



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Teorías fenomenológicas del tipo Ginzburg-Landau en el ámbito de superconductores no convencionales con fases nemáticas

Tesis presentada para optar al título de Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el
área de Física

Lic. Ramiro Sebastián Severino

Director de Tesis: Dr. Gustavo Lozano

Consejero de Estudios: Dr. Fernando Lombardo

Buenos Aires, Febrero 2025

Teorías fenomenológicas del tipo Ginzburg-Landau en el ámbito de superconductores no convencionales con fases nemáticas

En las últimas décadas gran parte de la investigación en superconductividad se ha concentrado en torno a materiales cuya superconductividad se clasifica como *no convencional*. Estos superconductores no entran dentro de la descripción microscópica de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS). En el año 2008 fue descubierta una familia de superconductores basados en hierro que desde entonces ha sido ampliamente estudiada tanto teórica como experimentalmente. Una de las propiedades más notables de estos compuestos es la aparición de anisotropías en las propiedades ópticas y de transporte que teóricamente han sido vinculadas con la existencia de fases nemáticas electrónicas.

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 Ginzburg-Landau. En esta tesis aplicamos una extensión dependiente del tiempo del formalismo Ginzburg-Landau (TDGL) para estudiar la dinámica acoplada de dos parámetros de orden, uno real tipo Ising para la nematicidad electrónica y otro complejo tipo s para la superconductividad. Para ello, desarrollamos métodos espectrales, adaptando técnicas ya utilizadas en el área de dinámica de condensados de Bose-Einstein. Se estudiaron dos tipos de acoplos entre los parámetros de orden de la teoría: uno biquadrático y otro trilineal que espontáneamente rompe la simetría cristalina.

En primera instancia estudiamos la interacción entre vórtices en presencia de nematicidad, determinando de qué manera la nematicidad modifica la frontera entre superconductividad tipo I y tipo II. Luego, estudiamos la interacción entre un vórtice y una pared de dominio nemática en función de los valores de los acoplos entre nematicidad y superconductividad. Mostramos que la interacción entre paredes y vórtices puede ser tanto atractiva

como repulsiva, en función de los parámetros, y que la anisotropía en los vórtices produce un fuerza en la dirección de la pared que desvía sus trayectorias. Por último, proponemos mecanismos de *trampas* que permiten estudiar el problema de múltiples vórtices y la forma en que estos se organizan, tanto en un fondo de nematicidad constante como en presencia de paredes de dominio nemáticas.

Phenomenological Ginzburg-Landau theory of unconventional superconductors with nematic phases

In the last few decades, a large part of the research in superconductivity has been centered towards materials whose superconductivity is classified as *unconventional*. These materials do not fit within the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) description. In 2008 a new family of superconducting materials based in iron was discovered and have since been extensively studied, both experimentally and theoretically. One of their most notable properties is the emergence of transport anisotropies, which have been linked to the existence of electronic nematic phases.

Even though there is no consensus on the microscopic origin of nematicity, it is possible to take on the problem from a Ginzburg-Landau phenomenological perspective. In this thesis, we apply a time-dependent extension of the Ginzburg-Landau formalism (TDGL) to study the dynamics of two coupled order parameters, an Ising-type real parameter for electronic nematicity and a complex *s*-wave order parameter for superconductivity. To achieve this, we adapted a spectral method, already used in the study of the dynamics of Bose-Einstein condensates, to the problem of superconductivity. Two types of coupling between the order parameter were studied: a biquadratic coupling and a trilinear one that spontaneously breaks the symmetry in a particular crystalline direction.

As a first step, we studied the interaction between vortices in the presence of nematicity to determine how it modifies the frontier between Type I and Type II superconductivity. Then, we studied the interaction between a vortex and a nematic domain wall for different values of the coupling parameters. We showed that the interaction can be both attractive and repulsive, depending on the values of the biquadratic coupling, and that the anisotropy in the vortex cores produces a force in the direction of the wall that modifies their

trajectories. Finally, we propose the use of *potential traps* which allows us to tackle the problem of multiple vortices and the way in which they organise, both in a background of constant nematicity and in the presence of nematic domain walls.

