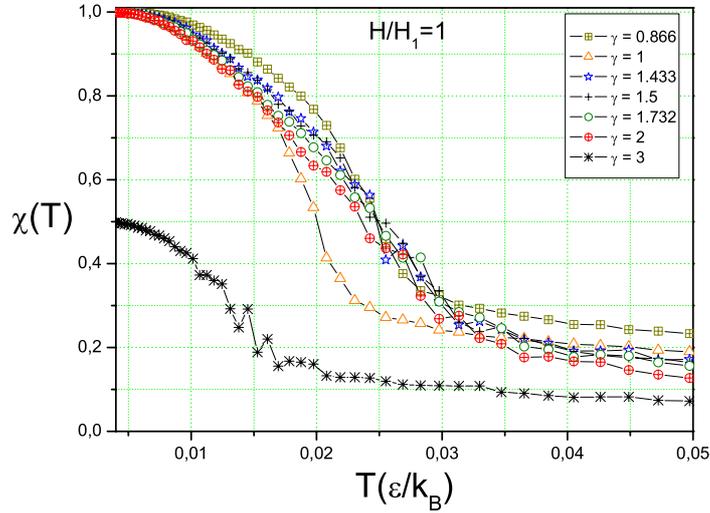


Figura 4.6: Fração de vórtices ancorados em função da temperatura para $H/H_1 = 1$ e diferentes valores de γ .

Assim, curvas de $C(T) \times T$ foram obtidas para todos os casos estudados com diferentes valores de H/H_1 e γ . Na figura (4.7), por exemplo, demonstra-se o perfil da curva para $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 3$.

Na figura (4.7), observa-se além do “pico” em $T \sim 0.025$, uma pequena elevação em uma temperatura menor. Isto sugere que o sistema desprende algum tempo em um estado metaestável antes de ir para a configuração final mais estável. Observa-se também que o ponto onde existe o “pico” na curva do calor específico coincide com o ponto de valor máximo da curva $\frac{d\chi(T)}{dT}$. Assim, pode-se definir $T_{C(T)}$ como sendo o ponto de transição de fase onde o sistema, quando exposto a temperaturas decrescentes, perde a maior quantidade de energia. Abaixo desta temperatura, vórtices começam a ordenar-se fortemente e formar uma rede com correlação orientacional.

A mobilidade dos vórtices, por sua vez, foi medida pela variância posicional destes no plano $\sigma_r(T)$, e na direção x e y , σ_x and σ_y , respectivamente (fig.4.8)). Características diferentes são obtidas entre as configurações com e sem (rede

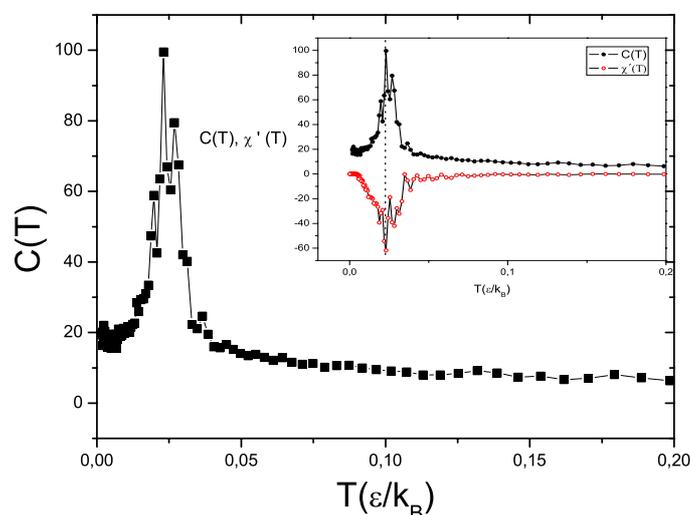


Figura 4.7: Dependência do calor específico com a temperatura para o caso $H/H_1 = 1/4$ and $\gamma = 3$. Figura interna menor: detalhe da região de transição onde a curva possui um máximo.

quadrada) anisotropia de rede de ancoragem. Na figura (4.8), pode-se observar que a temperatura em que a mobilidade dos vórtices cai rapidamente nas direções x (T_{σ_x}) e y (T_{σ_y}) diferem nas estruturas com redes de ancoragem retangulares, mas é a mesma quando vórtices são submetidos a redes quadradas. Assim, a anisotropia da rede de ancoragem consegue induzir inerentemente anisotropia na mobilidade do vórtice. A magnitude desta diferença de comportamento depende do grau de anisotropia e da densidade de vórtices.

