Tesis de licenciatura

Universidad de Buenos Aires

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física "J.J. Giambiagi"

Dinámica anisotropica de vórtices en superconductores con fase nemática

Francisco Castillo Menegotto

Marzo 2025

TEMA

Teorías Fenomenolígicas para Superconductores con Fase Nemática

ALUMNO

Francisco Castillo Menegotto - LU: 634/20 - franciscocm9@hotmail.com.ar

DIRECTOR

Dr. Gustavo Lozano - lozano@df.uba.ar

COLABORADOR

Lic. Ramiro Severino - sramirosebas@gmail.com

LUGAR DE TRABAJO

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

FECHA INICIACIÓN: Julio 2024

FECHA FINALIZACIÓN: Febrero 2025

FECHA DE EXAMEN: Marzo 2025

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor	**Jurado**
Director	**Jurado**
Profesor	**Jurado**

Resumen

En la actualidad, los materiales superconductores se utilizan ampliamente en diferentes aplicaciones y se postulan como clave para novedosos desarrollos, como los qubits en computación cuántica. Sin embargo, mientras que la superconductividad convencional se explica a partir de primeros principios en el marco de la teoría BCS [1], el mecanismo responsable de la superconductividad no convencional aún está en discusión [2]. En este contexto, en 2008 Kamihara *et al.* [3] descubrieron la superconductividad a 26 K en $LaO_{1-x}F_xFeAs$, iniciando la era de los superconductores basados en hierro. Desde entonces, estos han sido ampliamente estudiados, tanto teórica como experimentalmente [4, 5].

Una de las propiedades más notables de estos compuestos es la aparición de anisotropías en las propiedades ópticas y de transporte [6] que teóricamente han sido vinculadas con la existencia de fases nemáticas electrónicas [7]. Esta ruptura espontánea de simetría, i.e., el orden nemático, ha mostrado en varios superconductores de este tipo estar interrelacionado con el orden superconductor [8]. Incluso se ha postulado que este acoplamiento podría estar relacionado con el origen de la superconductividad en estos compuestos [9, 10].

Si bien no existe un consenso sobre el origen microscópico de la nematicidad, es posible abordar el problema desde una perspectiva fenomenológica en el marco del formalismo de Ginzburg-Landau [11]. Para ello, se incorpora en la energía libre un acople entre la nematicidad electrónica, representada por un parámetro de orden tipo Ising, y la superconductividad, caracterizada por un parámetro de orden complejo con simetría *s-wave*. Si bien la teoría es estática por naturaleza, en los años 50 Schmid propuso una extensión dinámica del modelo (TDGL) [12], la cual ha sido empleada exitosamente en múltiples estudios sobre superconductividad para analizar la dinámica de estos sistemas [13, 14, 15].

Una de las principales novedades del método empleado en este trabajo, además de la inclusión de la nematicidad, es la implementación de métodos pseudo-espectrales para la resolución de las ecuaciones diferenciales del formalismo TDGL, las cuales suelen resolverse mediante esquemas de diferencias finitas. Este enfoque presenta la ventaja de garantizar una convergencia exponencial en los cálculos, en contraste con la convergencia algebraica de los métodos de elementos finitos. Además, estos métodos no presentan dispersión ni difusión numérica, lo que los hace especialmente adecuados para problemas donde la precisión es crítica.

El desarrollo de este método se realizó en el marco de la tesis doctoral de Ramiro Severino [16], adaptando técnicas previamente utilizadas en el estudio de la dinámica de condensados de Bose-Einstein. Hasta el momento, ha sido aplicado al análisis de la interacción vórtice-vórtice [17] y vórtice-pared de dominio nemático [18], así como al estudio de la formación y estructura de redes de vórtices en superconductores con orden nemático [16]. Estos resultados han demostrado que, a pesar de la simplicidad del modelo, varios hallazgos experimentales, como el *pinning* y *anti-pinning* de vórtices en paredes de dominio, la elipticidad de los vórtices y las simetrías de las redes de vórtices, pueden ser comprendidos dentro de este marco teórico.

En el presente trabajo, las aplicaciones de este método fueron extendidas al estudio de la dinámica disipativa de vórtices anisotrópicos en el régimen de *flux flow*, que ocurre debido a la presencia de una densidad de corriente externa de transporte en la fase mixta superconductora.

Agradecimientos

Agradezco a Gustavo Lozano por aceptar dirigir mi tesis y guiarme en este camino, por su paciencia y dedicación a enseñarme en esta etapa. A Ramiro Severino, por tomarse el tiempo de orientarme y ayudarme. Sin ellos, este trabajo no habría sido posible.

Al grupo en general, quienes han formado (y seguirán formando) parte de mi día a día durante el último año. A Gabriela Pasquini, quien me recibió en el grupo y me "crió", con su característica buena onda y paciencia. A Victoria Bekeris, por su inagotable carisma y contagiosa positividad.

A la gente del laboratorio de Bajas Temperaturas. A Mariano Marziali, por su disposición y compromiso para ayudarme. A Francisco Benegas, por ser mi mejor compañía en el laboratorio. A los técnicos, Dante y Diego, por su constante asistencia y, por supuesto, por las medialunas de cada tarde. A Carlos Acha, por sus ideas y el material prestado.

A Eduardo Fradkin y Pablo Minnini, por sus valiosos aportes en discusiones y contribuciones a este trabajo.

A la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UBA, por una educación pública, no arancelada y de calidad, por las becas otorgadas, por ser mi segundo hogar. Al Departamento de Física y a todos los docentes que han sido parte de mi formación académica. A la gente encargada de DIRAC, por permitirme utilizar el clúster y brindarme su ayuda. A los miembros del jurado, Alberto Camjayi, Pablo Capuzzi y Fernando Lombardo, por aceptar evaluar esta tesis y tomarse el tiempo de leerla.

A mi familia. A mi hermana, que me trajo de la mano a la facultad el primer día para inscribirme. A mi papá, por criarme, enseñarme, apoyarme y bancarme estos años. A mis abuelos, Renata y Rigoberto.

Tabla de Contenidos

1. Introducción **1**
- 1.1. Bases de la superconductividad . . . 1
  - 1.1.1. Historia de la superconductividad . . . 1
  - 1.1.2. Superconductores basados en hierro . . . 3
  - 1.1.3. Fase nemática electrónica . . . 4
  - 1.1.4. Fenomenología de los superconductores anisótropos . . . 5
- 1.2. Motivación del trabajo . . . 6
  - 1.2.1. Disipación en el estado mixto superconductor . . . 6
  - 1.2.2. Antecedentes . . . 8
- 1.3. Objetivos del trabajo . . . 9

2. Superconductores nemáticos en la formulación de Ginzburg-Landau **10**
- 2.1. Energía libre superconductora . . . 10
  - 2.1.1. Energía libre de Landau . . . 11
  - 2.1.2. Escalas de longitud características . . . 12
- 2.2. Acople nemático-superconductor . . . 13
- 2.3. Adimensionalización y valores de equilibrio . . . 15
- 2.4. Dinámica fuera del equilibrio . . . 16
  - 2.4.1. Dinámica disipativa . . . 16
  - 2.4.2. Ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo . . . 17
- 2.5. Escalas características . . . 18
  - 2.5.1. Relación entre constantes difusivas . . . 18
  - 2.5.2. Longitud de penetración eléctrica . . . 19
  - 2.5.3. Tiempo de relajación . . . 19

3. Método numérico **21**
- 3.1. Métodos Pseudo-espectrales . . . 22
- 3.2. Adaptación de GHOST a superconductividad . . . 22
  - 3.2.1. Ecuaciones y parámetros . . . 24
  - 3.2.2. Condición de Courant-Friedrich-Lewy . . . 25
  - 3.2.3. Condiciones periódicas de contorno . . . 25
  - 3.2.4. Adimensionalización de resultados . . . 27
- 3.3. Parámetros de la simulación . . . 29
- 3.4. Clúster de cómputo . . . 30

4. Implementación del método **31**
- 4.1. Trampa de potencial . . . 31
  - 4.1.1. Inclusión en la energía libre . . . 31
  - 4.1.2. Funciones trampa . . . 32
- 4.2. Campo magnético externo . . . 33
- 4.3. Corriente externa . . . 34

4.3.1. Inclusión en la dinámica . . . 34
4.3.2. Características de la densidad de corriente . . . 34
4.4. Condiciones iniciales . . . 35

5. Resistividad del flujo de vórtices en superconductores nemáticos **37**
5.1. Modelos teóricos . . . 37
5.1.1. Incorporación de la nematicidad . . . 38
5.2. Construcción del estado de partida . . . 41
5.3. Dinámica del vórtice y cálculo del coeficiente de arrastre . . . 42
5.4. Resultados numéricos de la viscosidad de flux flow . . . 44
5.5. Discusión . . . 46

6. Conclusiones y perspectiva a futuro **48**

A. Unidades y escalas **50**
A.1. Sistema Gaussiano-cgs . . . 50
A.2. Escalas del programa . . . 52

B. Soluciones compatibles del potencial vector **53**

C. Trampa hiperbólica **54**

D. Campos críticos **56**

E. Ajuste del vórtice elíptico **57**

Capítulo 1

Introducción

The experiment left no doubt that, as far as accuracy of measurement went, the resistance disappeared. At the same time, however, something unexpected occurred. The disappearance did not take place gradually but abruptly. From 1/500 the resistance at 4.2 K, it could be established that the resistance had become less than a thousand-millionth part of that at normal temperature. Thus the mercury at 4.2 K has entered a new state, which, owing to its particular electrical properties, can be called the state of superconductivity.

— Heike Kamerlingh Onnes

1.1. Bases de la superconductividad

1.1.1. Historia de la superconductividad

La superconductividad fue descubierta en 1911 por Heike Kamerlingh Onnes mientras estudiaba el comportamiento de la resistencia eléctrica en materiales a temperaturas extremadamente bajas [19]. Antes de dicho descubrimiento, era bien sabido que enfriar un metal aumentaba su conductividad debido a las interacciones electrón-fonón. Sin embargo, quedaban dudas sobre lo que sucedía a bajas temperaturas cercanas al cero absoluto. Onnes y sus colaboradores resolvieron esta cuestión al enfriar mercurio por debajo de 4.2 K, observando que su resistencia desaparecía abruptamente, un fenómeno completamente inesperado en ese momento. Esta propiedad de resistencia nula, que surge por debajo de cierta temperatura crítica T_c, marcó la primera característica fundamental utilizada para describir la superconductividad.

Durante las siguientes décadas, el estudio de la superconductividad reveló nuevas propiedades sorprendentes, como el efecto Meissner, descubierto en 1933 por Walter Meissner y Robert Ochsenfeld [20]. Este efecto mostró que los superconductores también expulsan los campos magnéticos de su interior (diamagnéticos perfectos), lo que los diferencia de ser simples conductores perfectos.

En un intento por describir teóricamente el fenómeno, los hermanos Fritz y Heinz London desarrollaron en 1935 un conjunto de ecuaciones que explicaban el comportamiento electromagnético de los superconductores [21]. Posteriormente, en 1950 Vitaly Lazarevich Ginzburg y Lev Landau propusieron una nueva teoría fenomenológica basados en la teoría de London para fenómenos críticos, particularmente aplicable a la aparición de superconductividad, que para ese entonces

ya era considerada una transición de fase termodinámica [22]. Más tarde esta resultaría ser una de las teorías predictivas más poderosas de la física. Dicho modelo consiste en tratar al potencial termodinámico adecuado como una funcional de un parámetro de orden, campo que cumpla con anularse únicamente en la fase de alta temperatura o *desordenada*. El valor que toma este parámetro se corresponde con aquel que extrema la funcional, usualmente expandida en potencias para temperaturas cercanas a la de transición [15].

Durante la década de 1950, Alexei Abrikósov, estudiante de Lev Landáu, realizó uno de los descubrimientos más importantes en el campo de la superconductividad. Al estudiar las ecuaciones de Ginzburg-Landáu en el régimen donde la profundidad de penetración del campo magnético λ_L es mayor que la longitud de coherencia ξ, observó la existencia de un estado intermedio en el que dominios superconductores y normales pueden coexistir [23]. Posteriormente, Abrikósov descubrió que el estado normal penetra en el superconductor en forma de líneas de flujo magnético cuantizado, Φ_0, las cuales se repelen entre sí y se disponen en una configuración triangular conocida como la red de Abrikósov (Fig. 1.1). Alrededor de estas regiones normales, en el superconductor se generan corrientes persistentes que apantallan el campo magnético en su interior. La estructura de estas corrientes es lo que da origen al término "vórtices superconductores".

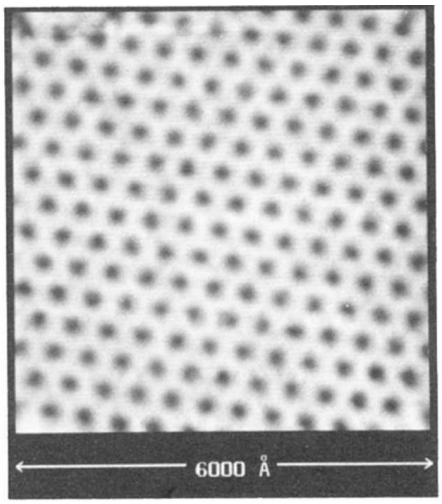

Figura 1.1: *Imagen de microscopía de túnel a 4.2 K mostrando la red de vórtices de Abrikosov en $NbSe_2$. La disposición hexagonal de los vórtices es claramente visible, con regiones oscuras correspondientes a los núcleos de los vórtices, donde la densidad de estados superconductora se suprime. Ref.* [24].

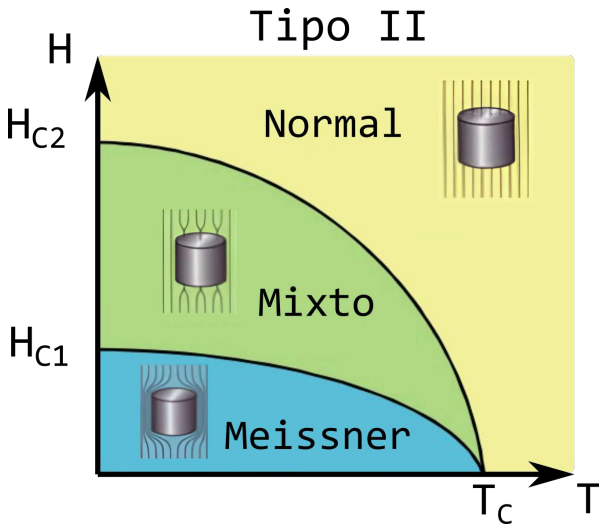

Figura 1.2: *Diagrama de fases típico de un superconductor tipo II en función del campo magnético y la temperatura.*

Este descubrimiento llevó a la clasificación de los superconductores en: tipo I y tipo II. En los primeros, el campo magnético es completamente expulsado hasta alcanzar un valor crítico H_c. En los tipo II, en cambio, la transición es más compleja (Fig. 1.2). Para campos magnéticos menores que un valor crítico inferior H_{c1}, el material se comporta como un superconductor tipo I, expulsando completamente el campo. Sin embargo, cuando el campo supera H_{c1}, este comienza a penetrar en forma de vórtices. En este estado mixto, la dinámica de los vórtices es crucial, ya que su movimiento puede generar disipación. Finalmente, al alcanzar un campo crítico superior H_{c2}, la superconductividad se suprime por completo, y el material entra en un estado completamente normal.

Sin embargo, el verdadero avance en la comprensión fundamental llegó en 1957 con la teoría BCS, propuesta por John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer [1]. Esta teoría permitió vincular el parámetro de orden asociado a la transición superconductora, con la densidad de pares de *Cooper* que condensan en un mismo estado fundamental. Esta teoría describe la superconductividad como un mar coherente de pares de Cooper que se desplazaban colectivamente y sin perturbaciones a través de la red cristalina. Éstos pares respetan la estadística de Bose-Einstein y se componen de un estado ligado de dos electrones interactuantes vía un potencial atractivo efectivo mediado por fonones de la red cristalina subyacente. La teoría explicó con éxito la superconductividad en todos los materiales descubiertos hasta entonces, procurando ser una teoría general hasta el descubrimiento de los superconductores de alta temperatura crítica (o *HighTc's*) en 1986. Éstos son un ejemplo de materiales con fuertes correlaciones en los que el mecanismo de formación de pares de Cooper no ocurre debido a una interacción electrón-fonón convencional, y aún no se ha esclarecido el mecanismo [25]. El posterior descubrimiento de otros grupos variados de compuestos (representados parcialmente el la Fig. 1.3) que tampoco se amoldan a la teoría BCS fomentó aún más la búsqueda de una teoría general. De estos en particular se destacan los superconductores basados en hierro, cuya particular fenomenología motiva el interés del presente trabajo.

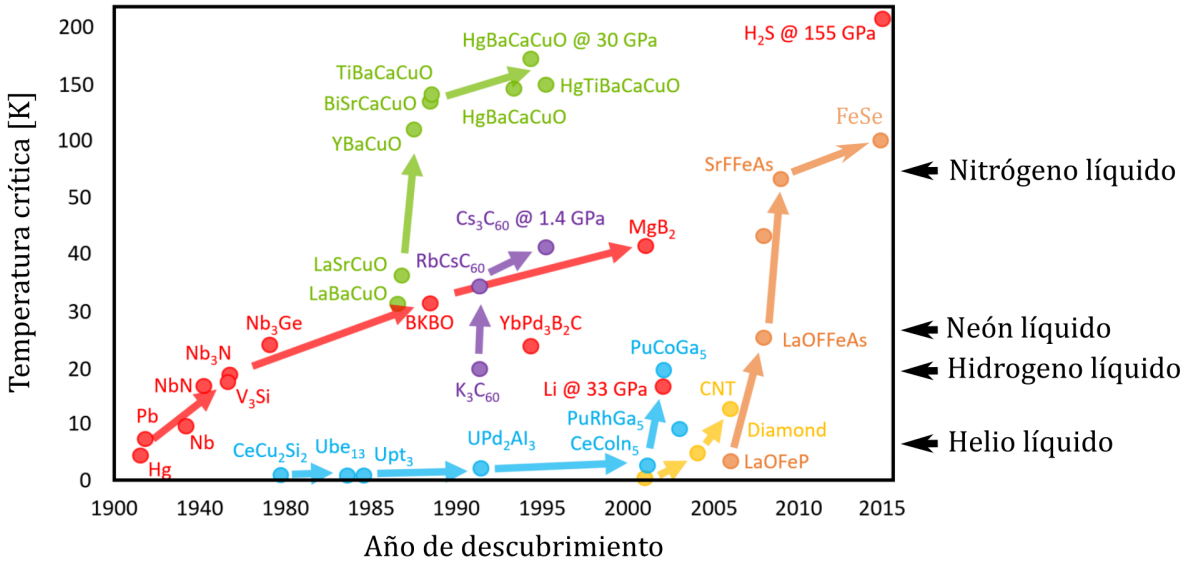

Figura 1.3: *Evolución de la temperatura de transición superconductora T_c en las últimas décadas. Se muestra una variedad de superconductores. En rojo los superconductores convencionales, en verde los basados en cobre, en naranja los basados en hierro, en celeste los heavy-fermion, en amarillo los basados en carbono, y en violeta los basados en fullerenos. Gráfico adaptado de la Ref.* [26].

1.1.2. Superconductores basados en hierro

Los superconductores basados en hierro (FeSCs) fueron descubiertos en 2008 por Kamihara *et al.* [3] al encontrar superconductividad en LaFeAsO dopado con flúor. Este hallazgo despertó gran interés en la comunidad, ya que hasta el momento se suponía que el hierro era tan tóxico para la superconductividad como lo era el arsénico para los humanos. Al momento de su descubrimiento,

la temperatura de transición superconductora T_c había alcanzado tan sólo 26 K, sin embargo, la aplicación de altas presiones rápidamente elevó este valor a temperaturas de hasta 56 K [27, 28].

Desde entonces, se han identificado varias familias FeSCs [4, 29]. De entre todas ellas, el FeSe destaca por su estructura simple y su fuerte anisotropía. Si bien la T_c del FeSe es relativamente modesta (solo 8 K en su fase volumétrica), en forma de monocapa llegó a reclamar el récord de todos los superconductores basados en hierro con una T_c superior a 65 K [30]. Hasta la fecha, solo los cupratos poseen una transición más alta a presión ambiente.

Durante este período, se ha reconocido el rol fundamental que interpretan las correlaciones electrónicas en estos sistemas, lo que ha enriquecido enormemente el campo. Los FeSC proporcionan un entorno que, si bien supone un reto, permite una comprensión más profunda de temas tan diversos como la nematicidad electrónica (es decir, el orden de orientación), la criticidad cuántica, las correlaciones selectivas de orbitales y la superconductividad topológica. Por lo tanto, aunque los FeSC todavía están en su adolescencia, la madurez del campo es tal que ya están proporcionando conocimientos profundos sobre la física de la superconductividad no convencional, física que bien puede estar desempeñando un papel clave en otros superconductores emergentes.

1.1.3. Fase nemática electrónica

Los electrones correlacionados pueden exhibir una gran variedad de fases complejas, dentro de las cuales se destaca la fase nemática, una fase metálica con invarianza traslacional y anisotropía espacial espontánea, que se observa en otros sistemas a nivel clásico, como en líquidos conformados por moléculas alargadas. El orden nemático en un sólido cristalino implica una ruptura espontánea de la simetría subyacente, favoreciendo la orientación en un eje cristalino particular. Cuánticamente, el fluido de electrones se dice nemático cuando espontáneamente rompe una simetría del Hamiltoniano subyacente que intercambia dos ejes del sistema. En el caso de sólidos cristalinos, la nematicidad electrónica tiende a romper simetrías C_4 en simetrías C_2. La fase nemática en estos sistemas es así descrita por un parámetro de orden real tipo Ising, a diferencia de la situación en líquidos donde el parámetro de orden es un tensor.

Las propiedades de la fase nemática en sistemas electrónicos han sido producto de una extensa investigación desde su original propuesta teórica [8]. En particular, una fase anisotrópica se ha reportado tanto en cupratos como en superconductores basados en hierro (FeSC) [31, 32], ambos de alta temperatura crítica que exhiben una ruptura espontánea de la simetría C_4, tanto en lo estructural como en las propiedades de transporte, comandada principalmente por grados de libertad electrónicos.

A primera vista, dicha transición estructural podría ser confundida como una de las tantas que son conducidas por vibraciones elásticas de la red. Sin embargo, hay estudios tanto teóricos [33, 34] como experimentales [35, 36] que señalan que este cambio de fase es producto de una inestabilidad electrónica, ya sea involucrando ordenamiento orbital o de espín. Lo que complica la cuestión es que la generación espontánea de cualquiera de estos tres ordenamientos (estructural, orbital y de espín) ocasionaría la de los otros dos como consecuencia de la simetría destruída. No resulta trivial distinguir qué grado de libertad condujo la transición, ya que el acople entre los parámetros de orden ocasiona que los tres adopten valores no nulos por debajo de la misma temperatura T_S. Aún así, se ha observado que la anisotropía en el transporte es demasiado alta como para ser adjudicable a la correspondiente distorsión estructural [6].

De entre todos los materiales superconductores que presentan esta fase, las familias BaFeCoAs y FeSe han sido de las más estudiadas [35]. Estos compuesto presentan una transición de fase estructural tetragonal a ortorrómbica a una temperatura T_S, en donde los ejes ortorrómbicos se encuentran a 45° respecto de los ejes tetragonales, y se rompe la simetría C_4. En la Fig. 1.4 se muestra el diagrama de fases del $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ y una representación esquemática de la distorsión estructural producida en T_S. En ausencia de campos externos que privilegien alguna dirección, la celda tetragonal puede distorsionarse indistintamente de dos formas equivalentes. Esto causa que al ocurrir la transición estructural en monocristales, naturalmente se formen dominios alternando los ejes. La zona de transición entre dos dominios adyacentes es lo que se denomina una pared de dominio o *Domain Boundary* (DB). La presencia de DBs afecta dramáticamente la física de vórtices, proveyendo una manera de reconocer la presencia de dominios nemáticos a partir del estudio de la resistividad en el estado mixto superconductor [37, 38].

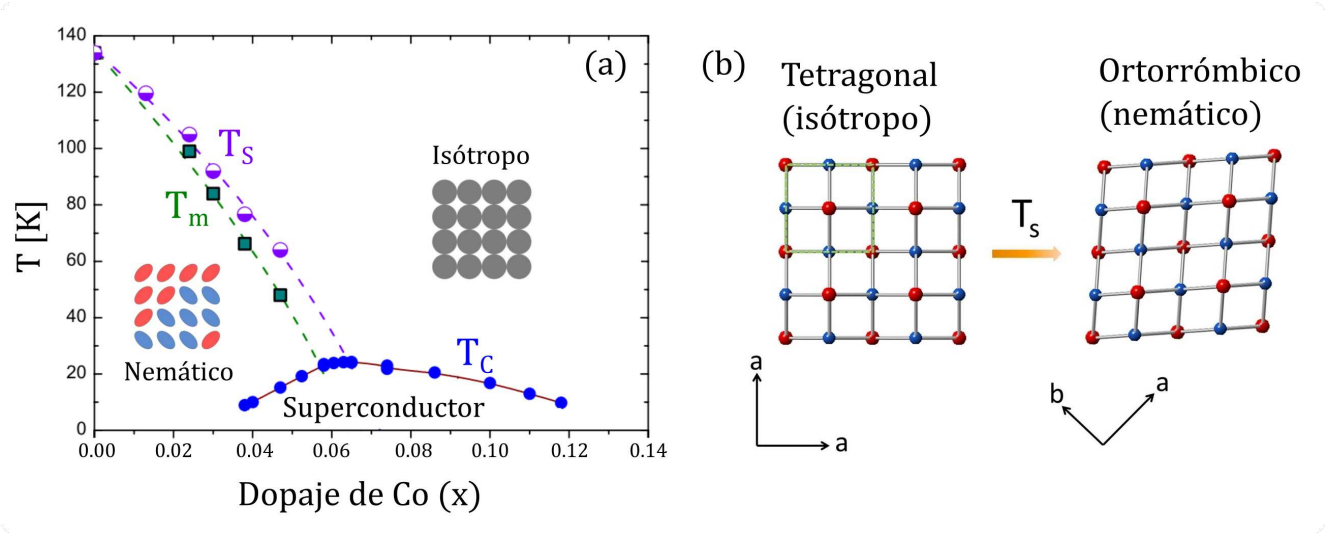

Figura 1.4: *(a) Diagrama de fases de la familia $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ [39]. Las transiciones marcadas son: magnética (T_m), estructural (T_S) y superconductora (T_c). (b) Representación esquemática de la distorsión de los planos ab luego de una transición estructural [35].*

1.1.4. Fenomenología de los superconductores anisótropos

Las propiedades de los superconductores de tipo II están principalmente determinadas por la dinámica y configuraciones del sistema de vórtices. De mediar un acople entre el orden nemático y el superconductor, tanto la morfología de los vórtices superconductores en el estado mixto (ver Fig. 1.5), como su dinámica e interacción con las paredes de dominio nemáticas deberían verse reflejadas, entre otras cosas, en anisotropías en la magnetorresistencia del estado mixto superconductor.