Agradecimientos

Un profesor me dijo una vez que *hacer un buen doctorado es terminar con un buen balance entre habilidades duras y blandas*. Si lo hubiera escuchado al arrancar el doctorado hubiera pensado que estaba equivocado, ya que *¿qué podría ser más importante que aprender física pura y dura?*. El tiempo terminó dándole la razón y por eso existe esta sección: aprendí, con el doctorado casi detrás mío, que si pude terminar es porque hubo mucha gente que no me dejó caer.

Antes que nada, agradecerle a la educación pública, a mi Universidad de Buenos Aires querida. La Universidad se convirtió en mi segundo hogar, tanto física como filosóficamente. Gracias por la beca UBACyT que me permitió arrancar el doctorado en circunstancias adversas. Es gracias a la UBA que hoy soy el primer egresado universitario y el primero con un Doctorado en toda mi línea familiar.

Siguiendo con las personas, quiero agradecer en primer lugar a Gustavo Lozano. En un contexto difícil e incierto, aceptó tomarme como alumno en un momento donde estaba personalmente muy perdido. Gracias por la paciencia ante mis constantes *no entiendo*, por sus consejos para transitar la vida académica y por enseñarme que *antes que opinar es mejor saber*. Para crecer hace falta tener espacio y agradezco haberlo tenido, ya que siempre se tomaron mis contribuciones e ideas (aunque fuesen muy malas) con seriedad, corrigiendo lo que había que corregir y aceptando lo que está bien. Si hoy siento que puedo ser independiente y que tengo los medios para enfrentar lo que viene es porque tengo buenas herramientas. Gracias por las discusiones, buenas y malas, científicas y personales, que hoy me llevo como parte de mi formación y que sé que me hacen un mejor profesional.

En segundo lugar, agradecerle a *las chicas de bajas temperaturas*, Gabriela Pasquini y Victoria Bekeris. Gracias por tomarse el tiempo de entender lo que estaba haciendo, con

seriedad y compromiso. Gracias por brindarme su conocimiento, por las discusiones, por las ideas, por tomarse el tiempo de involucrarse en mi trabajo y tener siempre una palabra de aliento o de guía cuando supe necesitarla. Mención especial a Vicky por su invaluable atención a la precisión gramatical y ortográfica, en todos los lenguajes.

Continúo agradeciendo a Pablo Mininni por todo lo que me brindó durante el trabajo de esta tesis. Además de ayudarme con el código que es el centro de esta tesis, aprendí muchísimo de física, de cálculo numérico y de programación. En lo personal, me llevo las charlas de café, los consejos brindados y *la visión de que la ciencia no se hace en soledad*. Gracias por siempre tener la puerta abierta para mis consultas y por enseñarme que, a veces, saber pedir ayuda es una muestra de fortaleza.

Agradezco también a Eduardo Fradkin, quien desde la distancia siempre estuvo presente y dispuesto a discutir cualquier cosa, por más mínima que fuera, con seriedad y compromiso. Ante figuras tan grandes uno tiende a hacerse chiquito, pero en Eduardo encontré siempre un oído listo para discutir y enseñarme sin minimizar mi contribución. Quizas el no lo recuerde, pero sus palabras en la breve visita al país y durante el DDF me ayudaron mucho a no bajar los brazos.

Gracias a los Jurados de esta tesis, Dr. Daniel Dominguez, Dra. Gladys Nieva y Dr. Pablo Dmitruk, por aceptar ser jurados de este trabajo y por tomarse el tiempo de evaluarlo con seriedad, responsabilidad y criterio científico.

Además de quienes he mencionado, existe otro grupo de gente que me acompañó en el trabajo diario y quienes me contuvieron para culminar el doctorado.

Primero, quiero destacar a Fernando Lombardo quien actuó como mi Consejero de Estudios durante esta tesis. Fernando fue quien me introdujo al mundo de la teoría de campos y quien me apuntó en la dirección de Gustavo para iniciar el doctorado. Además de cum-

plir su rol con excelencia, destaca su calidad humana y calidez. Gracias por el abrazo y la contención siempre que lo necesité.

Quiero continuar agradeciendo a mis compañeros de doctorado, quienes me acompañaron en el día a día. Ellos toleraron mis frustraciones y escucharon mis problemas sin juzgar y siempre con una palabra para alentarme. Y cuando no había qué decir, simplemente me escucharon y acompañaron, cada uno desde su lugar particular. Quiero utilizar este espacio para dejar un reconocimiento especial a algunos de ustedes.