Logo, como já dito, a temperatura em que a variância cai rapidamente é diferente entre as principais direções x e y da rede de defeitos. Particularmente nos modelos estudados, o sistema começa a fundir na direção x antes da direção y , quando $\gamma > 1$, apenas porque é nesta direção que os vórtices encontram-se mais próximos. Note também que a magnitude da variância na direção x é a mesma nas figuras (4.8a) e (4.8b), como era de se esperar, mas a amplitude de oscilação na direção y é maior na figura (4.8b). Assim, em temperaturas altas, a rede de vór-

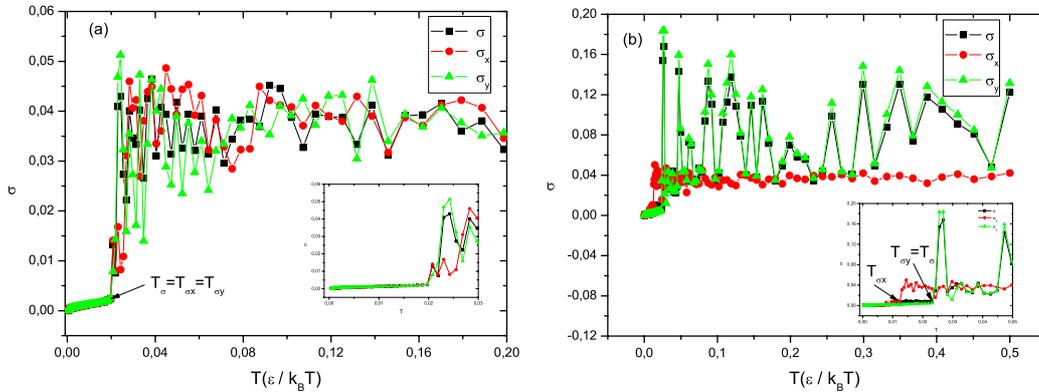


Figura 4.8: Variância posicional para (a) uma rede quadrada, $H/H_1 = 1$ e $\gamma = 1$, e (b) uma rede retangular com $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 3$. Figura menor: A região de transição mostra que a temperatura em que a variância cai rapidamente é a mesma nas direções x e y em (a), e difere em (b).

tices está derretida, desancorada dos defeitos, mas vórtices oscilam de acordo com os parâmetros do substrato. A amplitude das oscilações na direção y é, em média, neste caso particular ($\gamma = 3$), três vezes a amplitude de oscilação na direção x , exatamente a razão entre as direções dos parâmetros da rede de ancoragem dado por γ .

Com o objetivo de melhor caracterizar o sistema, pode-se enfim coletar todas as temperaturas de transição mostradas até agora: $T_{C(T)}$, T_{χ} , T_{σ} e $T_{\chi=1}$ com o objetivo de definir as diferentes transições de fase a que ele é submetido. Quando a temperatura é alta, o sistema caracteriza-se por ser um líquido isotrópico de vórtices até que o sistema alcance $T_{C(T)} = T_{\chi}$. Nesta temperatura, vórtices começam a correlacionar-se, mantendo ordem orientacional, mas sem ordem translacional, isto é, vórtices mantêm constante o número de primeiros vizinhos. Entre $T_{C(T)} = T_{\chi}$ e T_{σ} , vórtices estão parcialmente ancorados, mas correlacionados formando uma rede flutuante. Neste intervalo de temperatura, a amplitude dos movimentos descrita pelas suas variâncias é alta, mas mesmo assim, uma rede de vórtices flutuante é formada. Esta fase é mantida até T_{σ} ser alcançado. Decrescendo mais a temperatura, o sistema é submetido a uma transição em $T_{\chi=1}$, onde a rede flu-

tuante torna-se totalmente ancorada no substrato. Na Fig. (4.9), mostra-se a dependência com a temperatura das diferentes fases em um sistema de densidade $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 0.866$.