Numerosos experimentos de gran impacto han mostrado evidencia de nematicidad en varias familias de superconductores basados en hierro (FeSC) [32, 40, 41]. Varios trabajos han estudiado este acople a partir de observaciones experimentales directas de vórtices superconductores, en las que se observa un cambio en su anisotropía y una interacción en algunos casos repulsiva y en otras atractiva con las paredes de dominio nemáticas [42, 43, 44]. En algunos compuestos (por ejemplo, los de la familia de $BaFe_2As_2$ dopados con Co) hay evidencia de que la superconductividad y la

nematicidad podrían competir entre sí, mientras que en otros (como los de la familia FeSe) hay evidencia de que el acople nemático superconductor podría ser cooperativo. Sin embargo, hasta el momento no hay un modelo teórico microscópico que describa esta interacción. Mediciones indirectas pueden hacerse a través de experimentos de transporte, ya que la disipación en la fase superconductora está asociada directamente al movimiento de los vórtices.

Hasta la fecha, la anisotropía reflejada en la estructura de los vórtices solo se ha observado claramente en FeSe vía microscopía y espectroscopia de efecto túnel de barrido a bajas temperaturas (Fig. 1.5). En estas mediciones [42] se observa un vórtice elíptico, cuya elipticidad depende del campo magnético aplicado, alineado en la dirección de la distorsión estructural. Como dato para posterior referencia, la relación de aspecto del vórtice presentado en la Fig. 1.5, es de $a_R \simeq 1.7$.

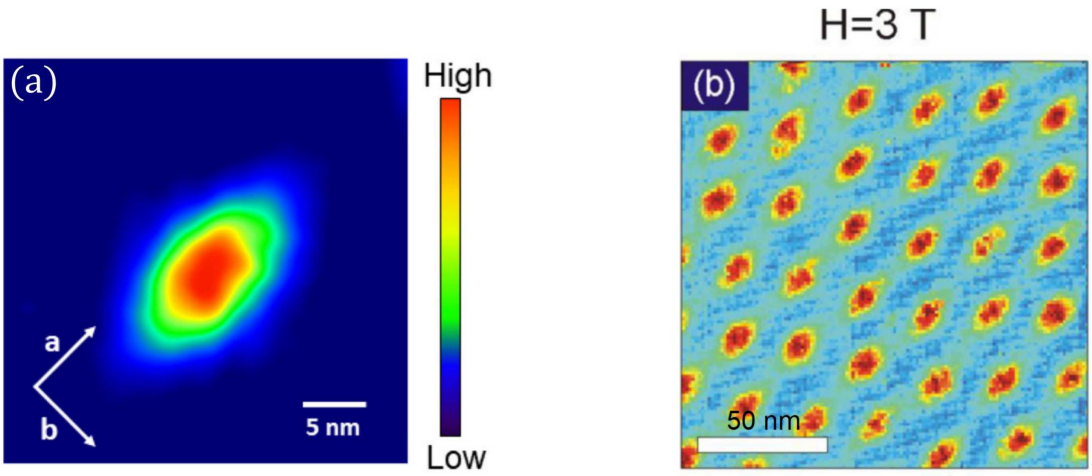

Figura 1.5: (*a*) *Mapa de conductancia diferencial a* $E = E_F$ *y* $H = 1.5$ *T. En él se revela la elipticidad de los vórtices en monocristales de FeSe, producto de la anisotropía en la fase nemática electrónica. Los ejes cristalográficos a y b se presentan a 45° de la capa superior de Se, representando las direcciones subyacentes Fe-Fe.* (*b*) *Mapa bidimensional de la conductancia a voltaje cero* (*ZBC*) *para un campo magnético externo de 3 T. La espectroscopía de túnel fue realizada a 1.5 K. La red de vórtices elípticos resultante puede describirse como una superposición de redes hexagonales distorsionadas y cuadradas locales. Imágenes extraídas de la Ref.* [42].

1.2. Motivación del trabajo

1.2.1. Disipación en el estado mixto superconductor

En la fase superconductora mixta, la resistividad eléctrica surge del movimiento disipativo de vórtices que, debido a la presencia de una densidad de corriente promedio $\vec{J}$ localizada en el *core* del vórtice en cuestión, experimentan una fuerza tipo-Lorentz por unidad de longitud (para un vórtice aislado) [45, 46]

$$\vec{f} = \vec{J} \times \frac{\vec{\Phi}_0}{c} \tag{1.1}$$

donde $\Phi_0 = hc/e$ es el cuanto de flujo magnético (en unidades cgs-gaussianas). Debido a esta fuerza, las líneas de flujo tienden a moverse transversalmente a la densidad de corriente. Si se mueven, por ejemplo, con velocidad $\vec{V}_L$, inducen esencialmente un campo eléctrico de magnitud

$$\vec{E} = \vec{B} \times \frac{\vec{V}_L}{c} \tag{1.2}$$

que resulta paralelo a $\vec{J}$. Esto actúa como un voltaje resistivo, lo que resulta en disipación de potencia. De este modo, un superconductor de tipo II mostrará resistencia y no podrá sostener una corriente persistente a menos que exista algún mecanismo que impida que la fuerza de Lorentz mueva los vórtices. Este mecanismo se denomina anclaje (*pinning* en inglés), ya que "fija" a los vórtices en el material, y se da por defectos, impurezas, planos de macla, entre otros. Si el anclaje es débil en comparación con la fuerza motriz, los vórtices se desplazan de manera relativamente uniforme, con una velocidad terminal dada por el arrastre viscoso. Este régimen se conoce como *flux flow* y generalmente da lugar una resistividad de flujo ρ_f, que es comparable a ρ_n, la resistividad del material en el estado normal.

En la situación ideal considerada en este trabajo, no hay efectos de *pinning* y el movimiento de los vórtices es frenado únicamente por el amortiguamiento viscoso. Dando lugar a un régimen de *flux flow* puro. En este caso podemos establecer una fenomenología simple asumiendo un coeficiente de arrastre viscoso ν, de modo que la fuerza viscosa por unidad de longitud de una línea de vórtice que se mueve con velocidad $\vec{V}_L$ es

$$\vec{f} = -\nu \vec{V}_L \tag{1.3}$$

Igualando esta fuerza a la fuerza motriz (Ec. 1.1), obtenemos la relación entre las magnitudes

$$J \frac{\Phi_0}{c} = \nu V_L \tag{1.4}$$

Combinando esto con la Ec. 1.2, encontramos que los campos están relacionados por

$$\rho_f = \frac{E}{J} = \frac{\Phi_0 B}{c^2 \nu}, \tag{1.5}$$

para una inducción magnética promedio B. Por lo tanto, en la medida en que ν sea independiente de B, ρ_f debería ser proporcional a B.

Este análisis reduce el problema a encontrar ν, que puede expresarse en términos energéticos al notar que la tasa de disipación de energía por unidad de longitud del vórtice es

$$W = -\vec{f} \cdot \vec{V}_L = \nu V_L^2 \tag{1.6}$$

En el modelo estándar más simple de la dinámica de vórtices, desarrollado por Bardeen y Stephen (BS) [47], un vórtice se trata como un núcleo normal (metálico) con una sección transversal circular de radio igual a la longitud de coherencia ξ, y de resistividad ρ_n (la misma que en el estado normal del superconductor). En este modelo además se supone que la disipación ocurre

únicamente mediante procesos resistivos ordinarios (efecto Joule) en el núcleo. Sin embargo, en la realidad existen otros mecanismos de disipación, producto de modos de excitación adicionales, entre otros. De esta forma, en su forma más simple, el coeficiente de viscosidad de Bardeen-Stephen (BS) está dado por

$$\nu_{BS} = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\xi^2 c^2 \rho_n} \tag{1.7}$$

Desde su formulación original, este problema ha sido revisitado por numerosos autores. Su interés reside principalmente en que la disipación de los vórtices resulta fundamental en la modelización de la dinámica de vórtices como un sistema dinámico de partículas en interacción, sometidas a arrastre viscoso, además de las fuerzas derivadas de las interacciones vórtice-vórtice y de la interacción con el desorden congelado (*quenched disorder*), asociado con la distribución de defectos (o centros de *pinning*). El enfoque simple de BS ha demostrado ser útil para explicar los distintos regímenes dinámicos de la materia de vórtices, como las transiciones de *depinning* en DC y AC [48], así como la existencia de fases vítreas (*glassy phases*). Además, se ha aplicado tanto a superconductores convencionales como no convencionales [49].

En 1991, Hao y Clem [50] extendieron el modelo de Bardeen-Stephen para describir la fenomenología de superconductores anisotrópicos, incorporando anisotropía tanto en la conductividad del estado normal como en la rigidez superconductora. Sin embargo, este enfoque analítico no considera ningún acoplamiento entre estas anisotropías.

1.2.2. Antecedentes

El proyecto general en el que se enmarca este trabajo propone investigar la interrelación entre el orden nemático y el superconductor, centrándose especialmente en la dinámica y estructura de vórtices y paredes de dominio nemáticas en superconductores no convencionales, en los que ambos órdenes se proponen acoplados. El proyecto abarca tanto estudios teóricos [16, 17, 18], como experimentales [51, 38, 37].

A pesar de que no existe consenso sobre el origen microscópico de la nematicidad, es posible describirla fenomenológicamente a través de un parámetro de orden en el ámbito de una teoría del tipo Ginzburg-Landau (GL)[52]. En este contexto, nos embarcamos a la exploración de la influencia de la nematicidad en las propiedades del superconductor. En particular, aplicamos una extensión dinámica del modelo GL, el modelo de GL dependiente del tiempo (TDGL), que fue originalmente propuesto en los años 60' para superconductores convencionales [12]. El análisis involucra la resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales, lo que requiere la aplicación de técnicas numéricas para su resolución directa sin ningún tipo de aproximación adicional.

En nuestro grupo ya se ha desarrollado un método de vanguardia en el ámbito de la superconductividad a través de la aplicación de métodos pseudo-espectrales para la resolución de las ecuaciones de TDGL. La implementación de este método es, hasta donde sabemos, una novedad técnica en la temática y presenta una serie de ventajas muy provechosas frente a los tradicionales métodos de elementos finitos. En primera instancia, en el marco de la tesis doctoral de Ramiro Severino [16], se ha puesto a punto y testeado el método reobteniendo resultados conocidos

en la temática (como el límite entre la superconductividad de tipo I y II y cálculos de energía comparados contra resultados obtenidos mediante métodos variacionales). Luego, se comenzó a estudiar cómo la nematicidad afecta la interacción vórtice-vórtice en la fase superconductora, ya que es un aspecto físico fundamental que determina el límite entre los tipos de superconductividad [17]. Se han además aplicado estas técnicas para el estudio de la interacción entre las paredes de dominio nemático y los vórtices [18]. Finalmente, también se han empleado para estudiar la formación y estructura de redes de vórtices elípticos, y como estas depende del campo magnético aplicado [16].

1.3. Objetivos del trabajo

El objetivo principal de este trabajo consiste en abordar el problema de la disipación producida por movimiento de vórtices en el régimen de *flux flow*, en un superconductor con fase nemática, a partir de emplear los métodos computacionales desarrollados en el grupo (Sec. 1.2.2). Analizando la anisotropía del flujo de vórtices en superconductores nemáticos, dentro de la formulación de Ginzburg Landau dependiente del tiempo. Estudiando además como influyen en esta los diferentes tipos de acople entre el orden nemático y el orden superconductor, presentes en la teoría propuesta.

Para esto, el trabajo se organiza como se detalla a continuación:

- En el Capítulo 2 se describe el modelo simple de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo (TDGL) para un superconductor anisotrópico, describiendo sus ecuaciones fundamentales y sus principales supuestos.
- En el Capítulo 3 introduciremos brevemente los método pseudo-espectrales sobre los cuales se basan las simulaciones realizadas, así como sus inconvenientes y ventajas frente a otros métodos de elementos finitos.
- En el Capítulo 4 se proponen los mecanismos que permiten simular diferentes condiciones de contorno dentro del método empleado, así como interfaces S-N (superconductor-normal), imposición de campos magnéticos externos, y aplicación de corrientes externas de transporte.
- En el Capítulo 5 describimos cómo este método puede adaptarse para el cálculo del coeficiente de viscosidad, proporcionando una explicación detallada de nuestra metodología y presentando los principales resultados de nuestras simulaciones numéricas.
- Por último, en el Capítulo 6 se discutirán las conclusiones finales del trabajo, así como perspectivas y proyectos a futuro.

Capítulo 2

Superconductores nemáticos en la formulación de Ginzburg-Landau

La teoría de Ginzburg-Landau (GL) fue propuesta en 1950 por V.L. Ginzburg y L.D. Landau [22] como un enfoque alternativo para describir el comportamiento macroscópico de los superconductores. Esta teoría introduce un parámetro de orden que representa la densidad local de pares de Cooper, los portadores de la superconductividad, y se emplea para determinar cuán profundo se encuentra un sistema en su fase superconductora. Este parámetro de orden, de valor complejo ψ, describe la transición desde un estado normal, donde es cero, hasta un estado superconductor de orden superior, donde adquiere un valor finito. La teoría de GL se basa en la teoría de transiciones de fase de segundo orden previamente establecida por Landau [53], la cual postula que una transición de segundo orden ocurre cuando el estado de un sistema cambia de manera continua, mientras que su simetría se modifica de forma discontinua a la temperatura de transición.

Dado que la teoría se deriva de una expansión de la energía libre en las cercanías de la transición de fase de segundo orden, su validez estricta se limita a las proximidades de la temperatura crítica T_c (y a variaciones espaciales del parámetro de orden ψ y del potencial vector A que no sean demasiado rápidas). Sin embargo, puede utilizarse en un rango más amplio para descripciones cualitativas. Por estas razones, la teoría de Ginzburg-Landau sigue siendo una de las herramientas más poderosas en el estudio macroscópico de la superconductividad, donde la energía libre total es relevante en lugar del espectro detallado de excitaciones. Por lo tanto, resulta altamente confiable para predecir los campos críticos y la estructura espacial de $\psi(\vec{r})$ en situaciones no uniformes. Además, proporciona el marco cualitativo para comprender el comportamiento de la supercorriente como una manifestación de propiedades cuánticas a escala macroscópica.

2.1. Energía libre superconductora

El postulado básico de la teoría de Ginzburg-Landau establece que, si ψ es pequeño y varía lentamente en el espacio, la energía libre (con respecto al estado normal a campo nulo) puede expandirse en una serie de la forma

$$F_S = \int dV \left[\alpha_{GL}|\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2}|\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m}|\vec{\boldsymbol{D}}\psi|^2 + \frac{1}{8\pi}|\nabla \times \vec{\boldsymbol{A}}|^2 \right] \tag{2.1}$$

donde ψ es el parámetro de orden superconductor complejo, relacionado con la densidad de pares de Cooper n_s a través de $|\psi|^2 = n_s$, $\vec{\boldsymbol{A}}$ es el potencial vector, relacionado con la inducción magnética mediante $\nabla \times \vec{\boldsymbol{A}} = \vec{\boldsymbol{B}}$, y $\vec{\boldsymbol{D}} = -i\nabla - \frac{e}{\hbar c}\vec{\boldsymbol{A}}$ es la derivada covariante. Los campos tienen unidades dadas por

$$[\psi] = \frac{1}{[L]^{3/2}}, \quad [A] = \frac{[L]^{1/2}[M]^{1/2}}{[T]}$$

donde $[L]$, $[M]$ y $[T]$ representan, respectivamente, las unidades de longitud, masa, y tiempo (para más detalles sobre sistema de unidades, revisar el Apéndice A.1). En esta formulación, los parámetros α_{GL} y β_{GL} dependen de la temperatura, más específicamente,

$$\alpha_{GL} = \alpha_0(T - T_c). \tag{2.2}$$

No obstante, la temperatura T solo aparecerá de forma implícita a través de los valores de los parámetros, no será tratada como una variable dinámica ni se considerarán fenómenos como fluctuaciones térmicas. En la Ec. 2.1, m es un parámetro con dimensiones de masa, pero que no está directamente vinculado a la masa de ninguna partícula en particular y puede relacionarse con la rigidez de fase del parámetro de orden. La carga de los pares de Cooper (el doble de la carga del electrón) se denotará como e (< 0), mientras que $\hbar$ y c representan la constante de Planck reducida y la velocidad de la luz, respectivamente.

2.1.1. Energía libre de Landau

En ausencia de campos y gradientes, tenemos para la densidad de energía

$$f_S = \alpha_{GL}|\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2}|\psi|^4 \tag{2.3}$$

lo que puede interpretarse como una expansión en serie en potencias de ψ o n_s, en la cual solo se retienen los dos primeros términos pares (debido a la simetría bajo inversión de ψ). Estos dos términos deberían ser adecuados siempre que se permanezca cerca de la transición de fase de segundo orden en T_c, donde el parámetro de orden $|\psi|^2 \to 0$. El análisis de la Ec. 2.3 muestra que β_{GL} debe ser positiva para que la teoría sea útil; de lo contrario, el mínimo de energía ocurriría para valores arbitrariamente grandes de $|\psi|^2$, donde la expansión seguramente sería inadecuada. Como se ilustra en la Fig. 2.1, cuando $\beta_{GL} > 0$, surgen dos casos dependiendo del signo de α_{GL}. Si α_{GL} es positiva, la energía libre mínima ocurre en $|\psi|^2 = 0$, lo que corresponde al estado normal. Por otro lado, si $\alpha_{GL} < 0$, el mínimo ocurre cuando

$$|\psi|^2_\infty = -\frac{\alpha_{GL}}{\beta_{GL}}. \tag{2.4}$$

Al sustituir este valor de $|\psi|^2$ en la Ec. 2.3, se obtiene

$$f_S = -\frac{\alpha_{GL}^2}{2\beta_{GL}} = -\frac{H_c^2}{8\pi} \tag{2.5}$$

donde se usó la definición del campo crítico termodinámico (el campo magnético al cual se destruye la superconductividad tipo I). De aquí sale entonces,

$$H_c^2 = \frac{4\pi\alpha_{GL}^2}{\beta_{GL}} \tag{2.6}$$

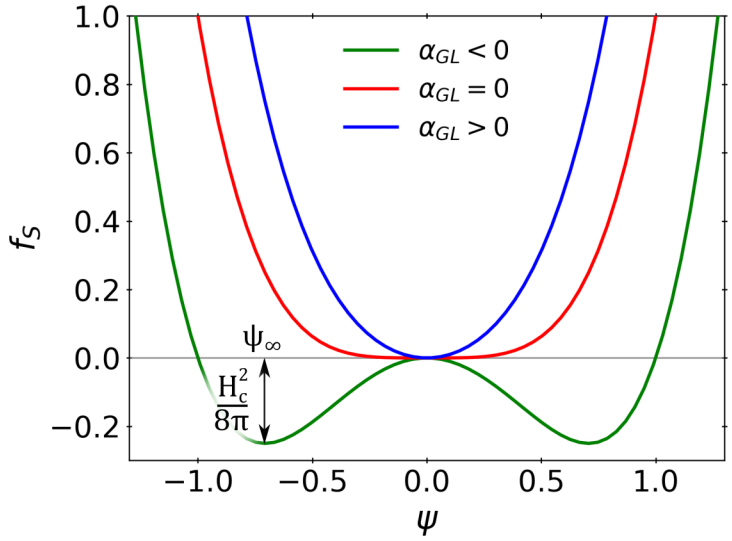

Figura 2.1: *Diferencia en densidad de energía libre entre el estado normal y el superconductor para valores de* $\alpha_{GL} = -1, 0, 1$ *y* $\beta_{GL} = 1$.

A partir de estos resultados, se vuelve evidente que la transición normal-superconductor tiene lugar cuando α_{GL} cambia de un valor positivo a uno negativo, lo que sucede a la temperatura de transición T_c (ver Ec. 2.2).

2.1.2. Escalas de longitud características

La teoría de Ginzburg-Landau predice la existencia de dos escalas de longitud características: la longitud de coherencia, $\xi(T)$ y la longitud de penetración $\lambda_L(T)$. Ambas cantidades cuantifican propiedades fundamentales de los superconductores, la primera de ellas

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|}, \tag{2.7}$$

describe la escala sobre la cual el parámetro de orden puede variar sin incurrir en un aumento excesivo de energía. Por otro lado, la profundidad de penetración,

$$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2\rho_0}, \tag{2.8}$$

caracteriza la distancia a la que un campo magnético externo puede ingresar en un superconductor (aquí $\rho_0 = |\alpha_{GL}|/\beta_{GL}$, con $[\rho_0] = [L]^{-3}$). En la Fig. 2.2, se representan estas escalas en la estructura usual de un vórtice. El parámetro de Ginzburg-Landau, κ, se define como el cociente entre estas dos cantidades,

$$\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}. \tag{2.9}$$

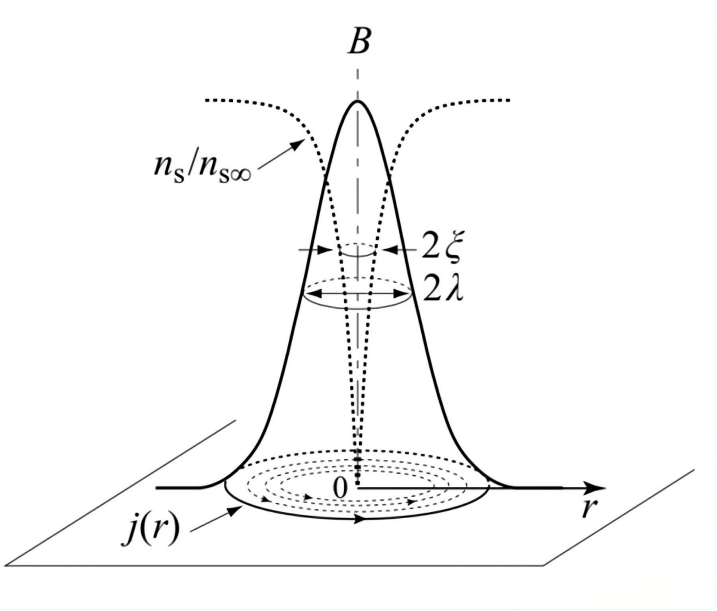

Figura 2.2: *Esquema de un vórtice superconductor que muestra la densidad de portadores $n_s = |\psi|^2$ (línea punteada), normalizada por su valor de vació $n_\infty = |\psi|^2_\infty$, y la inducción magnética B (línea sólida). Se identifican la longitud de coherencia superconductora ξ y la profundidad de penetración del campo magnético λ_L. El parámetro de orden se anula en la región donde el campo magnético alcanza su valor máximo. Además, se representan las corrientes asociadas al vórtice.*

El valor crítico particular $\kappa_c = 1/\sqrt{2}$, comúnmente conocido como *self dual point*, marca la frontera entre la superconductividad Tipo I y Tipo II en el marco de esta teoría.

Estas magnitudes características determinan, entre otras cosas, el campo crítico superior H_{c2}, dado por [46]

$$H_{c2} = \sqrt{2}\kappa H_c \tag{2.10}$$

o, equivalentemente

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} \tag{2.11}$$

donde $\Phi_0 = hc/e$.

2.2. Acople nemático-superconductor

Para dar cuenta de la fase nemática en los superconductores basados en Fe, es necesario incluir un parámetro de orden adicional en la energía libre. Debido a la presencia de estructuras cristalográficas tetragonales y ortorrómbicas en estos materiales, tomaremos el parámetro de orden nemático como un campo real η, con la propiedad de simetría $\eta \to -\eta$ bajo una rotación de 90 grados de la estructura cristalográfica (es común referirse a este tipo de nematicidad como

Ising-nematic). Esto contrasta, por ejemplo, con el parámetro de orden en los líquidos nemáticos, que involucra una rotación continua (y por lo tanto se describe mediante un tensor).

Incluyendo esta descripción fenomenológica, la energía libre de Helmholtz pueden escribirse como

$$F = F_S + F_N + F_{SN} \tag{2.12}$$

donde F_S es la energía estándar para un superconductor con un parámetro de orden complejo de onda-s (Ec. 1.1), F_N es la energía libre para un parámetro de orden nemático real de tipo Ising y F_{SN} es la energía de interacción entre ambos. La primera de estas nuevas contribuciones a la energía libre de GL, está dada por

$$F_N = \int dV \left[\gamma_2(\nabla\eta)^2 + \gamma_3\eta^2 + \frac{\gamma_4}{2}\eta^4\right], \tag{2.13}$$

correspondiente a la energía libre nemática. Continuando, el acople entre superconductividad y nematicidad está dado por otros dos términos,

$$F_{SN} = F_{bi} + F_{tri}. \tag{2.14}$$

El primero es un término bi-cuadrático de la forma

$$F_{bi} = \lambda_2 \int dV \eta^2 |\psi|^2, \tag{2.15}$$

y el segundo es un acople tri-lineal entre los tres campos (a través de la derivada covariante),

$$F_{tri} = \lambda_1 \int dV \frac{\hbar}{2m} (\vec{\boldsymbol{D}}\psi)^* \eta \boldsymbol{\Lambda} (\vec{\boldsymbol{D}}\psi), \tag{2.16}$$

donde $\boldsymbol{\Lambda}$ es la matriz que define la orientación de la ruptura espontanea de la simetría rotacional C_4 (orden nemático) en el plano, con respecto a la base coordenada. El FeSe es el único caso del que se tiene constancia donde se ha reportado de manera clara la presencia de vórtices elípticos, donde los experimentos han demostrado que estos tienden a alinearse con la dirección de la distorsión ortorrómbica. A partir de esta consideración, surgen dos opciones naturales para $\boldsymbol{\Lambda}$, dependiendo de la elección de la base coordenada. Si esta última coincide con la dirección de los ejes tetragonales, se toma $\boldsymbol{\Lambda} = -\boldsymbol{\sigma}_1$, lo que orienta los vórtices a 45° de estos (siendo $\boldsymbol{\sigma}_i$ las matrices de Pauli). En el caso considerado en este trabajo, en el que la base coordenada corresponde a la red ortorrómbica, se adopta $\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\sigma}_3$, lo que alinea a los vórtices en esta dirección. Luego, dado que la matriz de rotación de 90° se expresa como $\boldsymbol{R}(\pi/2) = -i\boldsymbol{\sigma}_2$, y utilizando la identidad del grupo SU(2), $\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_i = -\boldsymbol{\sigma}_j$, se verifica que este término respeta la nueva simetría C_2 del problema

$$\eta\boldsymbol{\Lambda} \to -\eta R\left(\frac{\pi}{2}\right)\boldsymbol{\Lambda} R\left(\frac{\pi}{2}\right)^{-1} = -\eta \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_2 = -\boldsymbol{\sigma}_3 \\ -\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 = \boldsymbol{\sigma}_1 \end{cases} = \eta\boldsymbol{\Lambda} \tag{2.17}$$

Para los demás términos la invarianza es inmediata, ya que solo involucran potencias pares de η y productos internos estándar.