En un primer combo, van 3: Facu, Juli, Berna. Soy un tipo grandilocuente y algo cursi: si hubiera tenido hermanos, me hubiera gustado que sean ustedes. Gracias Facu por tu inconmensurable ayuda en tantos aspectos que enumerarlos me haría quedar muy mal. Desde lo más básico de un comando de Python a charlas sobre ética docente, siempre tiene la palabra justa para desbloquear el problema. Gracias por sostenerme tantas veces que me estaba por caer. De Julián, que decir. Gracias por tu energía inagotable, por decirme *dale rami vos podés* cuando ni siquiera sabías que lo necesitaba y que me estaba salvando. Gracias por tus ideas, por las charlas de física, las de rosca y tantas otras; por enseñarme que a veces ser un poco loco está bueno. Ahora el pequeño, Bernardo. Al principio chocamos un poco, como corresponde con personas que son un poco parecidas. Con el tiempo encontré una persona afectiva, comprometida, seria, inteligente y muy payasa escondida detrás de un semblante serio. Nuestros mates de la mañana entre charlas variadas son uno de los altos de mi doctorado. Gracias por cuidarme cuando lo necesité.

En este otro combo, también van 3: los venenosos Juanma, Tomi y Mati. Con Juanma nos conocíamos desde el principio de nuestras carreras pero nuestros destinos se juntaron en el doctorado. Gracias por ser ese cable a tierra que necesitaba cuando estaba un poco ido, por ser esa palabra de aliento y consuelo cuando se necesitaba, por ser ese factor ordenador

cuando todo es un caos. Debe ser el V Dan. Gracias Tomi por estar, por acompañarme sin preguntar a qué, por tus risas y tus historias locas *locas*. Gracias por los mates con yuyitos raros a altas horas de la noche escuchándome desvariar de temas múltiples. Y de Mati, qué decir. Solo nosotros sabemos la cantidad de saliva gastada en chismes, teorías conspirativas y diagnósticos de mundo. Gracias por ser ese factor de aleatoriedad que necesitaba en mi vida y enseñarme que un poco de *chill* también está bien.

De Ludmila tengo mucho para decir, todo bueno y muy largo para escribir. A pesar de haber arrancado bardeandome por usar Twitter en F1, de que pensé que habías nacido en *Paternal* y de que hoy nos encontremos a un océano de distancia, gracias por acompañarme de todas formas y saber cuándo me venía bien un correctivo. Gracias por tu honestidad, tu sinceridad, tu sensibilidad, tu paciencia y, por qué no, tu ejemplo. A Paulina, gracias por la compañía especialmente en estos últimos años de doctorado. Gracias por los cafecitos, las charlitas, los debates, las quejas, los consejos, los almuercitos y por brindarme el espacio de desahogo que muchas veces necesité.

Por último y para cerrar, le agradezco a mi compañero Nicolás que sólo Dios sabe lo que tuvo que aguantar. A mi mamá Mónica, por incentivar me desde que quise dejar Análisis en el CBC hasta ahora, por poner todo de ella (hasta lo que no tenía) con tal de que yo me reciba. Y aunque parezca loco, al Taekwon-Do y a mi maestro Gustavo Miño. Gracias por enseñarme que con perseverancia y espíritu indomable, podemos lograr cualquier cosa que nos propongamos.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación y estado del arte	1
1.2. Organización de la Tesis	4
2. Marco Teórico	7
2.1. Teoría básica de la Superconductividad	8
2.1.1. Una breve reseña histórica	8
2.1.2. Modelo de London de la superconductividad	13
2.1.3. Teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer	17
2.2. Teoría de Ginzburg-Landau de la Superconductividad	23
2.2.1. La Energía Libre de Helmholtz	23
2.2.2. Ecuaciones de Ginzburg-Landau	26
2.2.3. Cuantización del Fluxoide	28
2.2.4. Nucleación de superconductividad en muestras bulk: campos críticos	30
2.3. La nematicidad electrónica	33
2.4. Superconductores basados en hierro	36
3. Interacción Vortice-Vórtice en superconductores con nematicidad	40
3.1. Teoría de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo (TDGL)	41