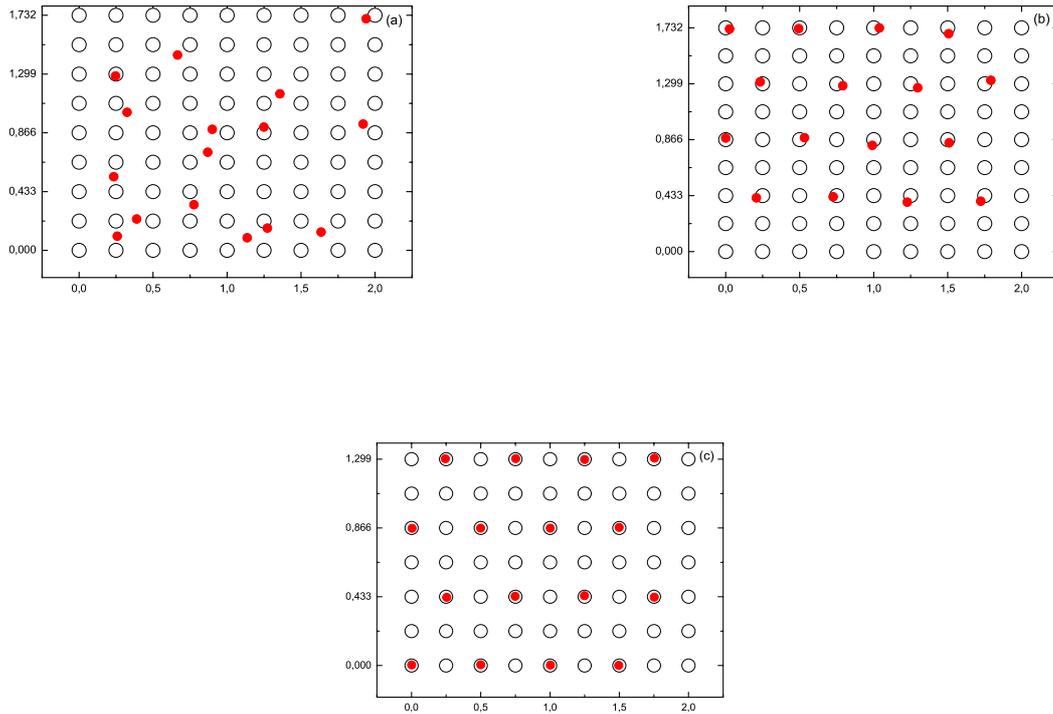


Figura 4.9: Configuração estável de vórtices (círculos fechados) para um sistema com $H/H_1 = 1/4$ e $\gamma = 0.866$. Para (a) $T > T_{C(T)}$, (b) $T_{C(T)} > T > T_{\chi=1}$ e $T < T_{\chi=1}$.

Para alguns sistemas com arranjo retangular de defeitos tem-se, em particular, duas outras temperaturas de transição, T_{σ_x} e T_{σ_y} , onde a variância nas direções x e y , respectivamente, vai a zero em valores distintos. Nestes casos, pode-se usar a função de correlação densidade-densidade para definir dois valores limítrofes de temperatura entre os quais define-se a existência de uma nova fase, a fase esmética, como é demonstrado nas figuras (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13).

Para densidades de vórtices $H/H_1 = 1/8$, a diferença entre T_{σ_y} e T_{σ_x} cresce com o acréscimo da anisotropia γ . Neste caso, a densidade de vórtices é baixa o bastante para permití-los mover na direção x , onde a distância entre eles é menor.