Mientras que el término bi-cuadrático no depende del carácter nemático del parámetro de orden y, de hecho, es bastante común en varias teorías con múltiples parámetros de orden (para un ejemplo en superconductores multibanda, ver Ref. [54]), el término proporcional a λ_1 depende específicamente de la naturaleza nemática de η. Teorías de Ginzburg-Landau de este tipo fueron consideradas, por ejemplo, en la Ref. [55] para estudiar vórtices en FeSe en el límite de London. El parámetro de acoplamiento bi-cuadrático λ_2 puede ser positivo o negativo (dentro de ciertos límites), lo que da lugar a competencia o cooperación entre el parámetro de orden nemático y la superconductividad [17]. Por otro lado, un λ_1 distinto de cero dará lugar a vórtices elípticos, y su signo determinará la orientación de su eje mayor.

2.3. Adimensionalización y valores de equilibrio

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau suelen reescribirse en forma adimensional en la mayoría de sus implementaciones numéricas. Sin embargo, por razones históricas relacionadas a la construcción del método empleado en este trabajo (ver la Sec. 3.2 para más detalle), en este capítulo se presentarán las ecuaciones en forma dimensional, a excepción de la correspondiente al parámetro de orden nemático.

Para definir cantidades adimensionales de los campos, podemos re-escalarlos como

$$\psi = \sqrt{\rho_0}\tilde{\psi}, \quad \eta = \eta_0\tilde{\eta} \tag{2.18}$$

donde $\eta_0^2 = -\gamma_3/\gamma_4$. A continuación, definimos nuevos coeficientes para la energía libre nemática como

$$\hat{\lambda}_1 = \frac{\lambda_1\eta_0}{\hbar}, \quad \hat{\lambda}_2 = \frac{\lambda_2\eta_0^2}{|\alpha_{GL}|}, \quad \Gamma_2 = \frac{\gamma_2\eta_0^2}{|\alpha_{GL}|\rho_0}, \quad \Gamma_4 = \frac{\gamma_4\eta_0^4}{|\alpha_{GL}|\rho_0} \tag{2.19}$$

donde $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$ y Γ_4 resultan adimensionales, y $[\Gamma_2] = [L]^2$. Escribiendo la longitud de coherencia nemática, definida como $l_\eta^2 = \gamma_2/|\gamma_3|$, en términos de los nuevos parámetros,

$$l_\eta^2 = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_4} \tag{2.20}$$

De este modo, el conjunto inicial de parámetros introducidos por el acople con la nematicidad $\{\gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \lambda_1, \lambda_2\}$, queda unívocamente determinado por el nuevo conjunto de parámetros $\{l_\eta, \eta_0, \Gamma_4, \hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2\}$, que a excepción de l_η y η_0, son adimensionales.

En términos de estos parámetros adimensionales, los valores de equilibrio del estado uniforme (para más detalle, consultar la Ref. [17]), adquieren la siguiente forma

$$|\tilde{\psi}_v|^2 = \frac{1-\hat{\lambda}_2}{1-(\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}, \quad \tilde{\eta}_v^2 = \frac{1-(\hat{\lambda}_2/\Gamma_4)}{1-(\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}. \tag{2.21}$$

Estos mínimos existen si las constantes del modelo satisfacen

$$-\sqrt{\Gamma_4} < \hat{\lambda}_2 < \min(1, \Gamma_4), \qquad |\hat{\lambda}_1|\tilde{\eta}_v < 1, \tag{2.22}$$

lo que determina el rango de valores que pueden tomar los parámetros de la teoría.

2.4. Dinámica fuera del equilibrio

2.4.1. Dinámica disipativa

Una modificación dependiente del tiempo de las ecuaciones de Ginzburg-Landau se puede establecer bajo la suposición de que la derivada de la energía libre actúa como una fuerza generalizada. La disipación de energía en el sistema puede ocurrir tanto en forma de calor (asociado al efecto Joule debido a los núcleos normales de los vórtices) como a través de variaciones irreversibles del parámetro de orden [12]. Así, la dinámica puramente disipativa del modelo está dada por las ecuaciones

$$\frac{\hbar^2}{2mD}\partial_t\psi = -\frac{\delta F}{\delta\psi^*} \tag{2.23}$$

$$\frac{\boldsymbol{\rho}^{-1}}{c^2}\partial_t\vec{\boldsymbol{A}} = -\frac{\delta F}{\delta\vec{\boldsymbol{A}}} \tag{2.24}$$

$$\frac{\hbar^2}{2mD_n}\partial_t\eta = -\frac{\partial F}{\partial\eta} \tag{2.25}$$

Aquí, $\boldsymbol{\rho}$ es la resistividad eléctrica con unidades $[\rho] = [T]$, D es una constante de difusión fenomenológica con unidades $[D] = [L]^2[T]^{-1}$, y D_n es su análogo para la constante de difusión nemática. Nótese que en este desarrollo estamos despreciando un término proporcional a la segunda derivada temporal de A, y estamos trabajando en el *gauge* $A_0 = 0$ (usualmente referido como *zero electrostatic potential gauge*, para más detalle consultar la Ref. [56]). Las Ecs. 2.23 y 2.24 son conocidas como las ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo (TDGL, por sus siglas en inglés) y fueron introducidas hace más de 50 años por Schmid [12]. Un término de ruido estocástico asociado a las fluctuaciones térmicas podría ser añadido, lo que convertiría las ecuaciones en ecuaciones de evolución tipo Langevin, adecuadas para superconductores. Sin embargo, en este trabajo sólo consideraremos la temperatura a través de la dependencia estándar de los parámetros de la energía libre.

El carácter tensorial de la resistividad resulta una novedad de este trabajo frente a los estudios previos desarrollados en el grupo. Asumimos una relación lineal entre la anisotropía resistiva y la nematicidad, que debería valer siempre y cuando esta sea pequeña. En base a la elección del sistema coordenado como el correspondiente a la base ortorrómbica, este tensor adquiere la forma

$$\boldsymbol{\rho} = \rho(\boldsymbol{I} + (\delta - c_1\tilde{\eta})\boldsymbol{\sigma_3}) \tag{2.26}$$

donde $\boldsymbol{\sigma}_3$ es la matriz de Pauli. Aquí, δ es un parámetro adimensional relacionado con una anisotropía intrínseca, y c_1 caracteriza la anisotropía resistiva producto del orden nemático. En

lo que sigue, asumiremos por simplicidad que $\delta = 0$. El tensor de resistividad también podría incluir términos no diagonales, que serían relevantes en caso de estar interesados en el estudio de efectos Hall.

2.4.2. Ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo

Calculando la variación de la funcional expresada en la Ec. 2.12 a través de los campos dinámicos, y desarrollando a primer orden no nulo,

$$\delta F = F[\psi^* + \delta\psi^*, \vec{\boldsymbol{A}} + \delta\vec{\boldsymbol{A}}, \eta + \delta\eta] - F[\psi^*, \vec{\boldsymbol{A}}, \eta] \tag{2.27}$$

se deducen las ecuaciones TDGL del modelo. Para el parámetro de orden superconductor,

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_\tau\psi = {} & \frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot(\boldsymbol{\Xi}\nabla\psi) - \frac{ie}{2mc}\psi\nabla\cdot(\boldsymbol{\Xi}\vec{\boldsymbol{A}}) - \frac{ie}{mc}\nabla\psi\cdot\boldsymbol{\Xi}\vec{\boldsymbol{A}} \\ & + \psi\frac{\beta_{GL}}{\hbar}\left(\rho_0(1 - V_0 g_{trap} - \hat{\lambda}_2\tilde{\eta}^2) - |\psi|^2 - \frac{e^2}{2mc^2\beta_{GL}}\vec{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\Xi}\vec{\boldsymbol{A}}\right)\end{aligned}} \tag{2.28}$$

donde se reescaleo el tiempo por

$$\tau = \frac{t}{\gamma}, \quad \text{con} \quad \gamma = \frac{\hbar}{2mD}, \tag{2.29}$$

y se ha definido

$$\boldsymbol{\Xi} = \boldsymbol{I} + \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\Lambda}, \tag{2.30}$$

a fines de compactar notación. Nótese que en esta ecuación se ha incorporado una función espacial g_{trap}, cuya naturaleza y propósito será introducido más adelante en este trabajo. Siguiendo, para el potencial vector,

$$\boxed{\frac{\boldsymbol{\rho}^{-1}}{\gamma c}\partial_\tau\vec{\boldsymbol{A}} = \frac{\hbar e}{m}\boldsymbol{\Xi}\,\mathrm{Im}[\psi^*\nabla\psi] - \frac{e^2}{mc}|\psi|^2\boldsymbol{\Xi}\vec{\boldsymbol{A}} - \frac{c}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\vec{\boldsymbol{A}}} \tag{2.31}$$

Reconociendo a la densidad de corriente superconductora (o supercorriente, siendo esta la corriente eléctrica transportada por los pares de Cooper), dada por

$$\vec{\boldsymbol{J}}_S = \frac{\hbar e}{2im}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^2}{mc}|\psi|^2\vec{\boldsymbol{A}}, \tag{2.32}$$

y al campo eléctrico en el *zero electrostatic potential gauge*,

$$\vec{\boldsymbol{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{\boldsymbol{A}}}{\partial t}, \tag{2.33}$$

es directo ver que la Ec. 2.31, para $\boldsymbol{\Xi} = \boldsymbol{I}$ ($\tilde{\eta} = 0$), no es otra cosa más que una ley de Ohm,

$$\boldsymbol{\sigma}\vec{\boldsymbol{E}} = -\vec{\boldsymbol{J}}_S + \vec{\boldsymbol{J}} = \vec{\boldsymbol{J}}_N \tag{2.34}$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\rho}^{-1}$ es la conductividad eléctrica, $\vec{\boldsymbol{J}}_N$ es la densidad de corriente del estado normal (toda la corriente no superconductora), y se usó la relación entre la densidad de corriente total y la densidad de flujo local

$$\frac{4\pi}{c}\vec{\boldsymbol{J}} = \nabla \times \vec{\boldsymbol{B}} \tag{2.35}$$

Finalmente, la ecuación disipativa para el parámetro de orden nemático, en su formulación adimensional, se escribe

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{|\alpha_{GL}|}\frac{D}{D_\eta}\partial_\tau\tilde{\eta} = {} & 2\Gamma_2\nabla^2\tilde{\eta} + 2\Gamma_4\tilde{\eta}(1-\tilde{\eta}^2) - 2\frac{\hat{\lambda}_2}{\rho_0}\tilde{\eta}|\psi|^2 \\ & - \frac{\xi^2\hat{\lambda}_1}{\rho_0}(\nabla\psi^*\boldsymbol{\Lambda}\nabla\psi) + \frac{\hat{\lambda}_1}{\rho_0|\alpha_{GL}|}\frac{\hbar e}{mc}\mathrm{Im}[\psi^*\nabla\psi]\boldsymbol{\Lambda}\vec{\boldsymbol{A}} - \frac{\hat{\lambda}_1}{\rho_0|\alpha_{GL}|}\frac{e^2}{2mc^2}|\psi|^2\vec{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\Lambda}\vec{\boldsymbol{A}}\end{aligned} \tag{2.36}$$

donde se redefinió la constante de difusión como $D_\eta = \rho_0 D_n/\eta_0^2$. Notar que las ecuaciones que resultan de este modelo son ecuaciones diferenciales parciales no lineales acopladas, cuya resolución analítica exacta resulta impracticable. En general, su abordaje involucra diferentes *ansatz* para simular los perfiles de los vórtices con alguna función adecuada, y se modelan sus interacciones de forma efectiva. En nuestro caso, utilizaremos un método numérico pseudo-espectral que nos permite resolver el sistema de ecuaciones completo sin la necesidad de ninguna aproximación ni suposición adicional.

2.5. Escalas características

Con el objetivo de definir cantidades de referencia que permitirán comparar los valores empleados en este trabajo con los reportados en la bibliografía, en esta sección se introducen y describen magnitudes características del sistema, típicas de la literatura. Estas magnitudes son relevantes para evaluar el régimen dinámico en el que opera el modelo y establecer correspondencias con estudios previos.

2.5.1. Relación entre constantes difusivas

En la Ref. [13], se define el *ratio* entre los tiempos característicos del parámetro de orden ψ y el potencial vector A, como

$$\eta_D = \frac{c^2}{4\pi\sigma\kappa^2 D} = \frac{\hbar}{\sigma'\lambda_L^2|\alpha_{GL}|} \tag{2.37}$$

donde se definió convenientemente,

$$\sigma' = \frac{4\pi\sigma}{\gamma c^2}, \tag{2.38}$$

y se usó que, combinando las Ecs. 2.7 y 2.29,

$$D = \frac{|\alpha_{GL}|\xi^2}{\gamma\hbar}. \tag{2.39}$$

Notar que η_D es adimensional. En la Ref. [13], se argumenta que para superconductores con impurezas magnéticas $D \simeq c^2/(48\pi\kappa^2\sigma)$, por lo que adoptan $\eta_D \simeq 12$.

2.5.2. Longitud de penetración eléctrica

Otra cantidad usualmente referida en la bibliografía, por ejemplo en las Refs. [57, 12], es la longitud de penetración eléctrica. Esta magnitud caracteriza la profundidad a la que un campo eléctrico aplicado puede penetrar en un superconductor en presencia de movimiento de vórtices. Esta magnitud se define como,

$$l_E^2 = \frac{\hbar\sigma\beta_{GL}}{2e^2\gamma|\alpha_{GL}|}. \tag{2.40}$$

Mediante la definición de la Ec. 2.38 y de $\rho_0 = |\alpha_{GL}|/\beta_{GL}$, esta longitud se puede re-expresar de la siguiente manera,

$$\frac{l_E^2}{\xi^2} = \sigma'\lambda_L^2\frac{|\alpha_{GL}|}{\hbar}. \tag{2.41}$$

De donde se observa su relación con el cociente entre las constantes difusivas, según $l_E^2/\xi^2 = \eta_D^{-1}$ (ver Ec. 2.37). En la Ref. [12] se argumenta que, en superconductores con un corto camino libre medio en el estado normal, $l_E \simeq 0.42\xi$. Por otro lado, la Ref. [57] indica que, en materiales con una alta concentración de impurezas magnéticas, $l_E \simeq 0.29\xi$ (en concordancia con $\eta_D \simeq 12$). No obstante, estos valores no son universales ni necesariamente aplicables a los sistemas que buscamos tratar, sino solo una referencia de orden de magnitud que preservaremos en menor medida en este trabajo.

2.5.3. Tiempo de relajación

El tiempo de relajación t_R, definido por Schmid [12], representa la escala temporal característica en la que el parámetro de orden ψ responde a perturbaciones externas, como fluctuaciones

térmicas o procesos disipativos. Retornando a su valor de equilibrio, $\sqrt{|\alpha_{GL}/\beta_{GL}|}$, siguiendo una ley exponencial de la forma $\exp(-t/t_R)$, con

$$t_R = \frac{\gamma\hbar}{2|\alpha_{GL}|} = \frac{\xi^2}{2D}. \tag{2.42}$$

A partir de esta definición, es posible introducir la cantidad

$$V_R = \frac{\lambda_L}{t_R}, \tag{2.43}$$

la cual puede interpretarse como una velocidad característica de relajación de los vórtices en presencia de un campo magnético externo. Esta velocidad proporcionará una medida de la rapidez con la que los vórtices responden a variaciones del entorno.

Un análogo al tiempo de relajación que determina la escala relevante para la evolución del parámetro de orden nemático, es

$$t_\eta = \frac{l_\eta^2}{2D_\eta} \tag{2.44}$$

Capítulo 3

Método numérico

En el ámbito de la superconductividad es de común aplicación los métodos de diferencias finitas. Éstos han sido ampliamente estudiados en el caso de las ecuaciones de Ginzburg-Landau [58, 59, 60], aunque presentan diversas desventajas, como la dispersión numérica (que introduce errores en las relaciones de dispersión), la disipación numérica (una atenuación excesiva de los modos de alta frecuencia en la integración numérica, análoga a una viscosidad numérica efectiva) y otros efectos, como la aparición de ondas o *wiggles* en los campos simulados [61, 62, 63, 64]. Además, estos métodos requieren un alto costo computacional tanto en términos de tiempo de ejecución como de recursos informáticos (*hardware*) para su implementación eficiente.

En nuestro grupo se ha desarrollado un método de vanguardia en el ámbito de la superconductividad a través de la aplicación de métodos pseudo-espectrales para la resolución de las ecuaciones de TDGL [16]. La implementación de este método es, hasta donde sabemos, una novedad técnica en la temática y ofrece una serie de ventajas muy provechosas frente a los tradicionales métodos de elementos finitos.

En particular, empleamos una adaptación del paquete ***Geophysical High-Order Suite for Turbulence***, conocido como GHOST por sus siglas en inglés. Este es un código pseudo-espectral paralelizado con MPI [65] y optimizado por P. D. Mininni *et al.* [62]. Originalmente diseñado para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales (PDE'S) en fluidos turbulentos y magnetohidrodinámica [66, 67, 68], y recientemente adaptado al estudio de turbulencia en condensados rotantes de Bose-Einstein [69]. El problema de la superconductividad y el de la turbulencia son problemas relacionados, ya que en el ámbito de fluidos cuánticos la dinámica TDGL se utiliza para la preparación de condiciones iniciales. Es así que los programas pueden ser directamente adaptados de un campo al otro.

En esta sección presentaremos una muy breve introducción a los métodos espectrales, mencionando las condiciones numéricas que garantizan la estabilidad y convergencia de los códigos, así como destacando sus ventajas frente a otros métodos. Luego, describiremos el sistema de ecuaciones a resolver por el programa, y haremos énfasis en las dificultades presentes a la hora de imponer las condiciones de contorno.

3.1. Métodos Pseudo-espectrales

Los métodos pseudo-espectrales consisten en el desarrollo de Fourier de las distintas variables dinámicas en un conjunto finito (pero grande) de modos y la posterior resolución de ecuaciones que describen la dinámica temporal de los coeficientes de la descomposición, que se resuelve mediante un método de Runge-Kutta de orden adaptable. En el caso de este trabajo, dichas variables dinámicas resultan al potencial vector electromagnético $\vec{A}$, el parámetro de orden superconductor ψ, y el parámetro de orden nemático η.

Una de las ventajas más importantes de estos métodos está en el sencillo cómputo de las derivadas espaciales, las cuales convierte en productos en el espacio de Fourier, por ejemplo,

$$\nabla^2\psi \rightarrow -k^2\psi_{\boldsymbol{k}} \tag{3.1}$$

que se pueden computar de forma eficiente utilizando transformadas rápidas de Fourier (FFT). Los términos no lineales, que usualmente requieren $O(N^2)$ (con N la resolución espacial) operaciones, se computan primero transformando Fourier las variables involucradas (que requiere $O(N \log N)$ operaciones), realizando los productos en el espacio real y luego volviendo al espacio Fourier. Si bien este proceso introduce *aliasing* en el método[1], este costo se evita utilizando la regla de los 2/3 para suprimir modos espúreos que se puedan introducir en el producto.

La regla de los 2/3 de Orszag consiste en filtrar los modos de alta frecuencia eliminando los coeficientes de Fourier con números de onda mayores a $(2/3)k_{\text{máx}}$, donde $k_{\text{máx}}$ es el número de onda máximo representable en la malla. Esto evita la contaminación de los modos pequeños por *aliasing* debido a la convolución en el espacio de Fourier. En la práctica, se implementa igualando a cero los coeficientes de Fourier para $|k| > (2/3)k_{\text{máx}}$, antes de realizar la transformada inversa.

Una de las mayores ventajas de los métodos pseudo-espectrales es su alta precisión. En problemas suficientemente suaves, el error decrece exponencialmente con el número de puntos de la malla. En contraste, los métodos de diferencias finitas presentan un error que decrece como una potencia del tamaño de la malla, típicamente del orden $O(\Delta x^n)$, donde n es el orden del esquema utilizado. Esto significa que, para alcanzar una misma precisión, los métodos pseudo-espectrales requieren menos puntos de malla que los de diferencias finitas. Además, no poseen dispersión ni difusión numérica por lo que reproducen únicamente la dispersión propia del sistema físico.

3.2. Adaptación de GHOST a superconductividad

El programa GHOST es un paquete que contiene una gran variedad de códigos de resolución (o *solvers* en inglés) que permiten resolver diferentes sistemas de PDE's, usualmente encontrados en estudios de fluidos turbulentos. Entre estas posibilidades, es de nuestro interés el *solver* denominado *ARGLE* (por sus siglas en inglés *advective real Ginzburg–Landau equation*), el cual permite resolver una ecuación de GL de gran similitud a la ecuación para el parámetro de orden

[1] Debido a que los cálculos se realizan en grillas de puntos $x_n = \frac{2\pi n}{N}$ ($n \in \mathbf{N}$), los modos Fourier $\sim e^{ikx_n}$ son indistinguibles sobre la grilla de los modos $\sim e^{i(k+mN)x_n}$ ($m \in \mathbf{N}$). Por lo tanto, al realizar las antitransformadas de los productos de funciones aparecen contribuciones de modos con número de onda $k + mN$ que se proyectan de forma espúrea.

ψ. Durante el trabajo realizado en la tesis doctoral de Ramiro Severino [16], tanto este *solver* como el programa en general, han sido adaptados para la resolución de las ecuaciones TDGL descritas en la Sec. 2.4.2. Esta tarea implicó la incorporación de nuevas variables dinámicas para describir al potencial vector $\vec{\boldsymbol{A}}$ y al orden nemático η, re-escritura de las ecuaciones del *solver*, modificación de los archivos de salida (*outputs*), entre otros tantos. Dicha labor ha sido reproducida durante este trabajo, implementándose algunas características adicionales de interés, tales como el carácter tensorial de la resistividad (ver Ec. 2.26).

Durante este proceso, se han heredado algunas definiciones y variables asociadas a la escritura original de las ecuaciones, empleadas en el contexto de fluidos. Es así que, por ejemplo, el potencial vector $\vec{\boldsymbol{A}}$ aparece relacionado al campo de velocidades $\vec{\boldsymbol{v}}$ del fluido (que llamaremos $\vec{\mathcal{A}}$, por simplicidad). De manera resumida, la conexión entre el conjunto de variables que realmente aparecen en el programa, y aquellas que denominaremos "Físicas", puede verse en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1: *Relaciones entre las variables dinámicas de GHOST y su contraparte en el contexto de superconductividad. Se expresan sus unidades en el sistema Gaussiano-cgs, según se deduce del Apéndice A.1.*

GHOST	**Físicas**	**Unidades (cgs)**
ψ	ψ	$\mathrm{cm}^{-3/2}$
$\vec{\mathcal{A}}$	$\frac{e}{mc}\vec{\boldsymbol{A}}$	$\mathrm{cm}\cdot\mathrm{s}^{-1}$
$\vec{\mathcal{B}}$	$\frac{e}{mc}\vec{\boldsymbol{B}}$	s^{-1}
$\vec{\mathcal{H}}$	$\frac{e}{mc}\vec{\boldsymbol{H}}$	s^{-1}
$\vec{\mathcal{J}}$	$\frac{4\pi e}{mc^2}\vec{\boldsymbol{J}}$	$\mathrm{cm}^{-1}\cdot\mathrm{s}^{-1}$

Análogamente, el programa define un conjunto de variables globales en términos de sus parámetros, que pueden relacionarse a los parámetros físicos como se indica en la Tabla 3.2.

Tabla 3.2: *Variables globales de GHOST en función de sus parámetros c_s, ξ y ρ_0, y su relación con los parámetros físicos de la teoría α_{GL}, β_{GL} y m. Se expresan sus unidades en el sistema Gaussiano-cgs.*

GHOST	**Definición**	**Físicas**	**Unidades (cgs)**
α	$\frac{c_s\xi}{\sqrt{2}}$	$\frac{\hbar}{2m}$	$\mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$
Ω	$\frac{c_s}{\sqrt{2}\xi}$	$\frac{\lvert\alpha_{GL}\rvert}{\hbar}$	s^{-1}
β	$\frac{\Omega}{\rho_0}$	$\frac{\beta_{GL}}{\hbar}$	$\mathrm{cm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1}$

Como puede apreciarse de las relaciones de la Tabla 3.2, el conjunto de parámetros que adopta el programa son: ξ, que coincide con la longitud de coherencia superconductora; ρ_0 que representa el valor de equilibrio *bulk* del módulo cuadrado del parámetro de orden ($|\psi|^2_\infty$); y c_s, que resulta un parámetro heredado de la formulación original del método numérico, asociada en el contexto de fluidos a la velocidad del sonido en el medio. Despejando esta última en término de cantidades conocidas en el contexto de superconductividad (a partir de los vínculos presentados),

$$c_s = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}\xi^3\kappa^2\rho_0}}_{adimensional}\left(\frac{\hbar c^2}{4\pi e^2}\right). \tag{3.2}$$

Adicionalmente, se incluye κ como parámetro independiente, permitiendo fijar el conjunto $\{c_s, \xi, \rho_0, \kappa\}$ sin restricciones adicionales. Para más detalles sobre esta elección y su impacto en las escalas del programa (en relación a la Ec. 3.2), ver el Apéndice A.2.