ÍNDICE GENERAL

3.2. Método Numérico	44
3.2.1. Métodos Pseudoespectrales	44
3.2.2. Condición Courant-Fredrich-Lewy	47
3.2.3. Condiciones Iniciales	48
3.3. Validación del Método: vórtices en ausencia de nematicidad	50
3.4. Vórtices en la fase nemática	55
3.4.1. La energía libre para el parámetro nemático η	56
3.4.2. Un vórtice con orden nemático	60
3.4.3. Cálculo del κ_c en un fondo de nematicidad constante	64
3.4.4. Interacción vórtice-vórtice en presencia de nematicidad	66
4. Interacción vórtice - pared de dominio nematica	73
4.1. Modelo de Ginzburg-Landau modificado	75
4.2. El parámetro de orden superconductor y la pared de dominio nemática . .	78
4.3. Interacción vórtice-pared	80
4.3.1. Acople Bicuadrático	80
4.3.2. El efecto del acople trilineal	84
5. Redes de vórtices en superconductores con nematicidad	89
5.1. Campo magnético externo y trampa de potencial	90
5.2. Estudio numérico de la red de Abrikosov	95
5.2.1. Resultados Previos	95
5.2.2. Estudio numérico de la red de Abrikosov	97
5.3. Red de vórtices en presencia de nematicidad	105

ÍNDICE GENERAL

5.4. Transiciones estructurales de la red con nematicidad ($\hat{\lambda}_1$) y campo magnético (h_0)	110
5.5. Redes de vórtices y paredes de dominio	114
6. Conclusiones y perspectiva futura	123
A. Ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo	128
B. Parámetros físicos en términos de parámetros de GHOST	132
B.1. Ecuaciones de GL y parámetros	132
B.2. Adimensionalización de la teoría	134
B.3. Incorporación del campo magnético externo en GHOST	136
B.4. Calculo del cuanto de flujo magnético	138
C. Campos Magnéticos Críticos	140

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación y estado del arte

La superconductividad es un fenómeno que ha captado gran atención de parte de la comunidad científica desde su descubrimiento en 1911. Desde entonces, y a pesar del gran avance en la comprensión de sus mecanismos microscópicos, aún quedan muchos interrogantes a responder. La búsqueda de la comprensión del fenómeno ha resultado en el desarrollo de gran cantidad de teoría y experimentos, que se han extendido a otras áreas de la materia condensada y de la física en general.

Hoy en día sabemos que la superconductividad no se restringe a una familia particular de compuestos, sino que se presenta tanto en metales como en cerámicos y aleaciones. Esto muestra que es un estado general que puede adoptar un sistema de muchos electrones, dadas temperaturas suficientemente bajas. Paralelamente, se desarrollaron modelos teóricos que explicaran las propiedades físicas observadas, en general fenomenológicos como el modelo de los hermanos London o la teoría de Ginzburg-Landau, objeto de esta tesis.

Fue recién en 1957 cuando Bardeen, Cooper y Schrieffer publicaron su teoría microscópica de la superconductividad, que les valió el premio Nobel compartido en 1972. Esta teoría,

conocida comúnmente como BCS por las siglas de sus autores, propone a los pares de Cooper (un par de electrones acoplados debido a las vibraciones de la red cristalina) como las unidades portadoras de carga en un superconductor. Además, mostraron que la superconductividad es un fenómeno colectivo originado en un condensado tipo Bose-Einstein de pares de Cooper.

A pesar del éxito de la teoría, que describe correctamente superconductores denominados *convencionales*, en años recientes se han descubierto materiales que escapan a la descripción BCS y en los cuales el mecanismo que provoca el apareamiento entre electrones no está mediado por fonones. Estos materiales, denominados *superconductores no convencionales*, presentan propiedades muy interesantes y sirven como punta de lanza para estudiar nueva física.

En este contexto, el **objetivo** central de esta tesis es la aplicación de **teorías fenomenológicas del tipo Ginzburg-Landau** (GL) [1, 2], en el contexto de **superconductores no convencionales con fases nemáticas**.

La fase nemática, una fase metálica con invariancia translacional y ruptura espontánea de simetría de rotación, es una de las tantas fases atribuibles a los efectos de los electrones fuertemente correlacionados [3, 4]. El orden nemático en un cristal implica la ruptura espontánea de simetría de rotación del mismo, favoreciendo energéticamente un eje cristalino por sobre el otro. La nematicidad se manifiesta en los materiales por ejemplo en la anisotropía en las propiedades de transporte [5–8].