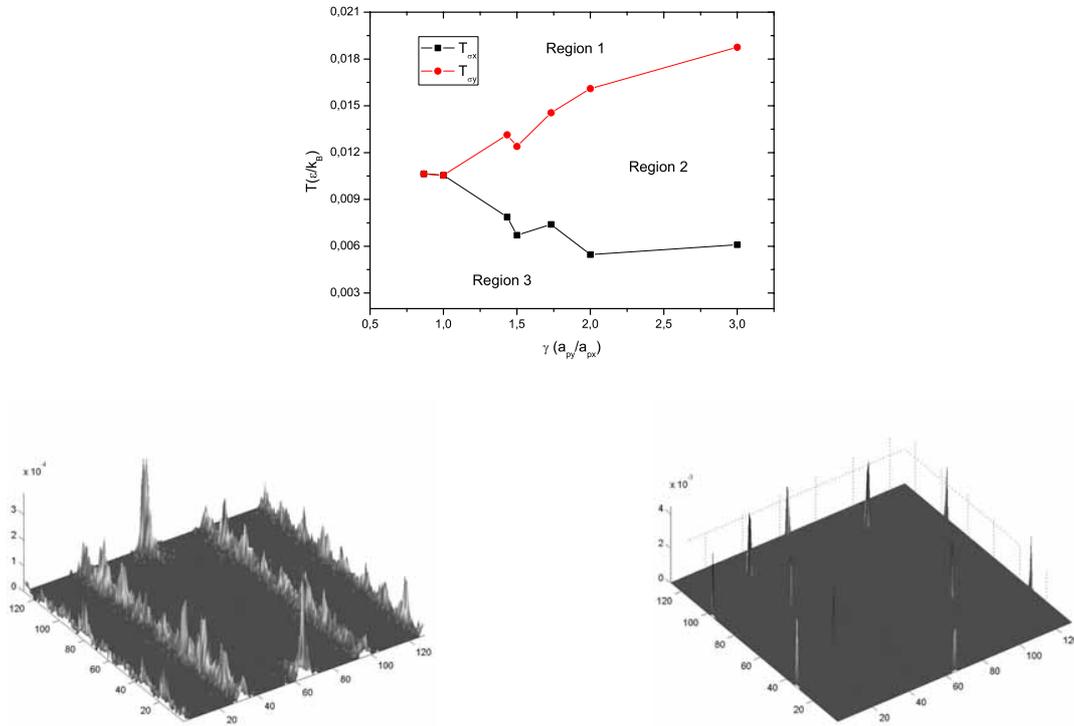


Figura 4.10: Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/8$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para a região 2 (esquerda), e região 3 (direita).

Assim, a rede de vórtices casa-se perfeitamente com a rede de ancoragem e aponta a direção de maior distância entre os vórtices como sendo a direção y , de forma a maximizar a distância entre eles. Isto acontece até $\gamma = 2$, quando a_{py} é alto o bastante para quebrar a simetria da rede. Na figura (4.10), um diagrama de fases com três tipos de estruturas de vórtices é mostrado. Na região 1, vórtices oscilam igualmente em ambas as direções x e y . Na região 2, a oscilação na direção y pára, mas permanece na direção x , levando à formação da fase esmética. Na região 3, a oscilação cessa em ambas as direções e a rede torna-se totalmente ancorada.

Na figura (4.10) também é mostrada a matriz densidade-densidade para as regiões 2 (lado esquerdo) e 3 (lado direito). Os pontos de maior valor na matriz densidade-densidade corresponde às distâncias entre os vórtices mais freqüentes, como pode ser visto na figura (4.5b).