3.2.1. Ecuaciones y parámetros

En este trabajo, se consideran soluciones al problema con invarianza traslacional a lo largo de la dirección de los vórtices. En la práctica, esto implica que se descartara cualquier dependencia de los campos en dicha dirección y que, por eficiencia, su resolución será la mínima permitida, $N_y = 2$. Debido a ciertas particularidades del programa, cuyo detalle no se abordará aquí, las direcciones en las que es posible una discretización de la malla de este tipo están restringidas. Como consecuencia, se adopta un sistema de coordenadas poco convencional (lo natural sería asumir invarianza en $\hat{z}$), el cual se ilustra en la Fig. 3.1. De esta manera, el flujo magnético de un vórtice apuntará siempre en la dirección $\vec{\mathbf{\Phi}}_0 = \pm\Phi_0\hat{y}$ (donde el signo depende de su vorticidad). Luego, su dinámica quedará restringida al plano xz, que además será el plano en el cual se produce la ruptura espontánea de simetría asociada al orden nemático. Como se comentó en el capítulo anterior, en este trabajo la elección de los ejes coordenados es tal que estos coincidan con los ejes de la red ortorrómbica a, b (ver Fig. 1.4). De modo que los eje mayor y menor de la elipse que representa al vórtice, resultarán orientados en las direcciones $\hat{x}$ y $\hat{z}$, o viceversa (dependiendo el signo del parámetro λ_1).

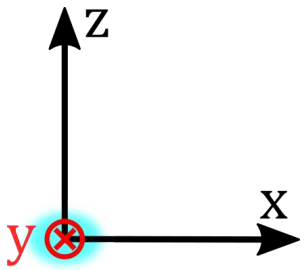

Figura 3.1: *Sistema coordenado (terna derecha). Vórtice orientado en la dirección $\hat{x}$.*

A partir de estas consideraciones, y de las definiciones establecidas en las Tablas 3.1 y 3.2, el conjunto de ecuaciones a resolver en GHOST, derivadas de las Ecs. 2.28, 2.31 y 2.36, son

$$\begin{aligned}\partial_\tau\psi = {}& \alpha\nabla\cdot(\mathbf{\Xi}\nabla\psi) - \frac{i}{2}\psi\nabla\cdot(\mathbf{\Xi}\vec{\mathcal{A}}) - i\nabla\psi\cdot\mathbf{\Xi}\vec{\mathcal{A}} \\ & + \psi\beta\left(\rho_0(1 - V_0 g_{trap} - \hat{\lambda}_2\tilde{\eta}^2) - |\psi|^2 - \frac{1}{4\alpha\beta}\vec{\mathcal{A}}\mathbf{\Xi}\vec{\mathcal{A}}\right)\end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\partial_\tau\vec{\mathcal{A}} = (\boldsymbol{I} - c_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\sigma_3})\frac{1}{\sigma'}\left[\frac{2\alpha}{\kappa^2\xi^2\rho_0}\mathbf{\Xi}\,\mathrm{Im}[\psi^*\nabla\psi] - \frac{1}{\kappa^2\xi^2\rho_0}|\psi|^2\mathbf{\Xi}\vec{\mathcal{A}} - \nabla\times\nabla\times\vec{\mathcal{A}}\right] \tag{3.4}$$

$$\begin{aligned}\partial_\tau\tilde{\eta} = {}& \Omega\frac{D_\eta}{D}\left[2\Gamma_2\nabla^2\tilde{\eta} + 2\Gamma_4\tilde{\eta}(1-\tilde{\eta}^2) - 2\frac{\hat{\lambda}_2}{\rho_0}\tilde{\eta}|\psi|^2\right. \\ & \left. - \frac{\xi^2\hat{\lambda}_1}{\rho_0}(\nabla\psi^*\mathbf{\Lambda}\nabla\psi) + \frac{\hat{\lambda}_1}{\Omega\rho_0}\mathrm{Im}[\psi^*\nabla\psi]\mathbf{\Lambda}\vec{\mathcal{A}} - \frac{\hat{\lambda}_1}{4\Omega\alpha\rho_0}|\psi|^2\vec{\mathcal{A}}\mathbf{\Lambda}\vec{\mathcal{A}}\right]\end{aligned} \tag{3.5}$$

donde ademas se ha usado la definición de σ' (Ec. 2.38) y la expresión del tensor de resistividad $\boldsymbol{\rho}$ (Ec. 2.26). En esta implementación $\mathbf{\Lambda} = \boldsymbol{\sigma}_3$ y $\mathbf{\Xi} = (\boldsymbol{I} + \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\sigma}_3)$. Notar por otro lado, que $\vec{\mathcal{A}}^t = (\mathcal{A}_x, \mathcal{A}_z)$ y $\mathbf{\Xi}$ es una matriz 2×2, ya que $\mathcal{A}_y$ no se considera como una variable dinámica y se le toma igual a cero (ver Apéndice B para mas detalles). La resolución de este sistema se

realiza sobre una región de tamaño $2\pi L_x \times 2\pi L_z$, discretizada en una malla de $N_x \times N_z$ puntos, donde se adoptó de forma arbitraria (sin perdida alguna de generalidad) $L_x = L_z = L = 1$.

Esta formulación permite una resolución eficiente del sistema de ecuaciones, y es la que se ha utilizado tanto en este trabajo como en estudios previos [17, 18]. En cuanto a la evolución temporal, aquí se ha optado por el empleo de un método Runge-Kutta de primer orden, sin embargo, esto puede llevarse fácilmente a órdenes mayores (pagándose el debido costo computacional). A modo de resumen, en la Tabla 3.3 se presentan los diferentes conjuntos de parámetros que requiere el modelo.

Tabla 3.3: *Parámetros independientes de GHOST organizados por categoría.*

Categoría	Parámetros
ARGLE adaptado	ξ, κ, ρ_0, c_s
Nematicidad	$\eta_0, \Gamma_2, \Gamma_4, \hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, c_1$
Constantes difusivas	$\sigma', D_\eta/D$
Resolución numérica	$N_x, N_y, N_z, \Delta\tau$

3.2.2. Condición de Courant-Friedrich-Lewy

Debido a que el sistema es disipativo, los términos difusivos (proporcionales a ∇^2) son los responsables de determinar las escalas temporales de las simulaciones numéricas. En cálculo numérico, la condición de Courant-Friedrich-Lewy (CFL, por sus siglas) es una condición necesaria (aunque no suficiente) para la convergencia de ciertos esquemas de integración numérica. Dado un incremento en la variable espacial $\Delta r = 2\pi L/N$, el intervalo temporal para la discretización del tiempo $\Delta\tau$ debe cumplir una cierta relación que depende de los parámetros de las ecuaciones diferenciales. A partir de las Ecs. 3.3, 3.4 y 3.5, se pueden construir los números de Courant

$$C_\psi = \alpha \frac{\Delta\tau}{(\Delta r)^2}, \quad C_{\mathcal{A}} = \frac{1}{\sigma'} \frac{\Delta\tau}{(\Delta r)^2}, \quad C_{\tilde{\eta}} = 2\Omega\Gamma_2 \frac{D_\eta}{D} \frac{\Delta\tau}{(\Delta r)^2} \tag{3.6}$$

La condición que sugiere la convergencia del método se obtiene cuando $C < 1$.

3.2.3. Condiciones periódicas de contorno

En los métodos pseudo-espectrales, las condiciones de contorno deben ser compatibles con la base de funciones utilizada en la expansión espectral. En el caso de GHOST, se implementan transformadas de Fourier, por lo que se asume periodicidad en los extremos del dominio. Esto representa una fuerte desventaja frente a los métodos de elementos finitos, cuya formulación permite imponer directamente condiciones de contorno de Dirichlet, Neumann o mixtas en los nodos, lo cual los vuelve flexible para dominios irregulares o con condiciones complejas. Así, la necesidad de periodicidad y suavidad en las variables dinámicas del método (ψ, $\mathcal{A}$ y $\tilde{\eta}$) supone una dificultad a la hora de establecer las condiciones de contorno, las cuales deberán imponerse mediante un enfoque alternativo al usual en diferencias finitas. Esencialmente, la estrategia (a

detallar en el próximo capítulo) consistirá en introducir términos adicionales, ya sea en la energía libre o en las ecuaciones dinámicas, que modelen distintas condiciones sobre la región periódica de simulación. Ejemplos de esto pueden ser campos eléctricos o magnéticos externos, corrientes de transporte, o interfaces S-N, siendo estas dos últimas las de interés en este trabajo. De forma explícita, las ecuaciones que deben cumplir las variables dinámicas son,

$$\psi(x,0) = \psi(x,2\pi), \quad \psi(0,z) = \psi(2\pi,z) \tag{3.7}$$

$$\vec{\mathcal{A}}(x,0) = \vec{\mathcal{A}}(x,2\pi), \quad \vec{\mathcal{A}}(0,z) = \vec{\mathcal{A}}(2\pi,z) \tag{3.8}$$

$$\tilde{\eta}(x,0) = \tilde{\eta}(x,2\pi), \quad \tilde{\eta}(0,z) = \tilde{\eta}(2\pi,z) \tag{3.9}$$

Siendo la más interesante de estas la correspondiente al potencial vector, la cual implica que (usando el Teorema de Stokes)

$$\oint_{\partial\Sigma} \vec{\mathcal{A}} \cdot d\vec{\mathbf{r}} = \iint_{\Sigma} \underbrace{(\nabla \times \vec{\mathcal{A}})}_{\vec{\mathcal{B}}} \cdot d\vec{\mathbf{S}} = 0 \tag{3.10}$$

debido a que el primer término se anula trivialmente por la periodicidad de $\vec{\mathcal{A}}$. En la Ec. 3.10, $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ es una superficie orientada y suave de contorno $\partial\Sigma$, parametrizada por $T : D \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$, donde $D : [0,2\pi) \times [0,2\pi)$ y $T(x,z) = (x,0,z)$. En otras palabras, esta ecuación indica que la periodicidad del potencial vector impone restricciones no triviales sobre el flujo magnético, el cual debe de integrar a cero sobre la región de simulación. Esto condiciona fuertemente, por ejemplo, a los campos magnéticos externos simulables. Será de relevancia particular para este trabajo, como se verá más adelante, cómo esto también influye en la estructura de la densidad de corriente externa. Para entender esto, pensemos el caso simple $|\psi|^2 = 0$ (i.e. estado normal), y supongamos que buscamos una solución al problema en el que la densidad de corriente total es igual a una función arbitraria $\vec{\mathcal{J}}_{ext}$, es decir,

$$\nabla \times \nabla \times \vec{\mathcal{A}} = \vec{\mathcal{J}}_{ext} \tag{3.11}$$

donde $\vec{\mathcal{J}}_{ext}$ más adelante representará la densidad de corriente externa de transporte. Para que el programa converja a una solución, debe de existir un $\vec{\mathcal{A}}$ periódico tal que se cumpla la Ec. 3.11 para un dado $\vec{\mathcal{J}}_{ext}$. En términos de la inducción magnética, sabiendo que este debe apuntar en la dirección de la simetría de traslación,

$$\nabla \times \nabla \times \vec{\mathcal{A}} = \nabla \times \vec{\mathcal{B}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ 0 & \mathcal{B}_y & 0 \end{vmatrix} = -\partial_z \mathcal{B}_y \, \hat{x} + \partial_x \mathcal{B}_y \, \hat{z} = \vec{\mathcal{J}}_{ext} \tag{3.12}$$

Pongamos ahora restricciones sobre $\vec{\mathcal{J}}_{ext}$. Digamos que queremos que apunte únicamente en la dirección de uno de los ejes coordenados, tomemos $\hat{z}$ a modo de ejemplo. Luego,

$$\vec{\mathcal{J}}_{ext}(x,z) = \mathcal{J}_{ext}(x,z)\,\hat{z} \tag{3.13}$$

lo que impone por la Ec. 3.12 que

$$\partial_z \mathcal{B}_y = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{B}_y(x,z) = \mathcal{B}_y(x) \tag{3.14}$$

y

$$\partial_x \mathcal{B}_y(x) = \mathcal{J}_{ext}(x, z) \tag{3.15}$$

de donde sale que $\mathcal{J}_{ext}$ no puede depender de z. Se sigue,

$$\mathcal{B}_y(x) = \mathcal{B}_y(0) + \int_0^x \mathcal{J}_{ext}(x')\, dx' \tag{3.16}$$

que no es otra cosa que el auto-campo generado por la densidad de corriente. Por otro lado, como $\vec{\mathcal{A}}$ es una función periódica, cada una de sus componentes se puede escribir como una suma de términos de Fourier, por lo cual

$$\mathcal{A}_i(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{nm} e^{i(k_n x + k_m z)} \tag{3.17}$$

de modo que todas sus derivadas resultan igualmente funciones periódicas cuyo modo cero se anula, es decir,

$$\mathcal{B}_y(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C'_{nm} e^{i(k_n x + k_m z)} \tag{3.18}$$

con

$$4\pi^2 C'_{00} = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{B}_y(x, z)\, dx\, dz = \iint_\Sigma (\nabla \times \vec{\mathcal{A}}) \cdot d\vec{\mathbf{S}} = 0 \tag{3.19}$$

De esta forma, si el campo magnético solo depende de x, debe cumplirse que

$$\mathcal{B}_y(0) = \mathcal{B}_y(2\pi) \tag{3.20}$$

lo que en la Ec. 3.16 implica

$$\int_0^{2\pi} \mathcal{J}_{ext}(x) dx = 0 \tag{3.21}$$

Resumiendo, planteamos un problema bajo las hipótesis de región normal $|\psi|^2 = 0$, densidad de corriente en $\hat{z}$, y campo magnético en $\hat{y}$. Luego, únicamente a partir de las condiciones de periodicidad de $\vec{\mathcal{A}}$, llegamos a la conclusión de que el auto-campo (y en consecuencia también la densidad de corriente) solo puede variar en x (la dirección transversal al flujo de corriente), y lo más importante, la integral en x de la densidad de corriente debe de anularse sobre el dominio de simulación. Esta última condición puede pensarse (de manera anecdótica) como que toda la corriente que va debe volver, así como en la realización experimental la corriente vuelve a la fuente. Si bien la derivación no es general al problema, ofrece una buena idea de las condiciones que debe cumplir una densidad de corriente externa impuesta en la simulación, con tal de que sea compatible con las condiciones periódicas del programa.

3.2.4. Adimensionalización de resultados

Con el objetivo de facilitar comparaciones con valores realistas o incluso experimentales, la estrategia adoptada para presentar los resultados consiste en definir cantidades de referencia con las cuales adimensionalizar las magnitudes físicas. Es común en estos estudios emplear la longitud de penetración λ_L para expresar las distancias, por sobre la longitud de coherencia

ξ. Es así, que los resultados se presentarán mayormente como x/λ_L. Por otro lado, una escala de tiempo conocida en la literatura ya ha sido introducida en la Sec 2.5.3, como el tiempo de relajación de Schmid t_R. Con la cual, los tiempos se pueden expresar como

$$\frac{t}{t_R} = \frac{\tau}{\tau_R}, \tag{3.22}$$

donde además es posible ver que $\tau_R = \Omega^{-1}/2 = \mathcal{H}_{c2}^{-1}$ (ver Apéndice D). Empleando estas dos escalas características (λ_L y t_R), cada una de las cantidades del programa es trivialmente adimensionalizable, resultando convenientemente en términos de cantidades físicas conocidas, como se explicita en la Tabla 3.4 para algunas magnitudes de interés. [2]

Tabla 3.4: *Formulación adimensional de las magnitudes físicas y del programa GHOST.*

Magnitud	**Expresión física**	**Expresión en GHOST**
Velocidad	$\dfrac{\vec{\boldsymbol{V}}}{V_R}$	$\dfrac{\vec{\boldsymbol{\mathcal{V}}}}{\lambda_L \mathcal{H}_{c2}}$
Inducción magnética	$\dfrac{\vec{\boldsymbol{B}}}{H_{c2}}$	$\dfrac{\vec{\boldsymbol{\mathcal{B}}}}{\mathcal{H}_{c2}}$
Densidad de corriente	$\dfrac{\vec{\boldsymbol{J}}}{J_c}$	$\dfrac{\lambda_L}{\mathcal{H}_{c2}}\vec{\mathcal{J}}$

En la Tabla 3.4, V_R es velocidad de relajación definida anteriormente (Ec. 2.43), $\mathcal{V}$ hace referencia a la velocidad del vórtice en las escalas del programa, y $\mathcal{H}_{c2}$ es el campo crítico superior en las escalas del programa. Nótese que, si se desprecia la magnetización M del estado normal,

$$B_{c2} \simeq H_{c2} \tag{3.23}$$

donde, en unidades cgs-gaussianas, H y B tienen las mismas unidades fundamentales (ver Apéndice A.1). Adicionalmente, J_c es la densidad de corriente crítica superconductora, dada por

$$J_c = \frac{cH_{c2}}{4\pi\lambda_L}, \tag{3.24}$$

y representa la máxima densidad de corriente que un superconductor puede transportar sin destruir la superconductividad.

El parámetro de orden, por otro lado, se expresa adimensionalmente como $\tilde{\psi}$, que numéricamente coincide con ψ al ser $\rho_0 = 1$ (con $[\rho_0] = [L]^{-3}$).

[2] Notar que el signo de la carga $e < 0$ induce una diferencia de signo entre las cantidades electromagnéticas del programa y sus correspondientes físicos (ver Tabla 3.1), que no es corregida con la normalización ($\mathcal{H}_{c2} > 0$).

3.3. Parámetros de la simulación

A menos que se especifique lo contrario, la mayoría de los parámetros del método permanecerán fijos en todo lo que respecta a resultados presentados en este trabajo. El detalle de estos puede encontrarse en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5: *Lista de parámetros empleados en las simulaciones.*

Tabla 1		**Tabla 2**	
Parámetro	**Valor**	**Parámetro**	**Valor**
ξ	0.06	σ'	8
κ	2	$\Omega D_\eta/D$	0.1
ρ_0	1	c_s	2
η_0	1	N_x	256
Γ_2	0.0081	N_z	256
Γ_4	1	$\Delta\tau$	0.3×10^{-3}

Este conjunto de parámetros ha demostrado ser eficiente y proporcionar soluciones estables, cumpliendo con la condición CFL (Ec. 3.6) para el sistema de ecuaciones. Si bien podría resultar de interés analizar cómo la variación de algunos de estos parámetros influencia los resultados, en esta primera aproximación la mayoría se mantendrán fijos. Por otro lado, se han realizado pruebas en simulaciones de mayor resolución, tanto espacial como temporal, obteniéndose una buena concordancia con los resultados aquí presentados. De esta manera, con el objetivo de optimizar el tiempo de cómputo, se ha priorizado la rapidez sobre la precisión, aunque los resultados pueden reproducirse fácilmente con una mayor resolución si se requiere.

Resultados experimentales reportados en la Ref. [70], indican que el parámetro de GL en el FeSe es $\kappa \simeq 72$, un valor del orden característico de los superconductores basados en hierro. En las simulaciones aquí presentadas, motivado por limitaciones numéricas[3], se ha fijado $\kappa = 2$, un valor frecuentemente empleado en la bibliografía para simulaciones de TDGL [13]. Si bien este valor no es representativo de los superconductores de esta clase, consideramos que aún permite capturar la fenomenología esencial del sistema. Simulaciones de prueba a mayores valores del parámetro de GL (y consecuentemente mayor resolución), por ejemplo $\kappa = 15$, fueron realizadas sin observar diferencias significativas.

En base a las relaciones establecidas en la Tabla 3.2, es posible re-escribir las escalas características expresadas en las Ecs. 2.37 y 2.41, en términos de los parámetros del programa, de la forma

$$\frac{l_{Eab}^2}{\xi^2} = \alpha\sigma'\kappa^2 \tag{3.25}$$

[3]Para resolver adecuadamente la estructura del vórtice, es mínimo requisito que $\xi > \Delta r$, ya que, de lo contrario, la simulación se volvería inestable. Además, para minimizar efectos de borde, se espera que $\lambda_L \ll 2\pi L$. Luego, ambos requisitos se oponen a κ, explícitamente, $\kappa = \lambda_L/\xi \ll N$. Por ejemplo, si se desea incrementar $\kappa = 50$ manteniendo $\lambda_L = 0.12$ ($\sim 1/50$ veces la longitud de la región de simulación), la longitud de coherencia debería reducirse a $\xi = 0.0024$. Para garantizar la estabilidad en este caso, la resolución requerida sería $N > 2\pi L/\xi \sim 2600$.

A fines comparativos, para los valores de los parámetros empleados (Tabla 3.5), se tiene $l_E \simeq 1.6\xi$, en contraste con los valores $l_E \simeq 0.42\xi$ y $l_E \simeq 0.29\xi$ referenciados en la Sec. 2.5. La elección de esta longitud no responde a un criterio específico, sino que resulta más bien como una consecuencia de la selección de valores adecuados para la estabilidad numérica. No obstante, como se mencionó anteriormente, no se cuenta con una referencia clara sobre cuál debería ser su valor en una simulación realista de los sistemas en estudio. Por lo tanto, nos limitamos a mantener mínimamente el orden de magnitud.

En cuanto a lo nemático refiere, la elección de la longitud de coherencia nemática, $l_\eta/\xi = 1.5$, se ha realizado cumpliendo únicamente la condición (no necesariamente realista, pero esperable) $\xi < l_\eta < \lambda_L$. Del mismo modo, la relación entre las constantes difusivas del parámetro de orden superconductor y nemático no sigue ninguna referencia específica, adoptando el valor $D_\eta/D \simeq 0.004$[4]. A pesar de la incertidumbre en la elección de los parámetros, se espera que la fenomenología cualitativa observada en los resultados se mantenga incluso en un caso más realista. Además, ante la disponibilidad de nueva información, el método desarrollado puede adaptarse de manera sencilla a una nueva selección de parámetros.

3.4. Clúster de cómputo

Las simulaciones numéricas presentadas en este trabajo se han podido llevar a cabo gracias a la utilización del Clúster de Cálculo **DIRAC** del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. En lo que se refiere al *hardware*, el clúster cuenta con 30 nodos de procesamiento *Dell PowerEdge R720xd*, 3 nodos *SuperMicro AMD 7401*, 4 nodos *Intel Core i7* y 1 nodo *Intel Core i9*. Se encuentran también disponibles 448 núcleos de cálculo, 2 TB de memoria RAM totales, 150 TB de almacenamiento físico y cuenta con sistema MPI para la división de los trabajos de procesamiento. Respecto al software, este está basado en *Linux* y cuenta con distintas distribuciones para, entre otras tareas, el control de colas de trabajo, procesamiento de datos, manejo de núcleos paralelos y múltiples librerías científicas utilizadas en cálculos de alto rendimiento.

[4] En contraposición al valor adoptado en este trabajo, una primera elección natural de este cociente resultaría de asumir un coeficiente de difusión nemática del mismo orden que el de la superconductividad, es decir, $D_\eta/D \sim 1$. Si bien este no es el caso, la construcción del protocolo desarrollado permitirá explorar diversas combinaciones de parámetros sin complicaciones adicionales, lo que se plantea como una perspectiva para estudios próximos.

Capítulo 4

Implementación del método

En el capítulo anterior, se describieron las limitaciones y dificultades asociadas a la imposición de condiciones de contorno en el método numérico. En este capítulo, presentaremos las estrategias desarrolladas para abordar este problema. En particular, trataremos la generación de interfaces superconductor-normal (S-N) mediante trampas de potencial, así como la imposición de campos y corrientes externas. Además, discutiremos una configuración inicial para un arreglo de vórtices compatible con la periodicidad del potencial vector, la cual será de especial relevancia en el siguiente capítulo.

4.1. Trampa de potencial

4.1.1. Inclusión en la energía libre

En elementos finitos, una interfaz superconductor-normal (S-N) se genera imponiendo una condición de contorno de Dirichlet al parámetro de orden superconductor $\psi|_S = 0$, lo que es similar a tener una alta densidad de defectos en la interfaz. En el método que nos concierne, no es posible imponer este tipo de condiciones directamente a la variable dinámica, por lo que adoptaremos un enfoque inspirado en técnicas utilizadas para vórtices en superfluidos. Para ello, introduciremos una trampa de potencial que confinará el parámetro de orden del superconductor a una región específica $\mathcal{R}$ dentro de nuestra caja de simulación. Esto se puede lograr añadiendo a la energía libre un término adicional de la forma,

$$F_{trap} = -\int_V dV \alpha_{GL} V_0 g_{trap}(x,z)|\psi|^2. \tag{4.1}$$

donde $g_{trap}(x,z)$ es una función necesariamente periódica, y V_0 es un parámetro que controla su amplitud. La idea general es que

$$V_0 g_{trap}(x,y) < 1 \quad \forall (x,z) \in \mathcal{R}, \qquad V_0 g_{trap}(x,z) > 1 \quad \forall (x,z) \notin \mathcal{R} \tag{4.2}$$

De esta forma, despreciando los efectos de proximidad, dentro (fuera) de $\mathcal{R}$ el material se encontrará en el estado superconductor (normal). Una forma sencilla de comprender el efecto

de este término es agrupando los términos cuadráticos de la energía libre en el parámetro de orden de superconductor (ver Ec. 2.1),

$$\alpha'_{GL}|\psi|^2 = |\alpha_{GL}|(V_0 g_{trap}(x,z) - 1)|\psi|^2. \tag{4.3}$$

Sabemos que el signo de este parámetro es el que determina si la simetría está espontáneamente rota o no (ver Fig. 2.1), es decir, se tiene

$$\begin{array}{lcll} \alpha'_{GL} < 0 & \Longleftrightarrow & V_0 g_{trap}(x,z) < 1 & \Longleftrightarrow \quad \text{Superconductor} \\ \alpha'_{GL} = 0 & \Longleftrightarrow & V_0 g_{trap}(x,z) = 1 & \Longleftrightarrow \quad \text{Transición} \\ \alpha'_{GL} > 0 & \Longleftrightarrow & V_0 g_{trap}(x,z) > 1 & \Longleftrightarrow \quad \text{Normal} \end{array} \tag{4.4}$$

Por lo tanto, esta implementación nos permite generar fácilmente una interfaz superconductor-normal. Para el problema específico que estamos considerando, asumimos que los detalles de la función trampa no influirán a los resultados finales.

Una interpretación alternativa, que debe tomarse con cierto cuidado, es pensar a la trampa como una suerte de temperatura efectiva (explícita en el parámetro $\alpha_{GL} = \alpha_0(T - T_c)$). Así, la región que se vuelve normal es aquella donde se supera el valor crítico T_c.

La incorporación de esta nueva contribución en la energía libre es lo que da lugar a la presencia de g_{trap} en la ecuación dinámica del parámetro de orden ψ, lo que ya ha sido considerado en la formulación de las ecuaciones en capítulos anteriores (ver, por ejemplo, la Ec. 2.28).