En los últimos años, una serie de materiales superconductores basados en hierro, con propiedades similares a los cupratos [9–12], han escapado a un modelo teórico que explique completamente la fenomenología observada. Estos materiales comparten varias propiedades con los cupratos de alta temperatura crítica, como una estructura cristalina similar (con una

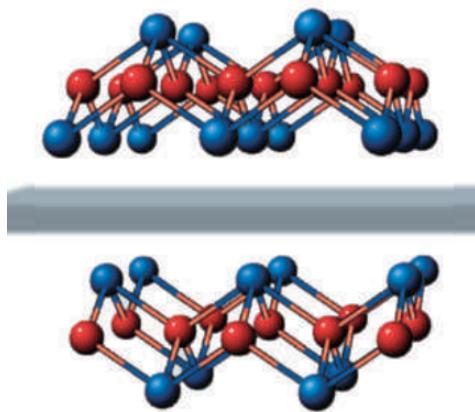


Figura 1.1: *Estructura cristalina general para un superconductor basado en hierro. Los átomos de hierro se muestran en rojo y en azul los pnictógenos (As o P, sup.) o calcógenos (Se o Te, inf.).*

serie de planos formados por distintos elementos, ver Fig. 1.1) y una superconductividad clasificada como *no convencional* (es decir, no explicada por la teoría BCS). En algunas familias de estos compuestos se ha propuesto que los electrones fuertemente correlacionados son los responsables de la aparición de una fase nemática [12–14].

Una gran variedad de sistemas en materia condensada revelan fases con ruptura espontánea de simetría, en los cuales la fase ordenada se puede describir mediante un parámetro de orden que toma valores no nulos en el mínimo de la energía libre. Las propiedades físicas de estos sistemas quedan determinadas por la estructura de esta ruptura de simetría y por los defectos topológicos que aparecen en los sistemas, junto con las energías y escalas que los caracterizan.

Los mecanismos microscópicos responsables de las inusuales propiedades de los superconductores no convencionales son hasta el día de hoy objeto de gran debate. En este contexto, la utilización de una teoría fenomenológica tipo GL brinda un marco en el cual interpretar las observaciones experimentales y predecir efectos nuevos. En los últimos años se ha propuesto que la aparición e interacción entre distintos órdenes (superconductor, nemáti-

co, estructural, magnético, etc) es fundamental para describir aspectos físicos esenciales en estos compuestos [15]. La multiplicidad de órdenes presentes en los superconductores no convencionales implica que la teoría de GL asociada a la descripción de estos materiales tendrá un grado de complejidad mayor que la que se propone para explicar la superconductividad típicamente, donde interviene un único parámetro de orden complejo con ruptura de simetría $U(1)$. Se ha sugerido que el acoplamiento entre el parámetro de orden superconductor y el nemático juega un papel fundamental en la física de los compuestos relevantes [15].

En el contexto de la teoría de GL, las ecuaciones de movimiento que resultan admiten soluciones no triviales, cuya existencia y estabilidad están íntimamente ligadas a propiedades topológicas de los grupos de simetría que actúan sobre los parámetros de orden. En particular, se destacan las soluciones tipo vórtices (que le valieron a Abrikosov el premio Nobel en 2003 [16]) y las paredes de dominio, dos ejemplos de defectos topológicos.

En el desarrollo de esta tesis **investigaremos de qué forma la nematicidad electrónica afecta la fase superconductora, a través del estudio de la interacción entre defectos topológicos**. En particular, estudiaremos la interacción vórtice-vórtice en presencia de nematicidad [17] y la interacción vórtice-pared de dominio nemática, que separa dos regiones con ejes cristalinos a 45° [18]. Finalmente, incluiremos un campo magnético externo aplicado que nos permitirá estudiar la formación de estructuras tipo redes de vórtices y caracterizar como éstas cambian en presencia de la nematicidad.

1.2. Organización de la Tesis

En el Capítulo 2, comenzaremos la tesis con una breve descripción del marco teórico en el que se desarrolla la tesis. Daremos una introducción a conceptos centrales de la teoría de superconductividad que serán necesarios para el resto de la tesis, desde los primeros

modelos hasta la teoría fenomenológica de GL usual, sin dependencia del tiempo. Luego, nos adentraremos en la descripción de la fase nemática y los compuestos basados en hierro, inspiración para el estudio de los problemas propuestos en esta tesis.