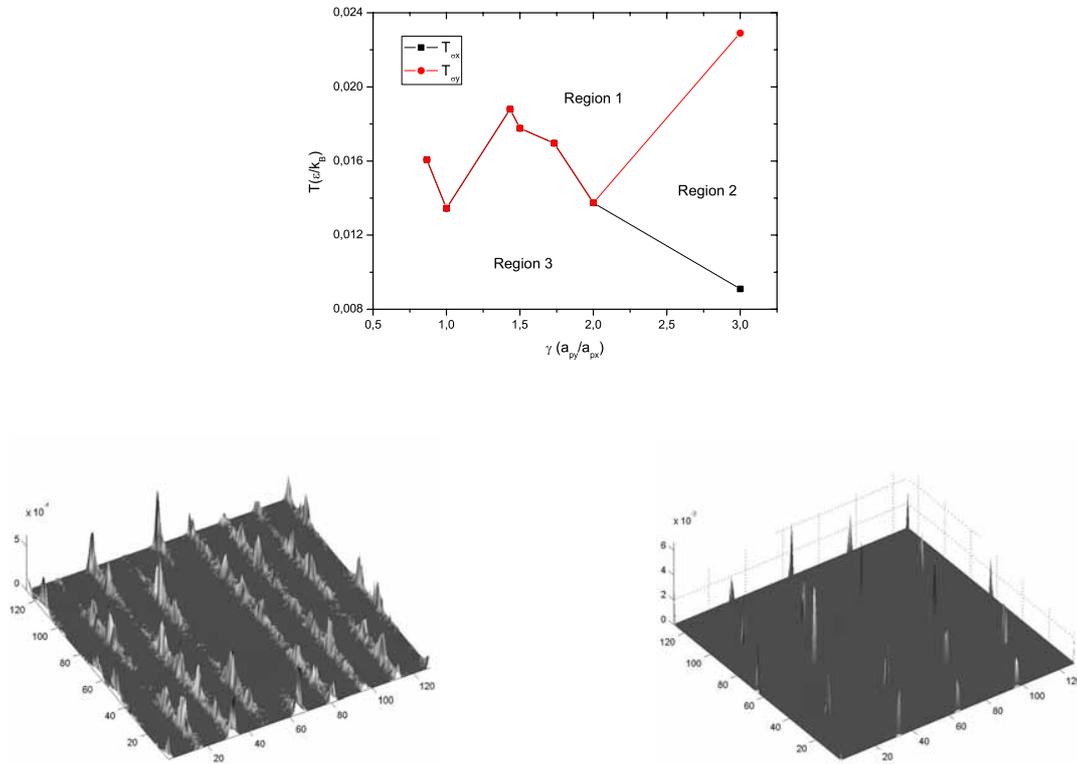


Figura 4.11: Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/4$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para a região 2 (esquerda), e região 3 (direita).

Para densidade de vórtices $H/H_1 = 1/4$, a distância entre estes é aproximadamente igual nas direções x e y em quase todas as estruturas (fig. 4.5d). Esta alta simetria consegue inibir a resposta anisotrópica nas variâncias posicionais até o alto valor de anisotropia estrutural $\gamma = 3$ (fig.4.5e). Neste momento, a rede de vórtices é quebrada formando diversas estruturas de domínios. Assim, como mostrado na figura (4.11), a diferença entre T_{σ_y} and T_{σ_x} é zero, exceto quando $\gamma = 3$. Os gráficos da função de correlação densidade-densidade demonstram que existem duas diferentes características da rede de vórtices com fase esmética na região 2 (lado esquerdo da figura) e fase totalmente ancorada na região 3 (lado

direito da figura).