4.1.2. Funciones trampa

Las funciones adecuadas para actuar como trampa de potencial, g_{trap}, deben ser periódicas y, al mismo tiempo, anularse en una vecindad del centro de la simulación (π, π). Esto garantiza que en dicha región $g_{trap} \to 0$, y por lo tanto, $\alpha'_{GL} \approx \alpha_{GL}$ (superconductor), mientras que fuera de ella se cumple $\alpha'_{GL} > 0$ (normal). Para el propósito de este trabajo, emplearemos una función suave tipo escalón,

$$f(x) = \frac{1}{2}\left\{1 + \tanh\left(\frac{\cos[\frac{x}{L}] + \cos[\frac{p_2}{2}]}{\frac{p_1}{2}\sin[\frac{p_2}{2}]}\right)\right\} \underset{(p_1 \to 0)}{\approx} \Theta\left(\left|\frac{x}{L} - \pi\right| - \frac{p_2}{2}\right) \tag{4.5}$$

donde los parámetros p_1 y p_2 controlan la pendiente del borde y el tamaño de la trampa, respectivamente (ver el Apéndice C para más detalles sobre esta función y las limitaciones en sus parámetros), y Θ es la función escalón de Heaviside. El control preciso de esta dos características son lo que la hace destacar frente a otras posibilidades estudiadas. No obstante, presenta la desventaja de que no resulta analíticamente integrable, lo que es un inconveniente para algunas aplicaciones. Extendida al plano,

$$g_{trap}(x,z) = f(x) + f(z). \tag{4.6}$$

En la Fig. 4.1 se puede ver un gráfico de la función trampa resultante para los parámetros empleados en este trabajo, $V_0 = 2$, $p_1 = 0.07$ y $p_2 = 4.5$ (lo que equivale a un ancho de 37.5 λ_L).

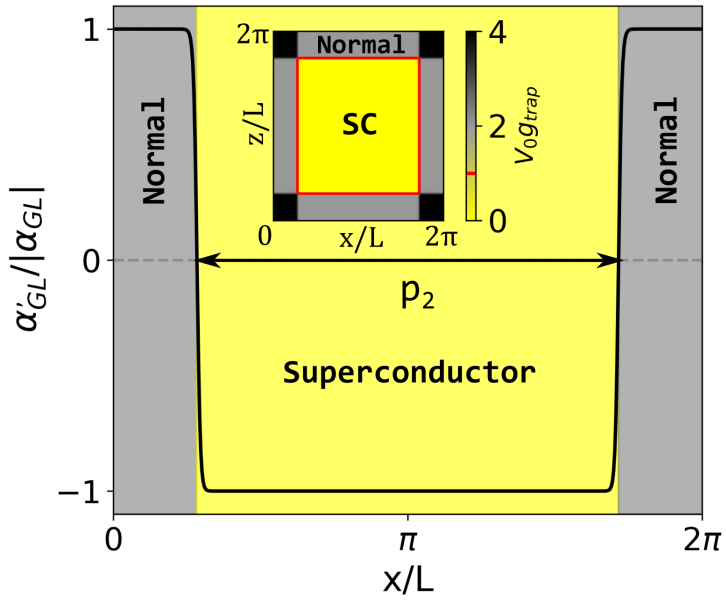

Figura 4.1: *Sección transversal de* $\alpha'_{GL}/|\alpha_{GL}| = V_0 g_{trap}(x, \pi) - 1$ *para una función trampa con* $V_0 = 2$, $p_1 = 0.07$ *y* $p_2 = 4.5$. *En el inset se muestra el gráfico de densidad de la trampa de potencial, indicando en rojo la región de transición* $V_0 g_{trap} = 1$.

4.2. Campo magnético externo

La energía libre de Helmholtz es apropiada para situaciones en las que se fija la densidad de flujo magnético B en lugar de H. El potencial termodinámico adecuado cuando se busca fijar el campo magnético H es la energía libre de Gibbs, definida mediante la transformada de Legendre

$$G = F - \frac{\vec{\boldsymbol{B}} \cdot \vec{\boldsymbol{H}}}{4\pi} \tag{4.7}$$

En la formulación de la energía libre superconductora (Ec. 2.1), este término puede incorporarse dentro de la energía magnética como

$$G_{mag} = \int dV \left[\frac{1}{8\pi} |\nabla \times \vec{\boldsymbol{A}} - \vec{\boldsymbol{H}}|^2 \right] \tag{4.8}$$

a menos de un término constante en volumen. Esta modificación de la energía libre introduce a una nueva contribución en la ecuación para el potencial vector electromagnético,

$$\frac{\boldsymbol{\rho}^{-1}}{\gamma c} \partial_\tau \vec{\boldsymbol{A}} = \frac{\hbar e}{m} \boldsymbol{\Xi} \, \mathrm{Im}[\psi^* \nabla \psi] - \frac{e^2}{mc} |\psi|^2 \boldsymbol{\Xi} \vec{\boldsymbol{A}} - \frac{c}{4\pi} (\nabla \times \nabla \times \vec{\boldsymbol{A}} - \nabla \times \vec{\boldsymbol{H}}) \tag{4.9}$$

cuyo estudio ya ha sido abordado previamente, por ejemplo, en la Ref. [71]. El último término en la Ec. 4.9 puede entenderse como la corriente de un bobinado que da lugar al campo magnético externo aplicado. A partir de esta implementación, el esquema permite analizar y modelar fenómenos como los campos críticos, la entrada de vórtices en el material superconductor, la formación de redes de vórtices [16], la presencia de impurezas magnéticas, entre otros.

4.3. Corriente externa

4.3.1. Inclusión en la dinámica

En los esquemas de elementos finitos, la condición de contorno sobre las interfaces impuesta por el flujo de una densidad de corriente externa se expresa mediante una condición de tipo Neumann sobre el potencial vector

$$-\boldsymbol{\rho}^{-1}\partial_t\vec{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} = c\,\vec{\boldsymbol{J}}_{ext}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}, \tag{4.10}$$

donde $\hat{\boldsymbol{n}}$ es la normal externa [14]. Una alternativa aplicable a nuestro método numérico, derivada directamente de la Ec. 4.9, consiste en fijar la densidad de corriente en el superconductor a partir del rotor de un campo externo $\nabla\times\vec{\boldsymbol{H}} = 4\pi\vec{\boldsymbol{J}}_{ext}/c$, idea que ha sido explorada en, por ejemplo, la Ref. [72]. Esto equivale a introducir $\vec{\boldsymbol{J}}_{ext}$ directamente en la ecuación dinámica del potencial vector, como

$$\frac{\boldsymbol{\rho}^{-1}}{c}\partial_t\vec{\boldsymbol{A}} = -c\frac{\delta F}{\delta\vec{\boldsymbol{A}}} + \vec{\boldsymbol{J}}_{ext} \tag{4.11}$$

Este enfoque permite imponer una densidad de corriente externa en toda la región simulada, funcionando como fuerza motriz para el movimiento de los vórtices. Cabe destacar que esta metodología fija la densidad de corriente en todo el dominio, lo que no siempre reproduce una configuración física realista, ya que no permite la redistribución natural de la corriente, como sí lo hace la condición de contorno de la Ec. 4.10. Sin embargo, en un superconductor, la corriente de transporte tiende a concentrarse en la superficie en una capa del orden de la longitud de penetración λ_L (ver, por ejemplo, la Ref. [14]), generando una distribución no homogénea dentro del material. En este sentido, una condición de contorno como la de la Ec. 4.10, no se ajustaría directamente a los tratamientos teóricos, donde se asume una densidad de corriente uniforme en la vecindad del vórtice. A fines del cálculo del coeficiente de arrastre viscoso ν en el régimen de *flux flow*, objetivo de esta tesis, el método aquí presentado es el que facilita este propósito.

La inclusión de este término modifica el sistema de ecuaciones a resolver por programa (Ec. 3.4), como

$$\boxed{\partial_\tau\vec{\boldsymbol{\mathcal{A}}} = (\boldsymbol{I} - c_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\sigma_3})\frac{1}{\sigma'}\left[\frac{2\alpha}{\kappa^2\xi^2\rho_0}\boldsymbol{\Xi}\,\mathrm{Im}[\psi^*\nabla\psi] - \frac{1}{\kappa^2\xi^2\rho_0}|\psi|^2\boldsymbol{\Xi}\vec{\boldsymbol{\mathcal{A}}} - \nabla\times\nabla\times\vec{\boldsymbol{\mathcal{A}}} + \vec{\boldsymbol{\mathcal{J}}}_{ext}\right]} \tag{4.12}$$

con $\vec{\boldsymbol{\mathcal{J}}}$ definido en la Tabla 3.1. En resumen, las principales diferencias entre estas ecuaciones y las utilizadas en las Refs. [17, 18] son la presencia del potencial de confinamiento, la inclusión de corrientes externas y los términos proporcionales a c_1, que representan la anisotropía de la conductividad en la fase normal.

4.3.2. Características de la densidad de corriente

Como se mencionó anteriormente, debido a la naturaleza del método, las variables dinámicas deben ser funciones periódicas dentro del dominio de simulación. En consecuencia, la densidad de corriente externa $\vec{\boldsymbol{J}}_{ext}$ introducida en la ecuación dinámica para el potencial vector no solo

debe ser periódica en sí misma, sino también obtenible de una función periódica $\vec{A}$. Esto implica, en primera instancia, que $\vec{J}_{ext}$ debe de integrar a cero a través de la región de simulación (según indica la Ec. 3.21, para una corriente externa que fluye en una única dirección). En términos más físicos, esto asegura que toda la corriente que entra también debe salir. Para este propósito, en el presente trabajo utilizamos

$$\vec{J}_{ext}(x,z) = J_0(f(x)-\zeta)\hat{e}_z \quad \text{o} \quad \vec{J}_{ext}(x,z) = J_0(f(z)-\zeta)\hat{e}_x \tag{4.13}$$

dependiendo de la dirección deseada del flujo de corriente, y siendo $f(x)$ la función *step-like* presentada en la Ec. 4.5. La constante ζ se fija de manera que $\int_0^{2\pi} dx(f(x)-\zeta) = 0$. Esta expresión entonces genera una densidad de corriente predominantemente uniforme en la región central (controlada por el parámetro de amplitud J_0)

$$\vec{J}_{ext}(\mathcal{R}) \simeq -J_0\zeta\,\hat{e}_z \quad \text{o} \quad \vec{J}_{ext}(\mathcal{R}) \simeq -J_0\zeta\,\hat{e}_x \tag{4.14}$$

y exhibe un fuerte flujo de retorno (o *backflow*) en los laterales de la región de simulación (ver Fig. 4.2). Para asegurar que el flujo de retorno ocurra por fuera del superconductor, elegimos $p_1 = 0.05$ y $p_2 = 5.8$ como parámetros de $f(x)$. Por otro lado, para una pendiente suficientemente rígida $p_1 \ll \tan[p_2/4]$, el cálculo de ζ (numérico en el caso general) puede aproximarse por

$$\zeta = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} dx\, f(x) \simeq \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} dx\,\Theta\left(|x-\pi| - \frac{p_2}{2}\right) = 1 - \frac{p_2}{2\pi} \tag{4.15}$$

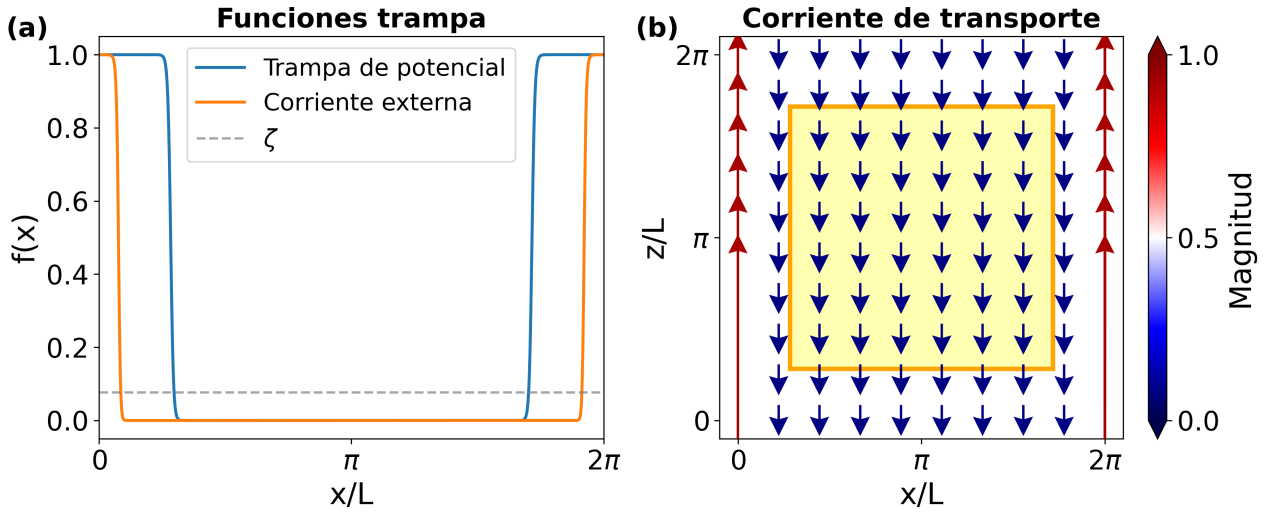

Figura 4.2: *(a) Función trampa $f(x)$ evaluada para los parámetros $p_1 = 0.07$, $p_2 = 4.5$ (trampa confinadora de $|\psi|^2$, en azul), y $p_1 = 0.05$, $p_2 = 5.8$ (densidad de corriente externa de transporte, en naranja). En gris se muestra el valor de ζ para el conjunto de parámetros correspondiente a $\vec{J}_{ext}$. (b) Densidad de corriente externa $\vec{J}_{ext}(x,z)$ evaluada en el dominio de simulación para $J_0 = 1$. El recuadro amarillo indica la región superconductora.*

4.4. Condiciones iniciales

La implementación del método numérico requiere establecer un conjunto de condiciones iniciales para las variables dinámicas, que evolucionarán en el tiempo según el sistema de ecuaciones

mediante el algoritmo de Runge-Kutta. El estudio objetivo de este trabajo involucra el análisis de la dinámica de un vórtice aislado. La construcción de la configuración inicial para este propósito, que resulta no trivial, será abordada en el próximo capítulo, mientras que aquí nos centraremos en presentar los elementos preliminares necesarios.

A menos que se especifique lo contrario, se adoptarán condiciones iniciales triviales para el parámetro de orden nemático, $\tilde{\eta}(x, z, t = 0) = \tilde{\eta}_v$ (con $\tilde{\eta}_v$ su valor de vació, dado por la Ec. 2.21), y para el potencial vector $\vec{\boldsymbol{A}}(x, z, t = 0) = 0$. Una condición inicial para ψ ampliamente utilizada en física de fluidos [73] (conocida como *Taylor-Green vortex*), viene dada por

$$\tilde{\psi}(x, z, t = 0) = \tilde{\psi}_v \frac{\lambda + i\mu}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}}{\sqrt{2}\xi}\right) \tag{4.16}$$

donde

$$\lambda = \sqrt{2}\cos(x/L), \qquad \mu = \sqrt{2}\cos(z/L) \tag{4.17}$$

son los llamados potenciales de Clebsch. Tomando el módulo cuadrado de esta función,

$$|\tilde{\psi}(x, z, t = 0)|^2 = |\tilde{\psi}_v|^2 \tanh^2\left(\frac{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}}{\sqrt{2}\xi}\right) \tag{4.18}$$

se observa que tiene un único cero en $(\lambda, \mu) = (0, 0)$, y que lejos de esta singularidad $|\tilde{\psi}|^2 \approx |\tilde{\psi}_v|^2$. Esto se mapea al espacio real, a través de la Ec. 4.17, en una configuración de cuatro defectos en el estado superconductor, ubicados en $(x, z) = (\pi \pm \frac{\pi}{2}, \pi \pm \frac{\pi}{2})$. Al evolucionar el sistema desde esta condición inicial, se forma un arreglo de vórtices y anti-vórtices (vórtices de circulación contraria), que respeta la condición de circulación nula del potencial vector $\vec{\boldsymbol{A}}$ (Ec. 3.10). En la Fig. 4.3 se ilustra la disposición final resultante de esta elección. Esta metodología de generación de vórtices fue empleada en la Ref. [17] para estudiar la interacción vórtice-vórtice, a partir de modificar el número de ceros de la Ec. 4.16.

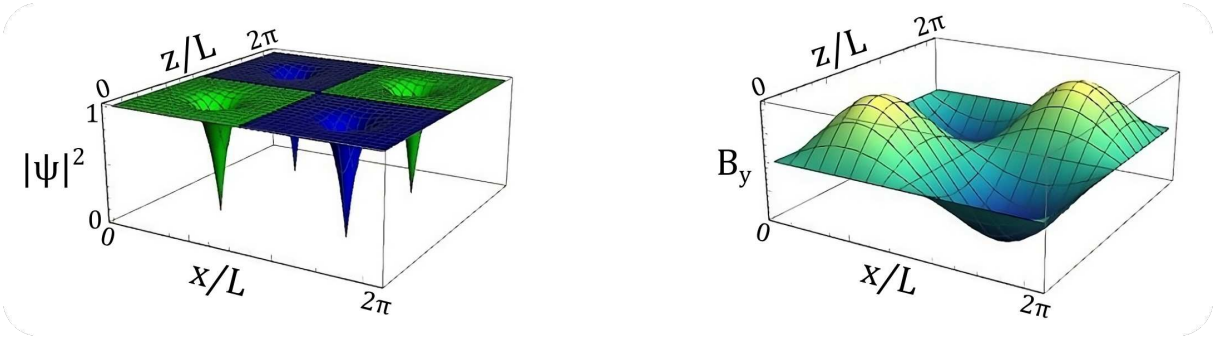

Figura 4.3: *Configuración de vórtices y anti-vórtices generada por la condición inicial de la Ec. 4.16. A la izquierda, el módulo cuadrado del parámetro de orden superconductor $|\psi|^2$. A la derecha, el campo magnético en la dirección normal al plano, B_y.*

Es importante destacar que la Ec. 4.16 no corresponden a ninguna realización física concreta desde el punto de vista de la superconductividad. Sin embargo, dado que el régimen transitorio de estructuración de los vórtices no es relevante para nuestros propósitos, esta elección resulta adecuada al cumplir las condiciones necesarias de periodicidad y topología, además de ser fácilmente implementable numéricamente.

Capítulo 5

Resistividad del flujo de vórtices en superconductores nemáticos

5.1. Modelos teóricos

El estudio de la dinámica viscosa de vórtices superconductores (*viscous flux motion*) ha sido abordado por numerosos autores a lo largo de los años. Desde una perspectiva general, se han desarrollado dos enfoques para este problema, un modelo relativamente elemental, propuesto inicialmente por Bardeen y Stephen (BS) en 1965 [47], y análisis más rigurosos realizados posteriormente por Schmid en 1966 [12], Caroli y Maki entre 1967 y 1968 [74, 75, 76], y Hu y Thompson en 1972 [77], utilizando la teoría de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo. Sin embargo, ninguno de estos estudios considera los efectos de la fenomenología de superconductores anisotrópicos, y mucho menos el rol que la nematicidad juega en ellos, dado que anteceden por varios años al descubrimiento y auge de los superconductores basados en hierro.

Con el hallazgo de los superconductores de alta temperatura crítica en 1986, en particular los cupratos como el $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, se encontró evidencia experimental de una marcada anisotropía característica de estos materiales. Esto motivó a Hao y Clem, en 1991, a estudiar el problema del movimiento de vórtices en superconductores con esta fenomenología. En la Ref. [50], ellos se abocan a extender el modelo simple de BS para incluir los efectos de dicha anisotropía. Aunque es una aproximación simplificada, el modelo de BS proporciona expresiones para la viscosidad y la resistividad del flujo de vórtices que describen cualitativamente los resultados empíricos y ofrecen una imagen simple y clara del mecanismo del movimiento viscoso de los vórtices.

Para describir la anisotropía de la superconductividad en el marco de la teoría de Ginzburg-Landau, proponen la introducción de un tensor efectivo fenomenológico en la rigidez de la fase superconductora $m_{ij} = m_i\delta_{ij}$ y una conductividad del estado normal anisotrópica $\sigma_{ij} = \sigma_i\delta_{ij}$ con los mismos ejes principales. Esto modifica las longitudes características según $\lambda_i = \lambda_L\sqrt{m_i}$ y $\xi_i = \xi/\sqrt{m_i}$, donde $i = a, b, c$ corresponden a los ejes principales de la red ortorrómbica. Bajo una serie de aproximaciones análogas a las utilizadas en la derivación de BS, de las cuales resalta en particular el límite de London (donde el parámetro de orden reducido $|\tilde{\psi}|^2$ es 1 fuera del *core* del vórtice y 0 dentro, y $\kappa \gg 1$), derivan una expresión para el coeficiente de arrastre viscoso de un vórtice aislado en el estado mixto superconductor ($H \ll H_{c2}$).

El resultado principal se resume como sigue. Llamando a (b) al vector a lo largo del eje $\hat{x}$ $(\hat{z})$ de la celda ortorrómbica (que en principio no asume una correspondencia con las direcciones largas y cortas de la red),

$$\nu_a = \frac{\Phi_0 H_{c2//3}}{4c^2}\left(\frac{m_a}{m_b}\sigma_a + 3\sigma_b\right) \tag{5.1}$$

$$\nu_b = \frac{\Phi_0 H_{c2//3}}{4c^2}\left(\frac{m_b}{m_a}\sigma_b + 3\sigma_a\right) \tag{5.2}$$

donde ν_i es la viscosidad asociada al movimiento del vórtice en la dirección i, y

$$H_{c2//3} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi_a\xi_b} \tag{5.3}$$

es el campo crítico superior a lo largo del eje perpendicular al plano ab. Generalizando la expresión de la resistividad de *flux flow*, ρ_f, para el caso isótropo (Ec. 1.5), este resultado permite estimar la resistividad en el caso anisotrópico, como

$$\rho_{f,a} = \frac{\Phi_0 B}{c^2\nu_b}, \qquad \rho_{f,b} = \frac{\Phi_0 B}{c^2\nu_a} \tag{5.4}$$

Nótese que $\rho_{f,a}$ $(\rho_{f,b})$ se relaciona con ν_b (ν_a), dado que la componente en la dirección de a (b) del campo eléctrico es inducida por el movimiento del vórtice en la dirección b (a).

Cabe destacar que esta forma simple no resultaría de una distribución estática de núcleos normales. En tal caso, las corrientes simplemente evitarían los vórtices y fluirían únicamente a través de la matriz superconductora. El movimiento de los vórtices es esencial. Dado este movimiento, resulta que la densidad de corriente normal en el *core* es exactamente igual a la corriente de transporte aplicada que impulsa el movimiento. Por lo tanto, la corriente externa de transporte fluye directamente a través de los núcleos en movimiento, generando disipación. Si la velocidad del vórtice no es la adecuada, por ejemplo, debido a otras contribuciones o a fuerzas de *pinning*, entonces estas dos densidades de corriente no son iguales a priori.

5.1.1. Incorporación de la nematicidad

La anisotropía efectiva en la rigidez superconductora considerada por Hao y Clem es, en cierto sentido comparable (pero no equivalente) a la incorporación de la nematicidad en la energía libre de Helmholtz detallada previamente, que se reescribe aquí de manera conveniente a fines de la discusión [1]

$$F = \int dV \left[\underbrace{\alpha_{GL}(1 - V_0 g_{trap} - \hat{\lambda}_2\tilde{\eta}^2)}_{\tilde{\alpha}_{GL}}|\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2}|\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2}(\vec{\boldsymbol{D}}\psi)^* \underbrace{\frac{\boldsymbol{\Xi}}{m}}_{\boldsymbol{m}^{-1}} (\vec{\boldsymbol{D}}\psi) + \frac{1}{8\pi}|\nabla\times\vec{\boldsymbol{A}}|^2 \right] \quad (F_S + F_{SN})$$
$$+ \int dV \left[\gamma_2(\nabla\eta)^2 + \gamma_3'\eta^2 + \frac{\gamma_4}{2}\eta^4\right] \quad (F_N) \tag{5.5}$$

[1] Análogo a la trampa confinadora del parámetro de orden superconductor ψ, se incluye en la expresión de la energía un término que cumple la misma función para el parámetro de orden nemático (modelado por el parámetro efectivo γ_3'), garantizando que este solo sea distinto de cero en la región superconductora. Dado que esto no influye en los resultados ni es central para la discusión, se menciona únicamente a modo de observación.

y donde se recuerda que en esta formulación

$$\boldsymbol{\Xi} = \boldsymbol{I} + \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta} & 0 \\ 0 & 1-\hat{\lambda}_1\tilde{\eta} \end{pmatrix} \tag{5.6}$$

Por otro lado, la anisotropía en la conductividad del estado normal aparece en las ecuaciones dinámicas a través el tensor

$$\boldsymbol{\rho} = \rho(\boldsymbol{I} - c_1\tilde{\eta}\boldsymbol{\sigma_3}) \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\rho}^{-1} = \sigma\begin{pmatrix} \frac{1}{1-c_1\tilde{\eta}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+c_1\tilde{\eta}} \end{pmatrix} \tag{5.7}$$

construido bajo la suposición razonable de que la anisotropía resistiva va como el parámetro de orden nemático a fines de describir la transición de fase,

$$\Delta\rho = \frac{\rho_a - \rho_b}{\rho_a + \rho_b} = \frac{\sigma_b - \sigma_a}{\sigma_a + \sigma_b} = -c_1\tilde{\eta} \tag{5.8}$$

De este modo, la generalización de la longitud de coherencia superconductora ξ, que en el caso isótropo está dada por la Ec. 2.7, se expresa como

$$\xi_i^2 = \frac{\hbar^2\Xi_{ij}}{2m|\tilde{\alpha}_{GL}|} \qquad \Rightarrow \qquad \xi_a^2 = \frac{1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}{1-\hat{\lambda}_2\tilde{\eta}_v^2}\xi^2, \quad \xi_b^2 = \frac{1-\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}{1-\hat{\lambda}_2\tilde{\eta}_v^2}\xi^2 \tag{5.9}$$

lo que muestra explícitamente la deformación del vórtice en una elipse en los ejes principales (correspondientes a la base ortorrómbica en este tratamiento), efecto de la anisotropía producto del término de acople trilineal. La principal diferencia entre esta formulación y el tratamiento de Hao y Clem radica en el origen de las anisotropías. Mientras que ellos consideran una anisotropía intrínseca del material, aquí se asume que esta surge de la ruptura espontánea de simetrías inducida por el orden nemático. En este sentido, la anisotropía en la resistividad del estado normal y en la rigidez superconductora quedan acopladas. No solo eso, sino que en nuestro tratamiento el orden nemático $\eta(x,z,t)$ es un campo dinámico, acoplado tanto al parámetro de orden superconductor ψ como al campo electromagnético $\vec{\boldsymbol{A}}$. Por esta razón, en la Ec. 5.9 las longitudes de coherencia se expresan de forma aproximada en función del valor de equilibrio $\tilde{\eta}_v$. Aun así, como primera aproximación al problema, podemos estimar el coeficiente de arrastre a partir de extender el modelo de Hao y Clem al caso nemático. Ignorando la dinámica de $\tilde{\eta}$ y tomando su valor de equilibrio[2],

$$\frac{m_a}{m_b} = \frac{\xi_b^2}{\xi_a^2} = \frac{1-\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}{1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}, \qquad H_{c2//3} = \frac{1-\hat{\lambda}_2\tilde{\eta}_v^2}{\sqrt{1-\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^2}}H_{c2}^{(iso)}, \qquad \frac{\sigma_a}{\sigma_b} = \frac{1+c_1\tilde{\eta}_v}{1-c_1\tilde{\eta}_v} \tag{5.10}$$

donde $H_{c2}^{(iso)}$ es el campo crítico superior en el caso isótropo (Ec. 2.11). Reemplazando en las Ecs. 5.1 y 5.2, luego de algunos pasos algebraicos se llega a que

$$v_a = \frac{1-\frac{1}{2}\tilde{\eta}_v(\hat{\lambda}_1+c_1)(1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v)+c_1\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^3}{(1-\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^2)^{\frac{3}{2}}(1-c_1^2\tilde{\eta}_v^2)}v_0 \tag{5.11}$$