Luego, trataremos en el Capítulo 3 la interacción vórtice-vórtice y presentaremos uno de los aspectos novedosos de esta tesis: la adaptación de un método numérico basado en una descomposición pseudo-espectral de las variables(GHOST [19, 20] por sus siglas en inglés), aplicado a la superconductividad. Estudiaremos primero el caso sin nematicidad para testear el método numérico contra resultados conocidos y luego cómo influye la nematicidad en la fase superconductora, mediante la inclusión en la energía libre de un acople biquadrático y uno trilineal con la superconductividad, que explícitamente rompe una simetría de rotación del material.

La publicación que resultó de este trabajo se puede consultar en la referencia [17].

Seguiremos en el Capítulo 4 con el tratamiento de la interacción entre un vórtice y una pared de dominio nemática, en el contexto de una teoría tipo GL. Mostraremos que el aumento o la depresión de la superconductividad en defectos estructurales, en particular una pared de dominio nemática (que separan dos regiones con ejes cristalinos a 45° entre ellos), induce una interacción atractiva o repulsiva con el vórtice, según el signo del parámetro de acople. El método nos permitió calcular energías y coordenadas en función del tiempo y con ellas obtener la fuerza de interacción como función de la distancia. Además, mostramos que nuestro modelo permite interpretar y predecir la forma de los vórtices anclados en paredes de dominio, sustentado con mediciones experimentales. Estos resultados fueron publicados recientemente en [18].

Por último, finalizaremos el contenido original de esta tesis en el Capítulo 5, donde plantearemos las bases de un esquema numérico para el estudio de configuraciones de

un gran número de vórtices y las estructuras que estos forman. Incluiremos una trampa de potencial, siguiendo los métodos estudiados para condensados de Bose-Einstein [21], que sirve para confinar la superconductividad a una región del espacio. A través de la modificación de la energía libre superconductora para incluir la acción de campos externos, realizamos un estudio de las estructuras que se forman en función del valor del campo aplicado y de parámetros de la teoría. Encontramos que la red de Abrikosov se modifica de triangular a cuadrada con la elipticidad de los vórtices (y por consiguiente, con el valor de la nematicidad en el material). Estos resultados formarán parte de un futuro trabajo en preparación.

Finalmente, en el Capítulo 6 repasaremos los principales resultados de esta tesis y plantearemos la perspectiva a futuro en la temática.

Capítulo 2

Marco Teórico

En este capítulo desarrollaremos algunos aspectos de la teoría de la superconductividad que son fundamentales para una lectura fluida de esta tesis. Comenzaremos con una reseña histórica, desde el descubrimiento de la primera transición resistiva hasta los problemas más recientes en la temática, desde la teoría y los experimentos. Luego, describiremos brevemente los modelos más exitosos: la electrodinámica de London y la teoría BCS, que resolvió el problema del origen microscópico de la superconductividad y mereció un premio Nobel a sus autores. Continuaremos con la introducción de la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau no dependiente del tiempo y terminaremos con una breve descripción del objeto de estudio de esta tesis, los superconductores no convencionales.

Aquellos lectores familiarizados con estos conceptos, pueden adelantarse al Capítulo 3 donde comienza la discusión de los resultados originales de este trabajo.

2.1. Teoría básica de la Superconductividad

2.1.1. Una breve reseña histórica

El descubrimiento de la superconductividad se atribuye a Heike Kamerlingh Onnes en 1911 quien, debido a su logro de licuar helio a baja temperatura, encontró una rápida anulación de la resistencia del Hg por debajo de los 4K. En 1933 Meissner y Oschenfeld encontraron (de forma independiente) que, acompañado a una caída de la resistencia, se observa una expulsión del campo magnético de su interior al transicionar a una fase superconductora. Desde el punto de vista clásico, el modelo de Drude, que explica la conductividad y las propiedades de transporte en sólidos metálicos, permitió entender la caída de la resistencia pero no explicaba la expulsión del campo magnético del interior del material.

Una primera explicación fue dada por los hermanos London. De manera fenomenológica y utilizando las ecuaciones del electromagnetismo de Maxwell, propusieron un modelo que explicaba no solo la nula resistencia sino que también la expulsión del campo magnético del interior. Este modelo, conocido como *modelo de los dos fluidos*, tenía en cuenta la existencia de portadores de carga normales (que se comportaban como cargas en un conductor óhmico) y portadores superconductores, que ellos suponían eran también electrones. A pesar de las ideas interesantes del modelo, este falla en describir por ejemplo el estado mixto superconductor, las energías de pared en las interfaces normal-superconductora (predice una energía positiva) y no tiene en cuenta la longitud de coherencia hallada por Pippard.