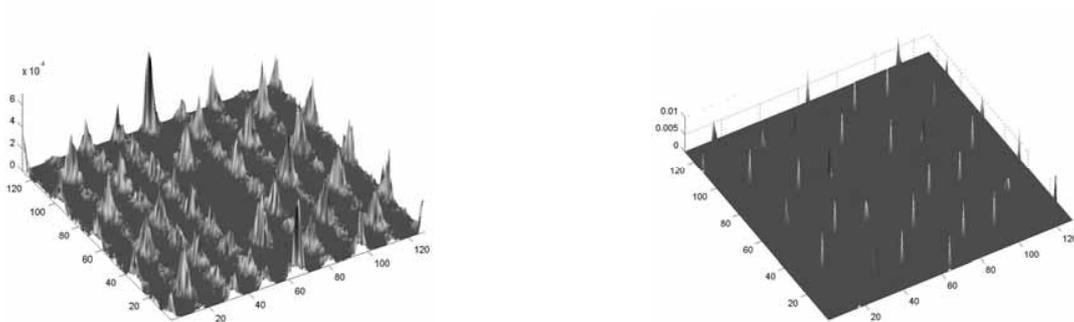
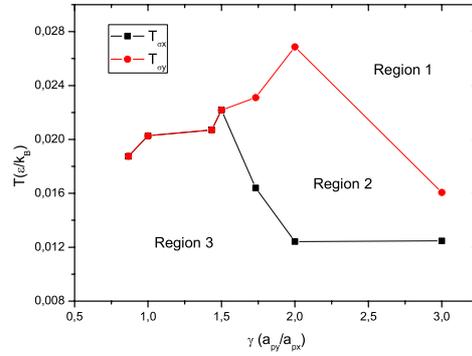


Figura 4.12: Diagrama de fases para $H/H_1 = 1/2$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para as regiões 2 (esquerda) e 3 (direita).

Para densidade de vórtices $H/H_1 = 1/2$, a diferença $T_{\sigma_y} - T_{\sigma_x}$ é maior quando a estrutura da rede de vórtices é quebrada em vários domínios (fig. 4.5g) nos quais a separação entre as linhas de fluxo é mais distinta nas direções x e y . Quando $\gamma = 3$, a anisotropia é alta o bastante para permitir a existência de vórtices intersticiais. Estes, por sua vez, permitem o acréscimo da densidade de vórtices e o decréscimo da diferença entre as distâncias x e y , e, por conseguinte, a redução de $T_{\sigma_y} - T_{\sigma_x}$. Os pontos de maior valor na matriz densidade-densidade correspondem, novamente, às distâncias entre os vórtices mais frequentes.

E finalmente para o caso $H/H_1 = 1$, a simetria da rede é tal que T_{σ_y} e T_{σ_x} tornam-se apenas diferentes quando $\gamma = 3$, embora os vórtices intersticiais já