[2]En ausencia de paredes de dominio, $\tilde{\eta}$ es un campo suave que toma un valor cercano a su valor de equilibrio $\tilde{\eta}_v$. Dentro del vórtice, $\tilde{\eta}$ aumenta (disminuye) dependiendo de si el signo de $\hat{\lambda}_2$ es positivo (negativo) [17].

$$\nu_b = \frac{1 + \frac{1}{2}\tilde{\eta}_v(\hat{\lambda}_1 + c_1)(1 - \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v) - c_1\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^3}{(1 - \hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^2)^{\frac{3}{2}}(1 - c_1^2\tilde{\eta}_v^2)}\nu_0 \tag{5.12}$$

con ν_0 el coeficiente de arrastre viscoso en el caso $\hat{\lambda}_1 = c_1 = 0$, dado por

$$\nu_0 = \nu_{BS}(1 - \hat{\lambda}_2\tilde{\eta}_v) = \nu_{BS}\frac{1 - \hat{\lambda}_2}{1 - (\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}. \tag{5.13}$$

En la Ec. 5.13, ν_{BS} es el coeficiente de Bardeen-Stephen (Ec. 1.7), y en la última igualdad se usó la expresión explícita de $\tilde{\eta}_v$ (Ec. 2.21). Como una medida de la anisotropía en la resistividad de *flux flow*, definimos

$$\Delta\nu = \frac{\nu_a - \nu_b}{\nu_a + \nu_b} = \Delta\rho_f = \frac{\rho_{f,a} - \rho_{f,b}}{\rho_{f,a} + \rho_{f,b}}, \tag{5.14}$$

que mediante las relaciones de la Ec. 5.10, se calcula como

$$\Delta\nu = \frac{-\tilde{\eta}_v(\hat{\lambda}_1 + c_1) + 2c_1\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^3}{2 - (\hat{\lambda}_1 + c_1)\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v^2} \tag{5.15}$$

De esta manera, la anisotropía en el régimen de *flux flow* está determinada por dos efectos, uno de origen geométrico, dado por el parámetro $\hat{\lambda}_1$, que define la forma elipsoidal del vórtice, y otro asociado a la anisotropía resistiva inducida por el orden nemático en el estado normal, caracterizado por el parámetro c_1. Dada la simetría bajo el intercambio de los ejes $a \rightleftharpoons b$, junto a las transformaciones $\hat{\lambda}_1 \to -\hat{\lambda}_1$ y $c_1 \to -c_1$, podemos limitar el estudio al caso $\hat{\lambda}_1 > 0$. Luego, los resultados para $\hat{\lambda}_1 < 0$ deberían obtenerse por simetría. En la Fig. 5.1, se resumen las estimaciones obtenidas por este modelo, expresadas en términos de la relación de aspecto del núcleo elíptico del vórtice,

$$a_R = \frac{\xi_a}{\xi_b} = \sqrt{\frac{1 + \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}{1 - \hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}}, \tag{5.16}$$

que vale $a_R = 1$ para un vórtice circular ($\hat{\lambda}_1 = 0$), y aumenta a medida que este se vuelve más elíptico ($\hat{\lambda}_1 > 0$).

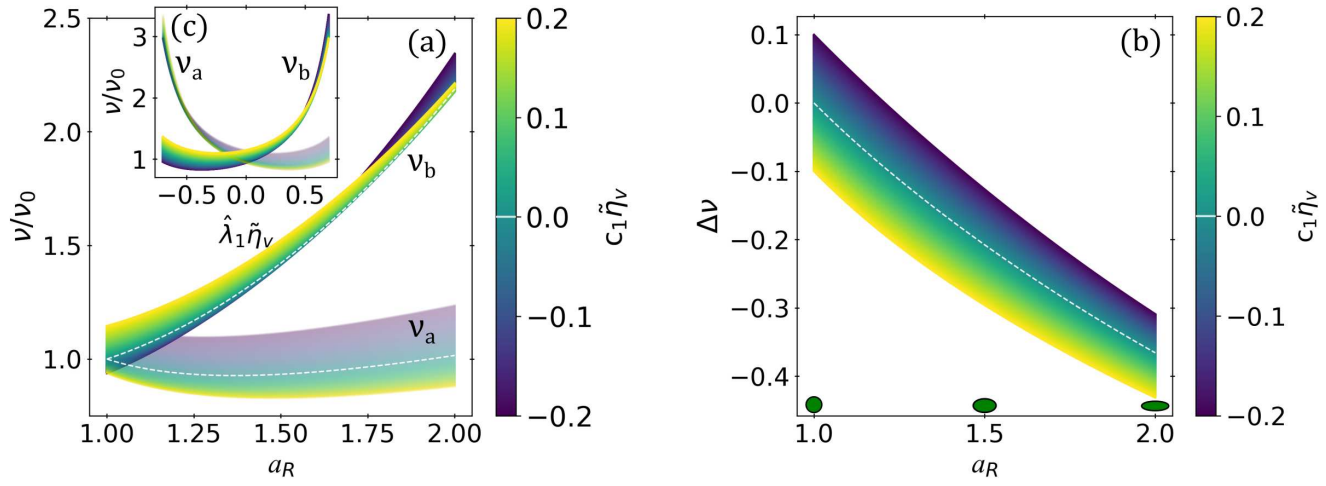

Figura 5.1: *(a) Viscosidad normalizada en los ejes principales de la celda ortorrómbica, ν_a y ν_b, coincidiendo estos con los ejes largo y corto de la elipse, respectivamente ($\hat{\lambda}_1 > 0$). El caso general se ilustra en (c), donde $\hat{\lambda}_1 < 0$ implica una inversión en la orientación del núcleo elíptico del vórtice. (b) Respuesta anisotrópica del coeficiente de arrastre viscoso. Estimaciones realizadas por el modelo de las Ecs. 5.1 y 5.2, y la Ec. 5.15.*

En lo que sigue, analizaremos este problema con un enfoque más riguroso, resolviendo las ecuaciones de TDGL y calculando numéricamente la anisotropía inducida por la nematicidad en el régimen de *flux flow*, según la Ec. 5.14. Luego discutiremos las principales diferencias de estos resultados con las estimaciones de la Fig. 5.1.

5.2. Construcción del estado de partida

El estudio de la dinámica de *flux flow* en el esquema numérico requiere de la construcción de una condición de partida estable (solución de las ecuaciones dinámicas TDGL) para un único vórtice aislado. La metodología desarrollada para este propósito parte de la configuración inicial de vórtices de *Taylor-Green* (Sec. 4.4), trasladada espacialmente en $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ a modo de tener un vórtice central y vórtices/anti-vórtices en los límites del dominio de simulación. Durante la evolución temporal gobernada por las ecuaciones TDGL (ilustrada en la Fig. 5.2), el sistema atraviesa un transitorio caracterizado por la reestructuración de los campos. En esta etapa, el término energético de la trampa de potencial (Ec. 4.1) confina el parámetro de orden superconductor a la región $\mathcal{R}$, eliminando las singularidades de $|\psi|^2$ en la frontera.

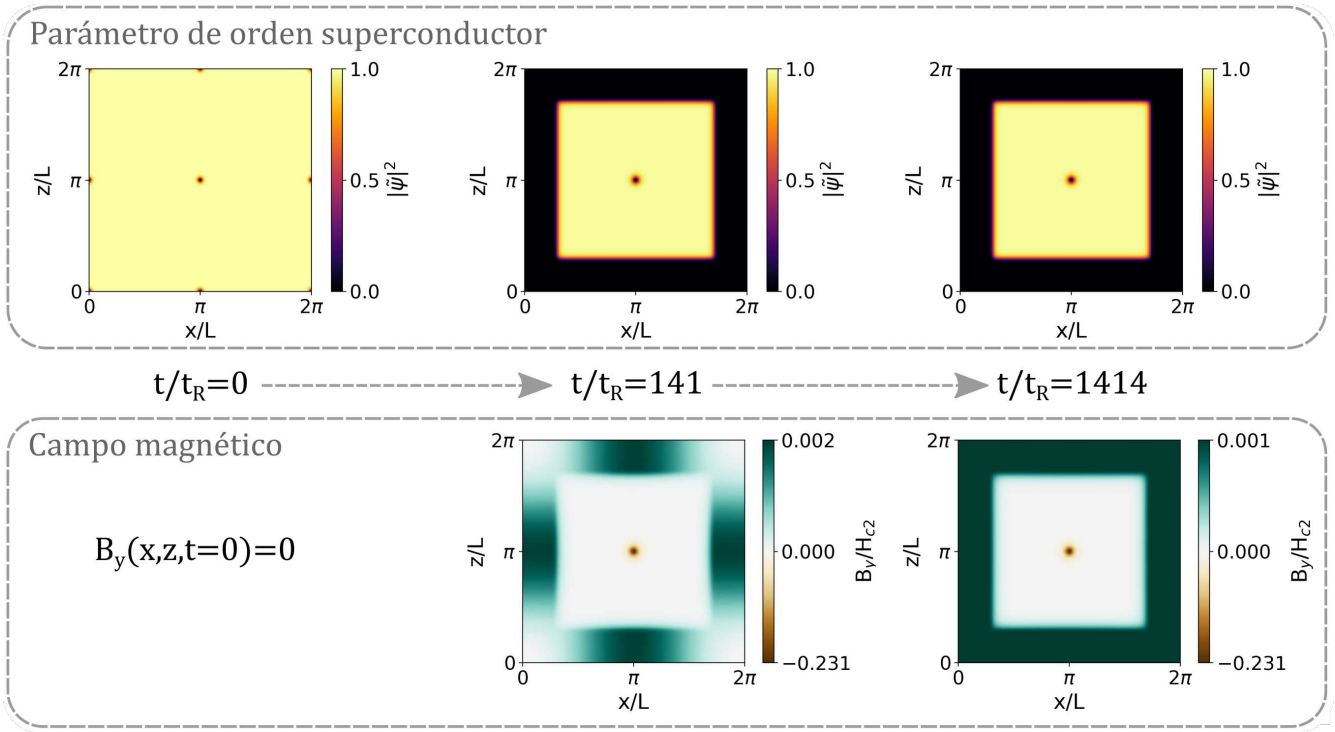

Figura 5.2: *Evolución de la condición inicial según dinámica TDGL. Se parte de la condición de vórtices de Taylor-Green (a la izquierda), y campo magnético nulo. A medida que evoluciona el sistema (sentido del tiempo hacia la derecha), el sistema pasa por un transitorio (más marcado en la redistribución del campo magnético), y llega a un estacionario (derecha) con un único vórtice circular* ($\hat{\lambda}_1 = 0$).

Alcanzado el régimen estacionario (marcado por la convergencia de la energía, obtenida de evaluar $F(\psi, \eta, \vec{A})$ a cada tiempo), se obtiene una configuración final con un único vórtice aislado, contenido dentro de la región superconductora $\mathcal{R}$, que limita a su vez con una zona metálica. El campo magnético, inicialmente nulo, evoluciona hasta establecer el estado Meissner en el

superconductor, a excepción de la vecindad del vórtice, donde apunta en la dirección $-\hat{y}$ (hacia afuera de la pantalla) e integra al cuanto de flujo Φ_0. En la región metálica, el campo magnético se uniformiza, integrando a $-\Phi_0$ (en oposición al vórtice), de manera que se satisface la condición de circulación nula del potencial vector $\vec{A}$ (Ec. 3.10).

Partiendo de este estado (construido con $c_1 = 0$, $\hat{\lambda}_1 = 0$) es que se estudiará el movimiento del vórtice inducido por el flujo de una corriente externa. Dado que los parámetros que nos resultará de interés variar son c_1, $\hat{\lambda}_1$ y $\hat{\lambda}_2$, es fundamental considerar cuidadosamente el escenario de partida. Mientras que ajustar c_1 debería resultar indiferente para la configuración de los campos, el parámetro $\hat{\lambda}_1$ transformará la estructura de los mismos deformando el vórtice en una elipse. Sin embargo, comenzando de un vórtice circular ($\hat{\lambda}_1 = 0$), la modificación de $\hat{\lambda}_1$ marca un muy breve transitorio, lo que permite el cálculo de la viscosidad tomando únicamente la velocidad terminal del vórtice. Esto evita la necesidad de construir un estado de partida para cada conjunto de parámetros $(c_1, \hat{\lambda}_1)$, simplificando la implementación. En contraste, alterar el valor del acople bicuadrático introduce una reconfiguración más compleja de los campos, por lo que, para cada valor de $\hat{\lambda}_2$, se vuelve necesario establecer una configuración de partida específica.

5.3. Dinámica del vórtice y cálculo del coeficiente de arrastre

Por convención, en adelante designaremos con el subíndice l (s) al eje mayor (menor) de la elipse. Bajo la elección de $\hat{\lambda}_1 > 0$, este corresponderá al eje a (b) de la celda ortorrómbica, el cual a su vez, en esta implementación, se orienta en la dirección $\hat{x}$ ($\hat{z}$) de la simulación.

Una vez establecida la configuración de partida, se aplica $\vec{J}_{ext}$ eligiendo su dirección de manera que coincida con el eje largo de la elipse (J_l) o con el corto (J_s)[3]. El vórtice se desplazará en consecuencia perpendicular a esa dirección[4], permitiéndonos determinar el coeficiente de viscosidad. En la Fig. 5.3 se ilustra esquemáticamente uno de estos casos particulares.

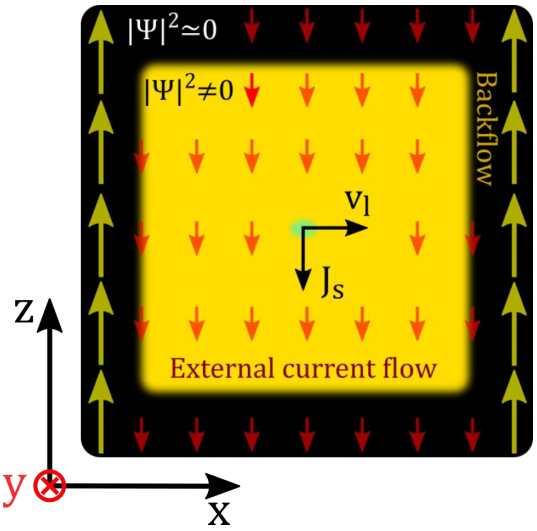

Figura 5.3: *Descripción esquemática de la dinámica del vórtice. La región superconductora ($|\psi|^2 \neq 0$) se representa en amarillo, mientras que la región normal ($|\psi|^2 \approx 0$) aparece en negro. En este caso, la densidad de corriente externa $\vec{J}_{ext}$ es aproximadamente uniforme dentro del superconductor y su dirección coincide con el eje menor del núcleo elíptico del vórtice ($\vec{J}_s$). El vórtice, en cambio, se desplaza a lo largo de su eje mayor (V_l). El campo magnético en el núcleo del vórtice apunta en la dirección $-\hat{y}$ (saliendo de la pantalla). Cabe destacar la presencia del contraflujo de corriente en los laterales de la región metálica, cuya función es cancelar la corriente neta a cero.*

[3]No debe confundirse la corriente a lo largo del eje menor J_s, con la corriente superconductora J_S
[4]Para una animación ilustrativa de este fenómeno, consultar el siguiente enlace.

Para determinar el valor de ν_l, se sigue la posición del vórtice como función del tiempo (para detalles consultar el Apéndice E). Ejemplo de este procedimiento se muestra en la Fig. 5.4 para un valor particular de la relación de aspecto a_R y del resto de parámetros.

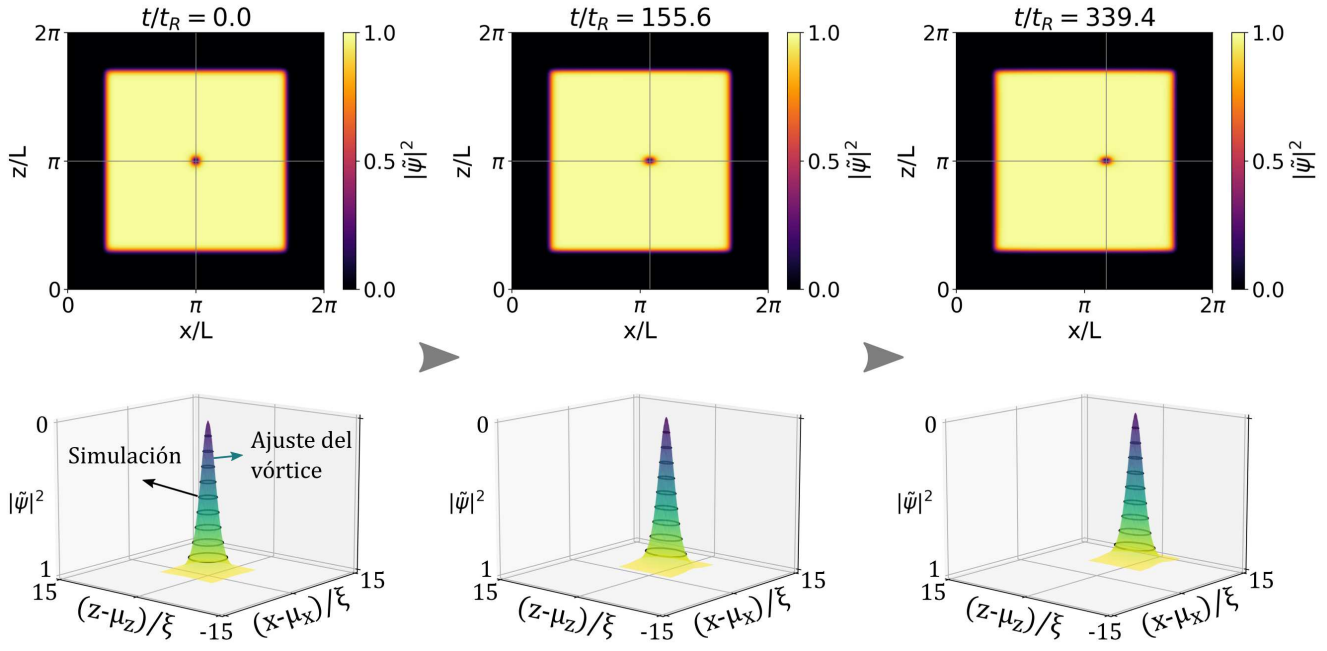

Figura 5.4: *Evolución temporal de la dinámica TDGL (sentido del tiempo hacia la derecha) de un vórtice elíptico ($\hat{\lambda}_1 = 0.4$) aislado, impulsado por el flujo de una corriente externa $J/J_c \simeq 0.014$. En la primera fila se muestra el mapa de densidad del módulo cuadrático del parámetro de orden, $|\psi|^2$, donde las líneas grises indican la posición del centro del vórtice, determinada mediante el ajuste descrito en el Apéndice E. En la segunda fila, una representación 3D de la estructura del vórtice obtenida a partir del ajuste mencionado, con contornos en negro que corresponden a los datos de la simulación. Parámetros: $c_1 = 0$, $\hat{\lambda}_2 = 0.01$.*

En la Fig. 5.5 (a), se presentan las trayectorias de un vórtice elíptico en función de la amplitud de la densidad de corriente externa. De la pendiente de estas trayectorias (en el régimen lineal), es posible determinar la velocidad de arrastre V_l correspondiente para cada corriente. En la Fig. 5.5 (b), la velocidad V_l como función de J_s es graficada para diferentes elipsidades. Usando la relación entre ambas cantidades en el régimen de *flux flow* (Ec. 1.4)

$$\nu_l = \frac{\Phi_0 J_s}{c V_l},$$

y expresándola adimensionalmente en términos de las magnitudes del programa (siguiendo las expresiones de la Tabla 3.4), se tiene

$$\frac{\nu_l}{\nu_{BS}} = \frac{c J_s}{\sigma V_l H_{c2}} = \frac{\mathcal{J}_s}{\sigma' \mathcal{V}_l \mathcal{H}_{c2}} \qquad \text{donde} \qquad \mathcal{J}_s \simeq \mathcal{J}_0 \zeta. \tag{5.17}$$

De esta manera, somos capaces de extraer el valor del coeficiente de viscosidad ν_l/ν_{BS} a partir del claro comportamiento lineal de los datos, como se muestra en la Fig. 5.5 (c).

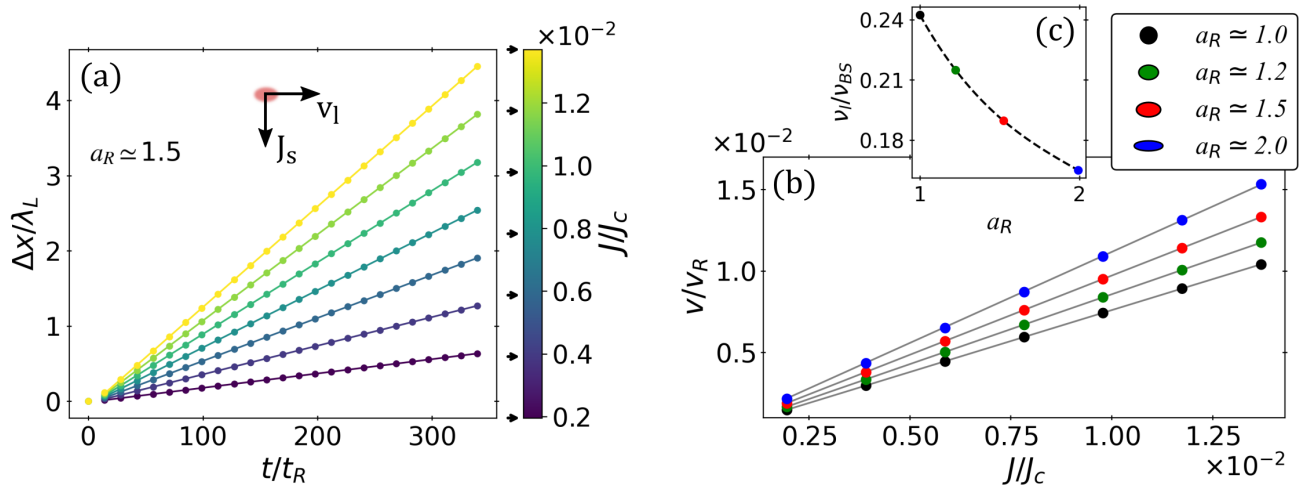

Figura 5.5: *(a) Trayectoria de un vórtice elíptico con $a_R \simeq 1.5$ ($\hat{\lambda}_1 = 0.4$) en función del tiempo para distintas amplitudes de la corriente externa. La corriente se aplica a lo largo del eje menor (J_s), lo que induce el movimiento del vórtice a lo largo de su eje mayor (V_l). La línea continua representa un ajuste lineal de los datos. (b) Velocidad de arrastre V_l en función de J_s para un vórtice circular ($a_R = 1$) y tres elipsidades diferentes ($a_R \simeq 1.2, 1.5, 2$). La pendiente obtenida del ajuste lineal es inversamente proporcional a la viscosidad, cuyo valor se muestra en (c). Los parámetros de esta simulación ilustrativa del método son $\hat{\lambda}_2 = 0.01$ y $c_1 = 0.0$.*

5.4. Resultados numéricos de la viscosidad de flux flow

El procedimiento descrito en la sección anterior fue realizado para diferentes relaciones de aspecto a_R considerando tanto valores positivos como negativos de c_1 (tales que $\Delta\rho = \pm 10\,\%$, en base a referencias experimentales), y aplicando corrientes externas en ambas direcciones J_s y J_l. Los resultados obtenidos para un acople bi-cuadratico cercano a cero, $\hat{\lambda}_2 = 0.01$, se resumen en la Fig. 5.6 (a). En la Fig. 5.6 (b) se muestra la correspondiente anisotropía viscosa $\Delta\nu$.

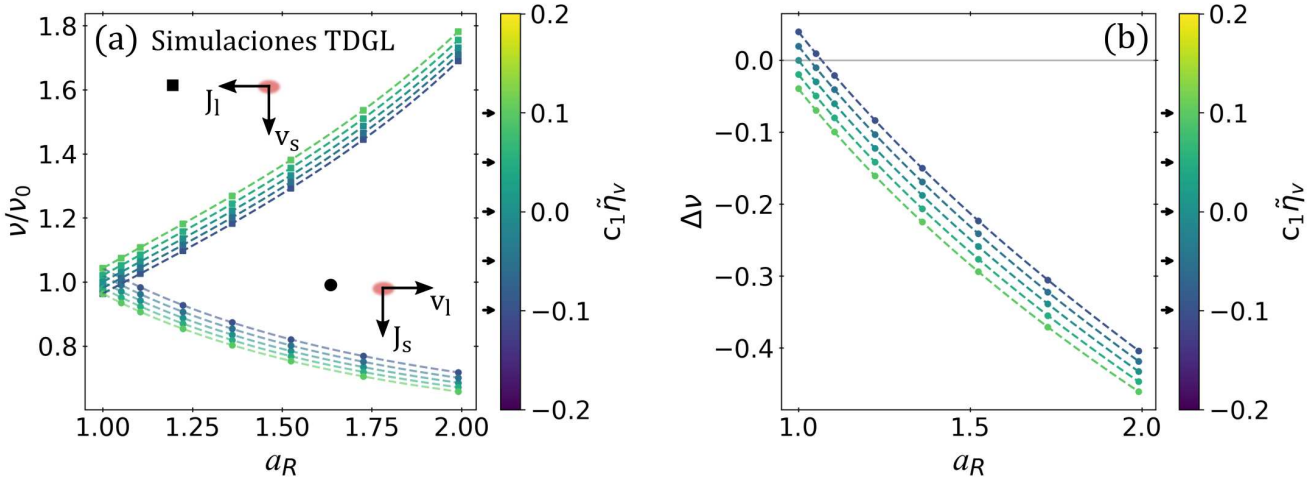

Figura 5.6: *(a) Viscosidades ν_s (■) y ν_l (•) en función de la relación de aspecto a_R del vórtice. (b) Anisotropía viscosa $\Delta\nu$ en función de a_R. Se consideran cinco valores de anisotropía resistiva del estado normal, $c_1 = \{0, \pm 0.05, \pm 0.1\}$. Las líneas punteadas son únicamente una ayuda visual que marca la tendencia de los datos. Parámetros: $\hat{\lambda}_2 = 0.01$.*

En términos cualitativos, los resultados exhiben una tendencia coherente con las predicciones del modelo (Fig. 5.1), aunque presentan discrepancias notables. Una de las más evidentes es la diferencia en la dependencia con c_1. En la Fig. 5.6, las curvas aparecen casi paralelas y equiespaciadas, lo que sugiere un comportamiento aproximadamente lineal con c_1. En contraste, en la Fig. 5.1 (a) se observa una dinámica más compleja, caracterizada por el cruce de bandas en ν_b (ν_l). Para facilitar la comparación, en la Fig. 5.7 se ilustra el caso representativo $c_1 = 0.0$, mostrando los datos de la simulación y la estimación teórica con escalas independientes. En primer lugar, al analizar las viscosidades individuales a lo largo de los ejes, se aprecia una desviación significativa respecto al modelo, siendo esta más marcada en la componente ν_l de la viscosidad. Sin embargo, la dependencia funcional de la anisotropía viscosa $\Delta\nu$ con la elipticidad del vórtice, parametrizada por a_R, parece ajustarse razonablemente, aunque con diferencias cuantitativas significativas.

Un aspecto interesante de la Fig. 5.6 (b) es que, para valores negativos de c_1, $\Delta\nu$ cambia de signo. Esto sugiere una competencia entre el factor geométrico y la anisotropía resistiva del estado normal, en concordancia con lo observado en la Fig. 5.1.

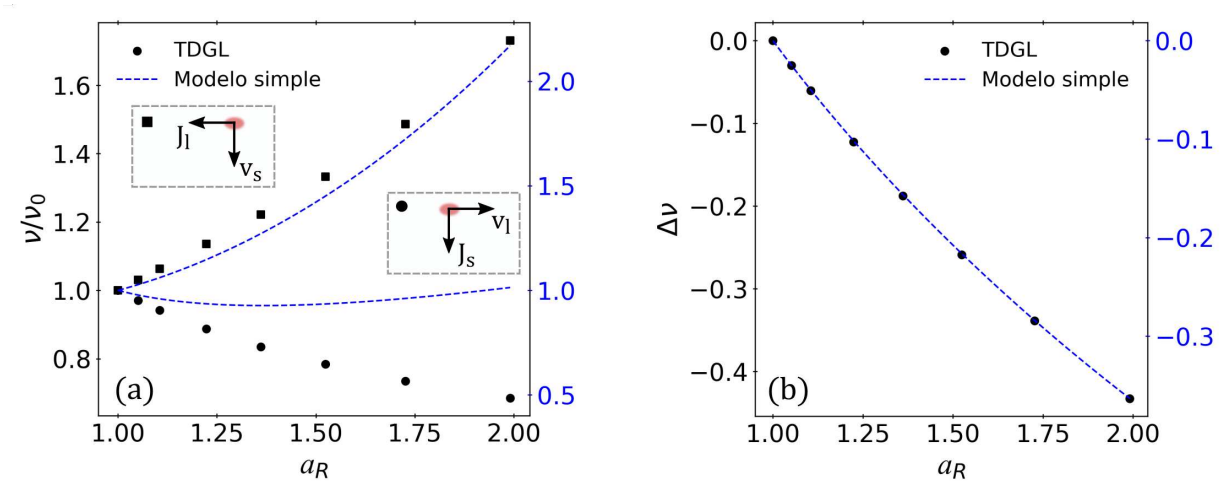

Figura 5.7: *Comparación directa entre los coeficientes de arrastre viscoso ν_s (■) y ν_l (●) (a) y la anisotropía viscosa $\Delta\nu$ (b) derivados de la dinámica TDGL (eje vertical izquierdo, en negro), y su estimación por el modelo simple de las Ecs. 5.1, 5.2 y 5.15 (eje vertical derecho, en azul). Parámetros: $\hat{\lambda}_2 = 0.01$, $c1 = 0.0$.*

Las discrepancias entre los resultados numéricos y las estimaciones simplificadas del modelo se vuelven aún más evidentes para valores elevados de $\hat{\lambda}_2$. Según las Ecs. 5.1 y 5.2, el modelo predice que el coeficiente ν_i/ν_0 no depende del acoplamiento bi-cuadrático. Sin embargo, las simulaciones presentadas en la Fig. 5.8, correspondientes al caso representativo $c_1 = 0.0$, revelan lo contrario. Tanto la dependencia funcional de los coeficientes de arrastre como su anisotropía se ven significativamente afectadas. Esto es consistente con la expectativa de que un acople más intenso refuerza la influencia de la nematicidad y su carácter como campo dinámico, alejando aún más la descripción TDGL de los supuestos del modelo.

Prosiguiendo con las comparaciones, la Tabla 5.1 presenta los valores del coeficiente de viscosidad en ausencia de anisotropías ($\hat{\lambda}_1 = c_1 = 0$), ν_0, expresado en términos del coeficiente de Bardeen-Stephen (ν_{BS}), para diferentes valores de $\hat{\lambda}_2$. A partir de estos datos, se evidencia una discrepancia significativa en términos cuantitativos (oculta en las figuras previas debido a la normalización por ν_0) entre los resultados numéricos obtenidos a partir de las simulaciones TDGL y la predicción

teórica. Si bien la Ec. 5.13 captura en términos generales la variación de ν_0 con $\hat{\lambda}_2$, se observa un factor que varía alrededor de ~ 3 (dentro del orden de magnitud).

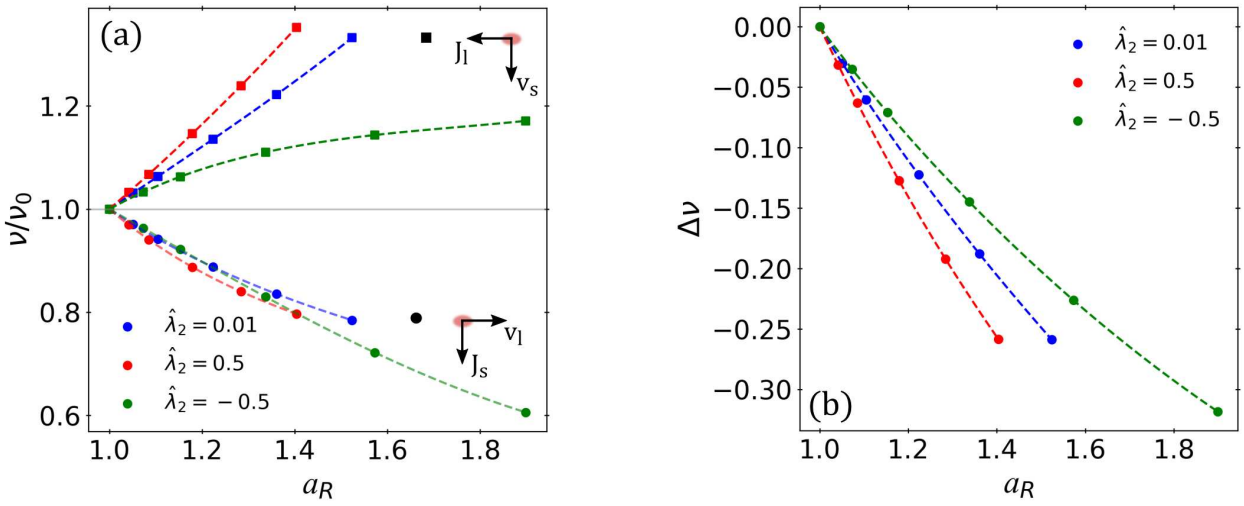

Figura 5.8: *(a) Viscosidades ν_s (■) y ν_l (●) en función de la relación de aspecto a_R del vórtice para $c_1 = 0.0$ fijo, y diferentes valores de $\hat{\lambda}_2$. La Anisotropía viscosa $\Delta\nu$ correspondiente a estos datos se muestra en (b). Se toman valores del parámetro geométrico $\hat{\lambda}_1 = \{0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4\}$.*

Tabla 5.1: *Resultados numéricos del coeficiente de arrastre viscoso en el régimen de flux flow para el caso $\hat{\lambda}_1 = c_1 = 0$ (ν_0). Se compara con la estimación teórica.*

$\hat{\lambda}_2$	ν_0/ν_{BS}	
	TDGL	**Ec. 5.13**
-0.5	0.75	2.00
0.01	0.24	0.99
0.5	0.22	0.67

De momento, no se dispone de una estimación estadística de la incertidumbre asociada a los resultados presentados. Una posible estrategia para abordar esta cuestión sería realizar simulaciones con mayores resoluciones espaciales y temporales, analizando la convergencia de los resultados en función de estos parámetros. Sin embargo, esto implicaría un esfuerzo mayor en términos de tiempos de cómputo. Por lo tanto, una estimación rigurosa de las incertezas excede el objetivo de estas tesis.

5.5. Discusión

La implementación del método TDGL permitió abordar el problema de la dinámica de vórtices en el régimen de *flux flow* desde una perspectiva más rigurosa que el tratamiento teórico convencional, evitando suposiciones restrictivas como el límite de London en el modelo analítico de Hao y Clem [50], lo que posibilita una exploración más amplia de la dependencia con los parámetros. Así, presentamos un procedimiento relativamente accesible que permite calcular numéricamente,

y sin un costo computacional elevado, el coeficiente de viscosidad en una amplia variedad de sistemas (bajo una elección adecuada de parámetros), con una implementación particular mostrada en este trabajo.

A partir de este enfoque, obtuvimos resultados que revelan múltiples diferencias con los modelos teóricos más simples, pero que mantienen la fenomenología en términos generales. Entre los principales resultados presentados, se destaca que, para $c_1 < 0$, los efectos geométricos y de la resistividad en el estado normal sobre la anisotropía viscosa se refuerzan mutuamente. En contraste, para $c_1 > 0$, estos efectos compiten, dando lugar a un caso particular en el que se anulan exactamente. Además, resulta llamativo que, al menos en los datos analizados, la magnitud de $\Delta\nu$ sea comparable a la de a_R. Esto sugiere que dicho efecto podría ser accesible experimentalmente. Por último, destacamos el papel fundamental que cumple la nematicidad como campo dinámico en la determinación de la anisotropía.

Concluimos esta sección con algunas observaciones y la discusión de ejemplos concretos en materiales reales. Uno de los superconductores basados en Fe más estudiados es el compuesto FeSe. En este material, se han obtenido imágenes claras de vórtices (ver Fig. 1.5), mediante técnicas de STM. De dicho estudio, se observa que los vórtices están alineados con los ejes ortorrómbicos, con el eje elíptico más largo a lo largo del eje ortorrómbico menos extenso. Por otro lado, señalamos que, según la literatura, no existe una correlación clara entre el signo de c_1 (que indica qué eje de la red es más resistivo) y la distorsión ortorrómbica. Por ejemplo, la Ref. [78] informa que el eje ortorrómbico más largo es más resistivo que el más corto desde $90\,K$ hasta $40\,K$, pero esta tendencia se invierte desde $40\,K$ hasta $T_c \sim 9\,K$. En contraste, la Ref. [32] no reporta este cambio de signo. Por lo tanto, la correlación entre el signo de la anisotropía resistiva y la alineación del núcleo del vórtice sigue siendo un tema de debate.

En el caso de la familia BaFeCoAs, no se tiene conocimiento de estudios de imágenes de vórtices que reporten elipticidad, lo que deja incierto si las técnicas utilizadas carecen de la resolución suficiente para observarla o si el acople tri-lineal (Ec. 2.16) está ausente en estos materiales, como sugieren los experimentos de transporte en compuestos dopados óptimamente bajo tensión [38].

Además, aún falta una estimación confiable de la anisotropía resistiva propia en la fase ortorrómbica normal de estos materiales. La interpretación de los datos experimentales es complicada, en parte debido a las múltiples contribuciones a la resistividad (como las paredes de dominio), y también por la gran elasto-resistividad y la dificultad de controlar con precisión la deformación absoluta de la muestra superconductora. No obstante, como una estimación razonable, anisotropías resistivas de hasta un 10 % (en valor absoluto) parecen plausibles en FeSe.

Las paredes de dominio nemáticas también modifican drásticamente la física de los vórtices en el estado superconductor [49, 18]. En la última década, se han desarrollado [79, 80] y utilizado [81, 38, 78] nuevos dispositivos para demaclar cuidadosamente las muestras, aplicando tensión/-deformación uniaxial controlada a bajas temperaturas, logrando un único dominio nemático. De este modo, experimentos realizables en el Laboratorio de Bajas Temperaturas (LBT-FCEyN-UBA) [37, 38], permitirían explorar la anisotropía intrínseca de la viscosidad del flujo de vórtices en el estado mixto superconductor. Lo cual forma parte del proyecto futuro del grupo.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectiva a futuro

El flujo de vórtices libre (régimen de *flux flow* puro) constituye uno de los mecanismos de transporte más fundamentales en la fase superconductora, aunque representa una situación física altamente idealizada. En un caso realista, el transporte se ve afectado por diversos tipos de desorden, fluctuaciones térmicas e interacciones entre vórtices. Si bien no está claro si todos estos efectos son simplemente aditivos, un enfoque teórico ampliamente utilizado para su estudio involucra simulaciones de dinámica molecular, en las cuales los vórtices se tratan como partículas puntuales gobernadas por la ecuación

$$\vec{f}_{i,vv} + \vec{f}_{i,dis} + \vec{f}_{i,T} + \vec{f}_{ext} + \vec{f}_{i,\nu} = 0, \tag{6.1}$$

donde los distintos términos representan, respectivamente, las interacciones vórtice-vórtice, las interacciones con el desorden, las fluctuaciones térmicas, la fuerza ejercida por una corriente externa y, finalmente, el arrastre viscoso, dado por $\vec{f}_{i,\nu} = -\nu\vec{V}_L$. Algunas de estas fuerzas han sido estudiadas en trabajos previos del grupo [17], mientras que otras, como las debidas a los centros de anclaje (*pinning*) y la inclusión de efectos térmicos, se prevé abordarlas en investigaciones futuras. Aunque este enfoque es altamente simplificado, proporciona información cualitativa valiosa sobre los complejos regímenes dinámicos que caracterizan la materia de vórtices y el transporte en superconductores realistas.

En este trabajo, hemos investigado el movimiento de vórtices en superconductores nemáticos utilizando el formalismo TDGL y analizado numéricamente el coeficiente de viscosidad. Nuestros resultados sugieren que, para capturar adecuadamente los efectos de la nematicidad, es necesario modificar este enfoque de manera mínima pero fundamental. En particular, se requiere reemplazar el coeficiente escalar ν por un tensor $\boldsymbol{\nu}$ en la fuerza de arrastre, es decir, $\vec{f}_{i,\nu} = -\boldsymbol{\nu}\vec{V}_L$. Como hemos discutido en secciones anteriores, el carácter tensorial de $\boldsymbol{\nu}$ tiene dos orígenes, un factor geométrico (asociado a la elipticidad del núcleo del vórtice) inducido por el acople superconductor-nemático, y la anisotropía en la conductividad de la fase metálica. Además, sería interesante también explorar la posible existencia de términos no diagonales en $\boldsymbol{\nu}$, relacionados con la física del efecto Hall.

Nuestros resultados [82] indican que la nematicidad puede inducir anisotropías de transporte pronunciadas en el régimen de *fluw flow*, proporcionando una firma clara y definitiva del orden nemático en la fase mixta de los superconductores basados en Fe. Esto establecería un criterio sólido para identificar la superconductividad nemática a través de mediciones de transporte en la

fase superconductora. Además, si bien la interacción entre deformación elástica y anisotropía ha sido ampliamente estudiada en la fase metálica, pocos estudios han abordado este tema en la fase superconductora. Nuestros resultados sugieren que una interacción similar podría detectarse en esta fase y manifestarse en distintas propiedades observables. Por ejemplo, a_R podría controlarse activamente mediante deformación elástica. Si este es el caso, este ajuste podría proporcionar un método para la detección experimental de la elasto-resistividad anisotrópica de *flux flow*.

Como perspectiva global a futuro, nos proponemos extender el método al estudio de problemas más complejos, con el objetivo de modelizar situaciones que se vinculen directamente con resultados experimentales. Para ello, una posible extensión directa del tratamiento consiste en la inclusión de efectos térmicos, incorporando la temperatura T como un campo dinámico cuya evolución esté gobernada por una ecuación disipativa del tipo Fourier, $\partial_t T = \alpha \nabla^2 T$, con α la constante de difusividad térmica. Por otro lado, también sería de interés considerar la interacción con grados de libertad elásticos [38], introduciendo la deformación en la energía libre de Helmholtz y describiendo su acople con la superconductividad, siguiendo un enfoque similar al de la Ref. [83]. Finalmente, la metodología desarrollada en la Sec. 4.1 ofrece un posible marco para incorporar impurezas o defectos fijos en el tiempo dentro del sistema físico (*quenched disorder*). En un superconductor con impurezas, este desorden puede inducir fenómenos como el *pinning* de vórtices, donde estos quedan atrapados por defectos en la estructura del material, alterando sus propiedades de transporte. Investigaciones en esta dirección están previstas para futuros trabajos.

Apéndice A

Unidades y escalas

A.1. Sistema Gaussiano-cgs

Las unidades utilizadas en este trabajo corresponden al sistema Gaussiano-cgs, en el cual

$$\epsilon_0 = \mu_0 = 1 \tag{A.1}$$

En este sistema, las unidades fundamentales son $[L]$ = cm (centímetros), $[M]$ = g (gramos) y $[T]$ = s (segundos). Las unidades de inducción magnética y campo magnético son, respectivamente, $[B]$ = G (Gauss) y $[H]$ = Oe (Oersted). La relación entre el Oersted y el Gauss viene dada por

$$\mu_0 \cdot 1 \text{ Oe} = 1 \text{ G} \tag{A.2}$$

por lo que, en el vacío, se cumple que

$$B = H \tag{A.3}$$

En la Tabla A.1 se resumen las unidades de algunas cantidades de importancia, así como su descomposición en la base fundamental del sistema cgs. Por otro lado, en la Tabla A.2 se exponen los valores de las constantes físicas relevantes, tanto en unidades Gaussianas-cgs, como en unidades del sistema internacional.

A partir de los registros de la Tabla A.1, se derivan las unidades de la magnitud que relaciona las variables dinámicas del programa con las físicas,

$$\frac{[e]}{[m][c]} = \frac{\text{cm}^{1/2}}{\text{g}^{1/2}} \tag{A.4}$$

de modo que resulta directo observar que

$$[\mathcal{A}] = \frac{[e]}{[m][c]}[A] = \frac{\text{cm}}{s} \tag{A.5}$$

tiene unidades de velocidad.

Tabla A.1: *Unidades en el sistema Gaussiano-cgs y su descomposición en unidades base.*

Cantidad	Símbolo	Unidades cgs	Descomposición en cgs
Longitud	L	cm	cm
Masa	M	g	g
Tiempo	T	s	s
Carga eléctrica	q	statC	$\mathrm{cm}^{3/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
Campo eléctrico	E	statV/cm	$\mathrm{cm}^{-1/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
Potencial vector	A	statV	$\mathrm{cm}^{1/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
Inducción magnética	B	G	$\mathrm{cm}^{-1/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
Campo magnético	H	Oe	$\mathrm{cm}^{-1/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-1}$
Densidad de corriente	J	$\mathrm{statA/cm}^2$	$\mathrm{cm}^{-1/2} \cdot \mathrm{g}^{1/2} \cdot \mathrm{s}^{-2}$
Energía	E	erg	$\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{g} \cdot \mathrm{s}^{-2}$
Fuerza de Lorentz	F	dyn	$\mathrm{cm} \cdot \mathrm{g} \cdot \mathrm{s}^{-2}$
Viscosidad	ν	P	$\mathrm{cm}^{-1} \cdot \mathrm{g} \cdot \mathrm{s}^{-1}$

Tabla A.2: *Valores de constantes físicas en el sistema Gaussiano-cgs y SI.*

Physical	cgs	SI
$\hbar$	1.055×10^{-27} erg · s	1.055×10^{-34} J · s
c	2.998×10^{10} cm/s	2.998×10^{8} m/s
e	9.606×10^{-10} statC	3.204×10^{-19} C

A.2. Escalas del programa

La presencia de la velocidad del sonido como parámetro del programa, heredada de la formulación original de GHOST y relacionada con el resto de los parámetros mediante

$$c_s = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}\xi^3\kappa^2\rho_0}}_{adimensional}\left(\frac{\hbar c^2}{4\pi e^2}\right), \tag{A.6}$$

supone un inconveniente en cuanto a la aplicación del método a superconductividad. Esto se debe a que la magnitud que define la escala de c_s, es $\hbar c^2/e^2 \simeq 8.1 \times 10^{10}$ cm/s, considerando los valores conocidos de $\hbar$, c y e (ver Tabla A.2). De este modo, si se fijara únicamente $\kappa \sim 1$ y se permitiera que c_s estuviera determinado por la Ec. A.6, de manera consistente con las constantes físicas, entonces se tendría $c_s \sim 10^{12}$.

Valores de esta escala tienden generar problemas numéricos, como pérdida de precisión en cálculos que involucren diferencias pequeñas entre términos de magnitudes similares (cancelación catastrófica) o dificultades al manejar intervalos de tiempo muy pequeños en relación con las escalas espaciales del sistema. Para evitar estas complicaciones, adoptamos un enfoque diferente, en el que κ se incorpora a la lista de parámetros, de modo que $\{c_s, \xi, \rho_0, \kappa\}$ se fijan de manera independiente. Esto puede interpretarse como un re-escaleo de las dimensiones físicas, tales que $\hbar c^2/e^2$ adopta el valor necesario para satisfacer la Ec. A.6. En consecuencia, las escalas de la simulación no son físicas y, por lo tanto, los resultados derivados de ella requieren de un re-escaleo (compatible con la Ec. A.6) o adimensionalización para su comparación con datos realistas. En esta clase de problemas, estas dificultades suelen eludirse expresando el conjunto de ecuaciones en su formulación adimensional [17]. Sin embargo, como se ha comentado previamente, por razones históricas de la construcción del método aquí empleado, este no es el caso de este trabajo. No obstante, se prevé en el futuro una reconstrucción del método para adoptar dicho enfoque.

Apéndice B

Soluciones compatibles del potencial vector

La inducción magnética $\vec{\boldsymbol{B}}$ viene dado por el rotor del potencial vector $\vec{\boldsymbol{A}}$,

$$\nabla \times \vec{\boldsymbol{A}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \underbrace{(\partial_y A_z - \partial_z A_y)}_{B_x} \hat{x} + \underbrace{(\partial_z A_x - \partial_x A_z)}_{B_y} \hat{y} + \underbrace{(\partial_x A_y - \partial_y A_x)}_{B_z} \hat{z} \tag{B.1}$$

Dado que en el problema se considera simetría de traslación en $\hat{y}$, y que las corrientes solo están contenidas en el plano xz, entonces es esperable que el campo magnético solo tenga componente no nula en la dirección $\hat{y}$, es decir, $B_x = B_z = 0$. De forma que debe cumplirse,

$$(\partial_y A_z - \partial_z A_y) = (\partial_x A_y - \partial_y A_x) = 0 \tag{B.2}$$

Una solución compatible con esta condición es tomar $A_y = 0$, y en consecuencia $\partial_y A_z = \partial_y A_x = 0$, es decir, se elimina la dependencia en y de las otras variables dinámicas. De esta manera, haciendo un abuso de notación se simplifica $\vec{\boldsymbol{A}} = (A_x, A_z)^t$, y

$$\nabla \times \vec{\boldsymbol{A}} = (\partial_z A_x - \partial_x A_z)\hat{y} = \vec{\boldsymbol{B}} \tag{B.3}$$

Apéndice C

Trampa hiperbólica

Considérese la función trampa unidimensional,

$$f(x) = \frac{1}{2}\left\{1 + \tanh\left(\frac{\cos[x] + \cos[\frac{p_2}{2}]}{\frac{p_1}{2}\sin[\frac{p_2}{2}]}\right)\right\} \tag{C.1}$$

Para valores adecuados de los parámetros, esta función se asemeja a un escalón que varía entre 0 y 1 (ver Fig. C.1).

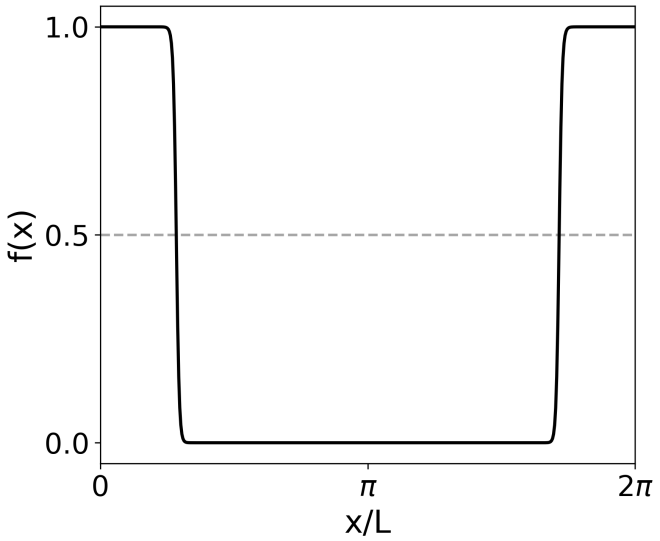

Figura C.1: *Función trampa con $p_1 = 0.07$ y $p_2 = 4.5$.*

Definiendo los bordes de la trampa mediante la condición $f(x) = 1/2$, su ancho resulta ser exactamente p_2,

$$f\left(\pi \pm \frac{p_2}{2}\right) = \frac{1}{2}, \tag{C.2}$$

y se encuentra centrada en $x/L = \pi$. Notar que el ancho de la trampa no necesariamente determina la región superconductora, la cual esta dada por (ver Ec. 4.4)

$$f(\partial SC) = \frac{1}{V_0}. \tag{C.3}$$

Si $V_0 = 2$, como en este trabajo, entonces ambos coinciden. Por otro lado, el parámetro p_1 controla la suavidad de la transición, tendiendo a la función escalón cuando $p_1 \to 0$. En particular, p_1 está relacionado con la pendiente en los bordes de la trampa,

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=\pi\pm\frac{b}{2}} = \pm\frac{1}{p_1} \tag{C.4}$$

Cabe destacar que en el centro de la trampa, la función $f(x)$ tiende asintóticamente a cero para un gran rango del conjunto de parámetros, pero no se anula exactamente, es decir,

$$f(\pi) \neq 0. \tag{C.5}$$

Por ello, es necesario elegir con cuidado los valores de p_1 y p_2. Para garantizar que $f(\pi)$ no supere un valor crítico $c/2$, se impone la condición

$$f(\pi) \leq \frac{c}{2}. \tag{C.6}$$

Resolviendo esta desigualdad a partir de la Ec. C.1, se obtiene la restricción sobre p_1

$$p_1 \leq \frac{2\tan[\frac{p_2}{4}]}{\operatorname{arctanh}[1-c]} \tag{C.7}$$

En la Fig. C.2, se representa gráficamente el valor máximo que puede adquirir p_1, de acuerdo con la Ec. C.7.