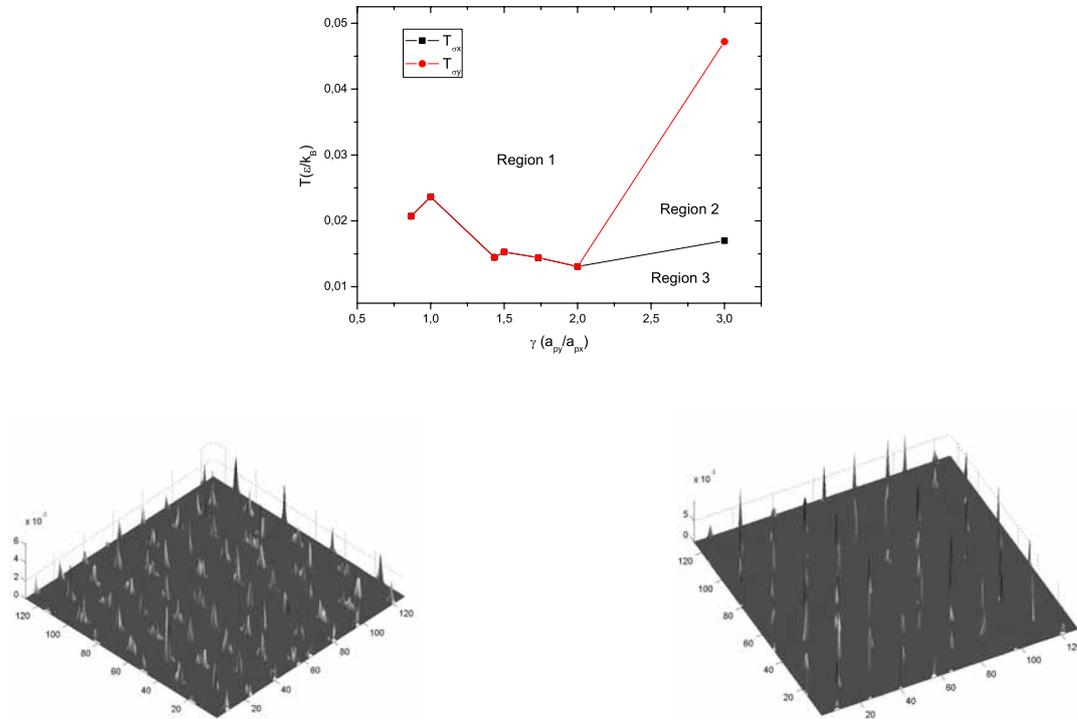


Figura 4.13: Diagrama de fases para $H/H_1 = 1$ e diferentes valores de γ . Além disso, função de correlação densidade-densidade para as regiões 2 (esquerda) e 3 (direita).

apareçam quando $\gamma > 1$. Neste caso, novamente, encontra-se as três diferentes regiões: uma rede isotrópica oscilante (região 1), uma fase esmética (região 2) e uma fase ancorada (região 3).

Note que para todas as densidades de vórtices, não existe diferença entre T_{σ_y} e T_{σ_x} quando $\gamma = 0.866$ e $\gamma = 1$. No primeiro caso, $\gamma = 0.866 = \frac{\sqrt{3}}{2}$ é exatamente a relação entre os principais eixos da célula unitária de uma rede de vórtices triangular. Este fato consegue induzir uma alta estabilidade à rede de vórtices, sobretudo no limite de baixa densidade de vórtices ($H/H_1 \leq 1$). No segundo caso, uma rede de ancoragem quadrada consegue induzir uma rede de vórtices com distâncias x e y entre eles iguais. Desta forma, o sistema derrete isotropicamente.

4.3.2 Configurações e fusão de rede de vórtices em outras simetrias de *pinning*.

Como na seção anterior, várias configurações de rede de vórtices em vários valores de campo aplicado ($N_v = 4$ a $N_v = 64$) foram obtidas, mas agora com estruturas particulares de ancoramento: uma linha isolada ou uma calha, linhas paralelas e linhas perpendiculares de *pinning* em sistemas de dimensão maior $L_x = L_y = 8\lambda$.

O primeiro caso analisado foi a interação entre vórtices e uma linha reta de centros de ancoragem gaussianos no meio da célula de simulação (fig. 4.14). Todas as redes de vórtices obtidas tentam manter-se comensuráveis à linha de defeitos, de modo a minimizar a energia livre do sistema. A orientação da rede de vórtices é, logo, induzida pelo efeito de comensurabilidade entre este e o arranjo de *pinning*.

A orientação da rede de vórtices em relação à linha de defeitos pode ser prevista por um simples argumento geométrico: a rede de vórtices irá casar-se com a estrutura do substrato quando uma determinada direção principal de sua célula unitária estiver mais próxima do valor da separação entre os poços gaussianos. A figura (4.15) demonstra como prever a simetria da rede usando a razão entre a altura h e o parâmetro de rede dos vórtices a_v e o parâmetro de rede da linha de ancoragem a_p .

Estudando o caso particular $N_v = 16$ e $\alpha_p = 360$, tem-se que todos os centros de aprisionamento são ocupados quando $T = 0$. Quando $T \neq 0$ e ainda baixo, todos os vórtices oscilam isotropicamente, caracterizando uma “fase elástica”. Quando a temperatura é acrescida, vórtices que estão nos interstícios oscilam com amplitude maior que os que estão ancorados. Em uma região de temperatura particular, estes mesmos vórtices movem-se de uma maneira anisotrópica induzindo o aparecimento da fase esmética e o primeiro defeito topológico na rede: pares de deslocamentos acoplados. Esta última região de temperatura é caracterizada pelo começo da “fase plástica”. Se a temperatura é um pouco acrescida, estes pares de deslocamentos desacoplam-se com vetores de Burgers paralelos à linha dos defeitos e para temperaturas ainda maiores pares de deslocamentos desacoplados com vetores de Burgers perpendicular aos defeitos podem ser vistos. Depois deste ponto, para