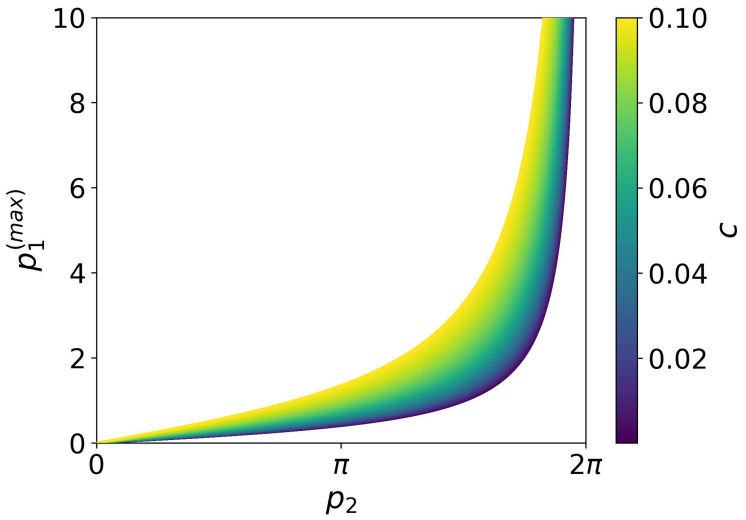

Figura C.2: *Mínima pendiente admisible de la trampa $p_1^{(max)}$ en función de su ancho p_2, para el criterio $f(\pi) \leq c/2$.*

Apéndice D

Campos críticos

El objetivo de esta sección es expresar los campos críticos superconductores en términos de los parámetros del programa. De las definiciones de ξ, λ_L, κ y ρ_0, resumidas aquí como sigue,

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|}, \quad \lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0}, \quad \kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}, \quad \rho_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\beta_{GL}}. \tag{D.1}$$

es directo que

$$\frac{e}{mc} = \frac{1}{\hbar\kappa}\sqrt{\frac{|\alpha_{GL}|}{2\pi\rho_0}}. \tag{D.2}$$

Luego, usando las relaciones entre los parámetros físicos y los del programa,

$$\alpha = \frac{\hbar}{2m}, \quad \Omega = \frac{|\alpha_{GL}|}{\hbar} \tag{D.3}$$

y operando algebraicamente, se llega a que

$$\mathcal{H} = \frac{e}{mc}H = \frac{1}{\kappa}\sqrt{\frac{\Omega}{2\pi\hbar\rho_0}}H. \tag{D.4}$$

De la definición del campo crítico termodinámico,

$$H_c^2 = 4\pi\frac{|\alpha_{GL}|^2}{\beta_{GL}} = 4\pi\Omega\hbar\rho_0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{H}_c = \frac{1}{\kappa}\sqrt{2}\Omega \tag{D.5}$$

Se sigue de la Ec. D.5, y de la relación entre H_c y el campo crítico superior, $H_{c2} = \sqrt{2}\kappa H_c$,

$$\mathcal{H}_{c2} = \sqrt{2}\kappa\mathcal{H}_c = 2\Omega \tag{D.6}$$

De manera análoga, el campo crítico inferior H_{c1}, que determina el umbral a partir del cual el flujo magnético comienza a penetrar en el superconductor, puede expresarse en términos de la energía adicional por unidad de longitud de un vórtice aislado, ϵ_1, la cual es calculable mediante soluciones numéricas de las ecuaciones de Ginzburg-Landau. No obstante, su desarrollo se omitirá en este trabajo.

Apéndice E

Ajuste del vórtice elíptico

En el caso isótropo, un vórtice aislado puede aproximarse en buena medida en todo el rango por la expresión [46]

$$|\tilde{\psi}|^2(\vec{r}) \simeq |\tilde{\psi}_v|^2 \tanh^2\left(\frac{r}{\xi}\right), \tag{E.1}$$

que resulta análoga a la expresión del vórtice de *Taylor-Green* (Ec. 4.16). Mapeando la Ec. E.1 a una elipse, la expresión para el parámetro de orden queda

$$|\tilde{\psi}|^2(x,z) \simeq |\tilde{\psi}_v|^2 \tanh^2\left(\sqrt{\left(\frac{x}{\xi_a}\right)^2 + \left(\frac{z}{\xi_b}\right)^2}\right), \tag{E.2}$$

con ξ_a y ξ_b dados por la Ec. 5.9, de modo que

$$|\tilde{\psi}|^2(x,z) \simeq |\tilde{\psi}_v|^2 \tanh^2\left(\frac{1-\hat{\lambda}_2\tilde{\eta}_v^2}{\xi}\sqrt{\left(\frac{x}{1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}\right)^2 + \left(\frac{z}{1-\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_v}\right)^2}\right) \tag{E.3}$$

Esto es válido, en principio, para un parámetro de orden nemático homogéneo. Sin embargo, cuando $\tilde{\eta}$ es un campo con dinámica, $\tilde{\eta}(x,z,t)$ adopta una estructura elíptica en la región del vórtice (con la misma orientación que $|\psi|^2$), lo que hace que la situación general sea más compleja. De este modo, la función a ajustar (mediante cuadrados mínimos en dos variables) será

$$f(\{\xi_{eff}, \tilde{\eta}_{eff}, \mu_x, \mu_z\}, \hat{\lambda}_1) = A \tanh^2\left(\frac{1}{\xi_{eff}}\sqrt{\left(\frac{x-\mu_x}{1+\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_{eff}}\right)^2 + \left(\frac{z-\mu_z}{1-\hat{\lambda}_1\tilde{\eta}_{eff}}\right)^2}\right) \tag{E.4}$$

Un ejemplo de la aplicación de este ajuste para una combinación particular de parámetros puede visualizarse en la Fig. E.1. Cabe destacar que la función de la Ec. E.4 no necesariamente se corresponde de buena manera con la estructura del núcleo del vórtice. En particular, para valores de $\hat{\lambda}_2 \neq 0$ pueden observarse algunas discrepancias. Aun así, permite determinar el centro del vórtice de manera exacta y eficiente, facilitando su seguimiento durante la dinámica.

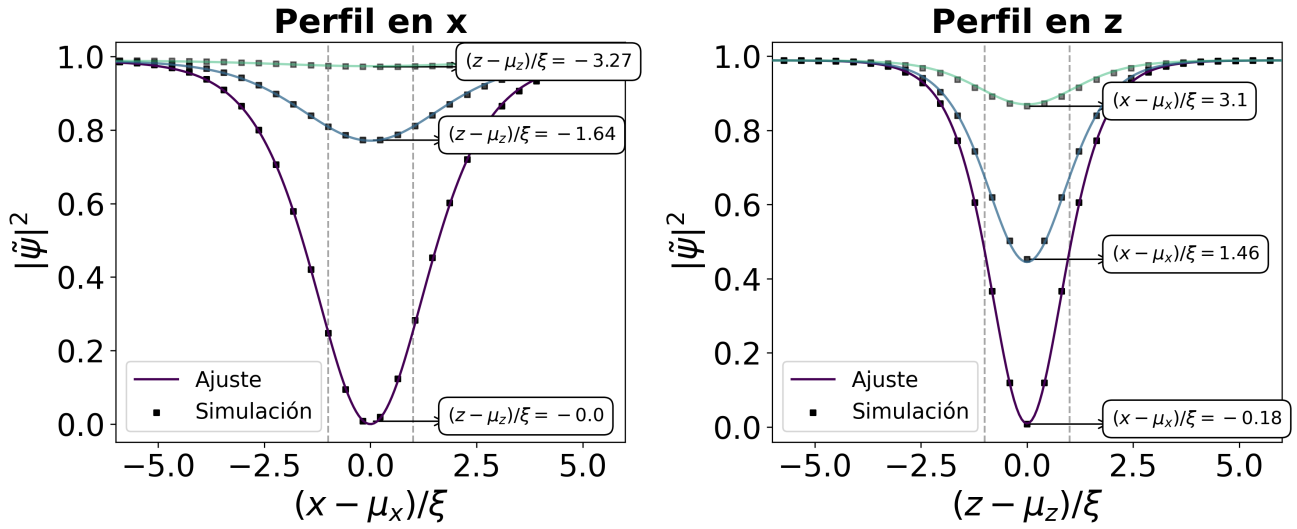

Figura E.1: *Ajuste bidimensional del núcleo del vórtice elíptico. Se presentan diferentes cortes del ajuste y de los datos en ambas direcciones* (*cortes en $\hat{x}$ a la izquierda, cortes en $\hat{z}$ a la derecha*). *Parámetros:* $\hat{\lambda}_1 = 0.4$, *y* $\hat{\lambda}_2 = 0.01$.

Bibliografía

[1] John Bardeen, Leon N. Cooper, and J. Robert Schrieffer. *Theory of Superconductivity*. Physical Review, 108(5):1175–1204, 1957.

[2] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen. *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*. Nature, 518:179–186, 2015.

[3] Yoichi Kamihara, Takumi Watanabe, Masahiro Hirano, and Hideo Hosono. *Iron-Based Layered Superconductor La$[O_{1-x}F_x]$FeAs (x = 0.05–0.12) with T_c = 26 K*. Journal of the American Chemical Society, 130(11):3296–3297, 2008.

[4] David C. Johnston. *The puzzle of high temperature superconductivity in layered iron pnictides and chalcogenides*. Advances in Physics, 59(6):803–1061, 2010.

[5] Hideo Hosono and Kazuhiko Kuroki. *Iron-based superconductors: Current status of materials and pairing mechanism*. Physica C: Superconductivity and its Applications, 514:399–422, 2015.

[6] Jiun-Haw Chu, James G. Analytis, Kristiaan De Greve, Peter L. McMahon, Zahirul Islam, Yoshihisa Yamamoto, and Ian R. Fisher. *In-Plane Resistivity Anisotropy in an Underdoped Iron Arsenide Superconductor*. Science, 329(5993):824–826, 2010.

[7] Rafael M. Fernandes, Andrey V. Chubukov, and Jörg Schmalian. *What drives nematic order in iron-based superconductors?* Nature Physics, 10:97–104, 2014.

[8] Steven A. Kivelson, Eduardo Fradkin, and V. J. Emery. *Electronic liquid-crystal phases of a doped Mott insulator*. Nature, 393:550–553, 1998.

[9] Rafael M. Fernandes, Andrey V. Chubukov, Johannes Knolle, Ilya Eremin, and Jörg Schmalian. *Preemptive nematic order, pseudogap, and orbital order in the iron pnictides*. Physical Review B, 85(2):024534, 2012.

[10] Thomas A. Maier and Douglas J. Scalapino. *Pairing interaction near a nematic quantum critical point of a three-band CuO_2 model*. Physical Review B, 90(17):174510, 2014.

[11] Rafael M. Fernandes, Peter P. Orth, and Jörg Schmalian. *Intertwined vestigial order in quantum materials: Nematicity and beyond*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 10:133–154, 2019.

[12] Albert Schmid. *A time dependent Ginzburg-Landau equation and its application to the problem of resistivity in the mixed state*. Physik der kondensierten Materie, 5:302–317, 1966.

[13] Alexander D. Hernández and Daniel Domínguez. *Surface barrier in mesoscopic type-I and type-II superconductors*. Physical Review B, 65(14):144529, 2002.

[14] M. Ögren, M. P. Sørensen, and N. F. Pedersen. *Self-consistent Ginzburg-Landau Theory for Transport Currents in Superconductors*. Physica C: Superconductivity, 479:157–159, 2012.

[15] Cun Xue, Qing-Yu Wang, Han-Xi Ren, An He, and Alejandro V. Silhanek. *Case Studies on Time-Dependent Ginzburg-Landau Simulations for Superconducting Applications*. Electromagnetic Science, 2(2):1–20, 2024.

[16] Ramiro Severino. *Teorías fenomenológicas del tipo Ginzburg-Landau en el ámbito de superconductores no convencionales con fases nemáticas*. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 2025. Tesis doctoral.

[17] R. Severino, Pablo Mininni, E. Fradkin, V. Bekeris, Gabriela Pasquini, and G. Lozano. *Vortices in a Ginzburg-Landau theory of superconductors with nematic order*. Physical Review B, 106, 09 2022.

[18] R. Severino, Pablo Mininni, E. Fradkin, V. Bekeris, Gabriela Pasquini, and G. Lozano. *Ginzburg-Landau approach to the vortex–domain wall interaction in superconductors with nematic order*. Physical Review B, 109, 03 2024.

[19] Heike Kamerlingh Onnes. *The disappearance of the resistance of mercury*. Communications from the Physical Laboratory of the University of Leiden, 124, 1911.

[20] W. Meissner and R. Ochsenfeld. *Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit*. Naturwissenschaften, 21:787–788, 1933.

[21] F. London and H. London. *The Electromagnetic Equations of the Supraconductor*, volume 149. Proceedings of the Royal Society of London A, 1935.

[22] Vitaly L. Ginzburg and Lev D. Landau. *On the Theory of Superconductivity*. Zh. Eksp. Teor. Fiz., 20:1064, 1950.

[23] A. A. Abrikosov. *On the Magnetic Properties of Superconductors of the Second Group*. Soviet Physics JETP, 5:1174–1182, 1957.

[24] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, Jr. J. M. Valles, and J. V. Waszczak. *Scanning-Tunneling-Microscope Observation of the Abrikosov Flux Lattice and the Density of States near and inside a Fluxoid*. Physical Review Letters, 62(2):214–216, 1989.

[25] V. J. Emery. *Theory of high-T_c superconductivity in oxides*. Physical Review Letters, 58(26):2794–2797, 1987.

[26] Darko Stosic. *High Performance Ginzburg-Landau Simulations of Superconductivity*. Universidade Federal de Pernambuco, 2018. Phd Thesis.

[27] Zhi-An Ren, Guang-Can Che, Xiao-Li Dong, Jie Yang, Wei Lu, Wei Yi, Xiao-Li Shen, Cao Zheng, and Zhong-Xian Chen. *Superconductivity at 55 K in Iron-Based F-Doped Layered Quaternary Compound Sm[O1-xFx]FeAs*. EPL (Europhysics Letters), 83(1):17002, 2008.

[28] H Takahashi, K Igawa, K Arii, Y Kamihara, M Hirano, and H Hosono. *Superconductivity at 43 K in an iron-based layered compound LaO1-xFxFeAs*. Nature, 453:376–378, 2008.

[29] G. R. Stewart. *Superconductivity in iron compounds*. Reviews of Modern Physics, 83(4):1589, 2011.

[30] Jian-Feng Ge, Zhi-Long Liu, Canhua Liu, Qian Gao, Dong Qian, Qi-Kun Xue, and Ying Liu. *Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO3*. Nature Materials, 14:285–289, 2015.

[31] M. A. Tanatar, E. C. Blomberg, A. Kreyssig, M. G. Kim, N. Ni, A. Thaler, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, I. I. Mazin, and R. Prozorov. *Uniaxial-strain mechanical detwinning of $CaFe_2As_2$ and $BaFe_2As_2$ crystals: Optical and transport study*. Physical Review B, 81:184508, 2010.

[32] M. A. Tanatar, A. E. Böhmer, E. I. Timmons, M. Schütt, G. Drachuck, V. Taufour, K. Kothapalli, A. Kreyssig, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, R. M. Fernandes, and R. Prozorov. *Origin of the Resistivity Anisotropy in the Nematic Phase of FeSe*. Physical Review Letters, 117:127001, 2016.

[33] C. Fang, H. Yao, W-F. Tsai, J. Hu, and S. A. Kivelson. *Theory of electron nematic order in LaFeAsO*. Physical Review B, 77:224509, 2008.

[34] C. Xu, M. Muller, and S. Sachdev. *Ising and spin orders in the iron-based superconductors*. Physical Review B, 78:020501(R), 2008.

[35] Hsueh-Hui Kuo. *Electronic nematicity in iron-based superconductors*. Stanford University, 2014. Tesis doctoral.

[36] Y. Gallais, I. Paul, L. Chauvière, K. Schmalzl, P. Rodiere, M-A. Measson, M. Cazayous, A. Sacuto, C. Marin, and A. Forget. *Observation of Phonon Mode Splitting and the Role of the Orbital Degree of Freedom in Iron-Based Superconductors*. Physical Review Letters, 111:267001, 2013.

[37] Juan Schmidt. *Fase nemática en $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$: alineación de dominios y elasto-resistividad*. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, 2018. Tesis de Licenciatura.

[38] J. Schmidt, V. Bekeris, G. S. Lozano, M. V. Bortulé, M. Marziali Bermúdez, C. W. Hicks, P. C. Canfield, E. Fradkin, and G. Pasquini. *Nematicity in the superconducting mixed state of strain detwinned underdoped $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$*. Phys. Rev. B, 99:064515, Feb 2019.

[39] R. Prozorov, M. A. Tanatar, N. Ni, A. Kreyssig, S. Nandi, S. L. Bud'ko, A. I. Goldman, and P. C. Canfield. *Intrinsic pinning on structural domains in underdoped single crystals of $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$*. Phys. Rev. B, 80:174517, Nov 2009.

[40] T. M. Chuang and et al. *Nematic electronic structure in the "parent" state of the iron-based superconductor $Ca(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$*. Science, 327:181, 2010.

[41] C. H. P. Wen and et al. *Anisotropy of the superconducting gap in FeSe determined by angle-resolved photoemission spectroscopy*. Nature Communications, 7:10840, 2016.

[42] A. V. Putilov and et al. *Vortex core structure and vortex pinning in FeSe studied by scanning tunneling microscopy*. Physical Review B, 99:144514, 2019.

[43] I. P. Zhang and et al. *Anomalous vortex dynamics and pinning in FeSe superconductors*. Physical Review B, 100:024514, 2019.

[44] S. Hoffmann and et al. *Electronic nematicity and vortex pinning in FeSe superconductors*. Physical Review B, 106:134507, 2022.

[45] José I. Castro and Arturo López. *Comments on the Force on Pinned Vortices in Superconductors*. Journal of Low Temperature Physics, 135(1-2):15–26, 2004.

[46] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. McGraw-Hill, New York, 2 edition, 1996.

[47] J. Bardeen and M. J. Stephen. *Theory of the Motion of Vortices in Superconductors*. Physical Review, 140(4A):A1197–A1207, 1965.

[48] D. Pérez Daroca, G. S. Lozano, G. Pasquini, and V. Bekeris. *Depinning and dynamics of ac driven vortex lattices in random media*. Physical Review B, 81:184520, 2010.

[49] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur. *Vortices in high-temperature superconductors*. Reviews of Modern Physics, 66:1125–1388, 1994.

[50] Z. Hao and J. R. Clem. *Viscous flux motion in anisotropic type-II superconductors in low fields*. IEEE Transactions on Magnetics, 27:1086–1089, 1991.

[51] M. Marziali Bermudez. *Anisotropia y efecto de las maclas sobre la dinamica de vortices en monocristales de* $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, 2013. Tesis de licenciatura.

[52] E. Fradkin et al. *Nematic Fermi Fluids in Condensed Matter Physics*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 1:153–178, 2010.

[53] L. D. Landau. *On the theory of phase transitions*. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 7:19–32, 1937.

[54] J. Carlström, E. Babaev, and M. Speight. *Type-1.5 superconductivity in multiband systems: Effects of interband couplings*. Physical Review B, 83:174509, 2011.

[55] Debanjan Chowdhury, Erez Berg, and Subir Sachdev. *Nematic order in the vicinity of a vortex in superconducting FeSe*. Phys. Rev. B, 84:205113, Nov 2011.

[56] Bakhrom Oripov and Steven M. Anlage. *Time-dependent Ginzburg-Landau treatment of rf magnetic vortices in superconductors: Vortex semiloops in a spatially nonuniform magnetic field*. Physical Review E, 101(3):033306, 2020.

[57] A. A. Bespalov and A. S. Mel'nikov. *Mismatch of conductivity anisotropy in the mixed and normal states of type-II superconductors*. Physical Review B, 85:174502, 2012.

[58] Q. Du, M. D. Gunzburger, and J. S. Peterson. *Analysis and approximation of the Ginzburg–Landau model of superconductivity*. SIAM Review, 34(1):54–81, 1992.

[59] Q. Du. *Numerical solution of the three-dimensional Ginzburg–Landau models using artificial boundary*. Computers & Mathematics with Applications, 27(12):119–133, 1994.

[60] W. D. Gropp, H. G. Kaper, G. K. Leaf, D. M. Levine, M. Palumbo, and V. M. Vinokur. *Numerical simulation of vortex dynamics in type-II superconductors*. Journal of Computational Physics, 123(2):254–266, 1996.

[61] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Dover Publications, 2nd edition, 2001.

[62] P. D. Mininni, D. Rosenberg, R. Reddy, and A. Pouquet. *A hybrid MPI-OpenMP scheme for scalable parallel pseudospectral computations for fluid turbulence*. Parallel Computing, 37(6–7):316–326, 2011.

[63] D. Rosenberg, P. D. Mininni, R. Reddy, and A. Pouquet. *GPU parallelization of a hybrid MPI-OpenMP pseudospectral solver for fluid turbulence*. Atmosphere, 11(2):178, 2020.

[64] P. Clark di Leoni, P. D. Mininni, and M. E. Brachet. *Spatiotemporal visualization of turbulence from Gross–Pitaevskii simulations*. Physical Review A, 92(6):063632, 2015.

[65] D. O. Gomez, P. D. Mininni, and P. Dmitruk. *MHD simulations and astrophysical applications*. Physica Scripta, T116:123, 2005.

[66] P. D. Mininni, D. O. Gomez, and S. M. Mahajan. *Direct simulations of helical Hall-MHD turbulence and dynamo action*. Astrophysical Journal, 619:1019, 2005.

[67] P. D. Mininni and A. Pouquet. *Energy spectra stemming from interactions of Alfvén waves and turbulent eddies*. Physical Review Letters, 99:254502, 2007.

[68] P. D. Mininni, A. Alexakis, and A. Pouquet. *Nonlocal interactions in hydrodynamic turbulence at high Reynolds numbers: The slow emergence of scaling laws*. Physical Review E, 77:036306, 2008.

[69] J. Amette Estrada, M. E. Brachet, and P. D. Mininni. *Turbulence in rotating Bose-Einstein condensates*. Physical Review A, 105:063321, 2022.

[70] Hechang Lei, Rongwei Hu, and C. Petrovic. *Critical fields, thermally-activated transport and critical current density of β-FeSe single crystals*. Physical Review B, 84(1):014520, 2011.

[71] T. Winiecki and C. S. Adams. *Time-dependent Ginzburg-Landau simulations of the voltage-current characteristic of type-II superconductors with pinning*. Physical Review B, 65:104517, 2002.

[72] Sakiko Noda, Hiroto Adachi, and Masanori Ichioka. *Fractional Vortex Array Realized at Twin Boundary in a Nematic Superconductor*. Journal of the Physical Society of Japan, 94(2):023702, 2025.

[73] C. Nore, M. Abid, and M. E. Brachet. *Decaying Kolmogorov turbulence in a model of superflow*. Physics of Fluids, 9(9):2644–2669, 09 1997.

[74] Christiane Caroli and Kazumi Maki. *Fluctuations of the Order Parameter in Type-II Superconductors. I. Dirty Limit*. Phys. Rev., 159:306–315, Jul 1967.

[75] Christiane Caroli and Kazumi Maki. *Motion of the Vortex Structure in Type-II Superconductors in High Magnetic Field*. Phys. Rev., 164:591–607, Dec 1967.

[76] Kazumi Maki. *Resistive States in High-Field Type-II Superconductors*. Phys. Rev., 169:381–387, May 1968.

[77] Chia-Ren Hu and Richard S. Thompson. *Dynamic Structure of Vortices in Superconductors. II. $H \ll H_{c2}$*. Phys. Rev. B, 6:110–120, Jul 1972.

[78] J. M. Bartlett, A. Steppke, S. Hosoi, H. Noad, J. Park, C. Timm, T. Shibauchi, A. P. Mackenzie, and C. W. Hicks. *Relationship between transport anisotropy and nematicity in FeSe*. Phys. Rev. X, 11:021038, 2021.

[79] Clifford W. Hicks, Mark E. Barber, Stephen D. Edkins, Daniel O. Brodsky, and Andrew P. Mackenzie. *Piezoelectric-based apparatus for strain tuning*. Review of Scientific Instruments, 85(6):065003, 06 2014.

[80] Mark E. Barber, Alexander Steppke, Andrew P. Mackenzie, and Clifford W. Hicks. *Piezoelectric-based uniaxial pressure cell with integrated force and displacement sensors*. Review of Scientific Instruments, 90(2):023904, 02 2019.

[81] Joshua J Sanchez, Paul Malinowski, Joshua Mutch, Jian Liu, J-W Kim, Philip J Ryan, and Jiun-Haw Chu. *The transport–structural correspondence across the nematic phase transition probed by elasto X-ray diffraction*. Nature Materials, 20(11):1519–1524, 2021.

[82] F. Castillo Menegotto, R. S. Severino, P. D. Minnini, E. Fradkin, V. Bekeris, G. Pasquini, and G. S. Lozano. *Vortex flow resistivity in nematic superconductors*. En preparación, 2025.

[83] K. Dunnett, Awadhesh Narayan, N. A. Spaldin, and A. V. Balatsky. *Strain and ferroelectric soft-mode induced superconductivity in strontium titanate*. Physical Review B, 97:144506, 2018.

Tesis disponible bajo Licencia Creative Commons, Atribución – No Comercial – Compartir Igual (by-nc-sa) 2.5

Argentina

Buenos Aires, 2025