En 1950 se publicaba por primera vez la teoría de Ginzburg-Landau (GL) [1], basada en la teoría general de Landau de las transiciones de fase de segundo orden, propuesta en 1937 [22]. El modelo incluye el concepto de *parámetro de orden* complejo, una función que

toma un valor finito por debajo de cierta temperatura crítica de transición de fase T_c y es nulo por encima de esta. A priori, el modelo contenía mucha intuición física: se introdujo una pseudo función de onda compleja $\psi(\mathbf{r})$ como parámetro de orden, un verdadero acierto ya que se propuso previo a la teoría de los pares de Cooper como condensado de Bose-Einstein, que muestra que las partículas son descriptas por una única función de onda. Construyeron una energía libre en potencias de la densidad de portadores superconductores (relacionadas con el parámetro de orden según $n_s = |\psi|^2$) y aplicaron un método variacional para obtener un par de ecuaciones diferenciales acopladas para el parámetro de orden y para el potencial vector electromagnético $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, relacionado con la inducción magnética según $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$. La teoría explicaba de forma exitosa fenómenos asociados al estado mixto y la corriente crítica en cables delgados, entre otros. Las predicciones de la teoría de GL ajustaban las mediciones experimentales de la época de forma muy precisa [16].

Sin embargo, la teoría no se encontraba completa. Haciendo mediciones del campo crítico en films delgados con ciertas impurezas (procedentes de la construcción del material) [16], se encontró una discrepancia entre la predicción de GL y lo encontrado experimentalmente. En principio, las ecuaciones de GL dependen explícitamente del parámetro adimensional $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}$, que relaciona la longitud de penetración del campo magnético en el material, λ_L , con la longitud característica de las variaciones del parámetro de orden superconductor ξ . En algunos superconductores convencionales (de espesor $d \gg \lambda_L$ y considerado infinito en las direcciones perpendiculares) se forman regiones macroscópicas normales dentro del superconductor con una periodicidad definida al aplicar un campo magnético externo, de forma normal al material. A este estado se lo llama *estado intermedio superconductor*. El parámetro de GL κ se puede describir en términos de la energía de la interfaz normal-superconductora que se forma entre regiones normales y superconductoras lindantes; a su

vez, esta se estima a través del período de la estructura del estado intermedio. En el trabajo original de GL, y con los datos disponibles en la época (referentes a superconductores convencionales), estimaron valores de κ muy bajos y por lo tanto realizaron los cálculos en esta situación límite. Al aumentar el valor de la constante κ , se puede ver que la energía de la interfaz se puede volver negativa y, como esta observación contradice la existencia del estado intermedio, estos casos no fueron considerados en su momento.

En este contexto, A. A. Abrikosov decidió estudiar qué sucede si $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$, es decir, cuando la energía de la interfaz es negativa. Encontró que la transición normal-superconductora se volvía de orden dos para todos los anchos de films [2]. Esta teoría ajustaba los datos experimentales y se denominó a estos materiales como *superconductores de Tipo II*, aquellos con energía de interfaz negativa. Hoy en día, la mayor parte de los materiales superconductores conocidos son de tipo II.

La transición de fase del estado superconductor al normal con campo magnético es una transición de fase de segundo orden. La condición de transición queda definida en términos de la existencia de un pequeño núcleo normal (infinitesimal, a diferencia de lo que ocurre en el estado intermedio) en el estado superconductor. Estos campos de nucleación estaban calculados en el trabajo original de GL, siendo su límite el campo magnético crítico H_{c2} , a partir del cual se destruye la superconductividad. A campos por debajo de este valor es posible imaginar una serie de defectos organizados de forma definida en el material (ver Fig. 2.1). Debido a la homogeneidad del espacio, el arreglo de muchas de estas singularidades debe ser periódico y, en particular, una red triangular minimiza la energía libre.

Ésta propuesta, junto con la descripción teórica de la superconductividad tipo II, le valió a Abrikosov el premio Nobel en el año 2003.

A pesar del éxito de la teoría de GL, los aspectos microscópicos de la superconducti-

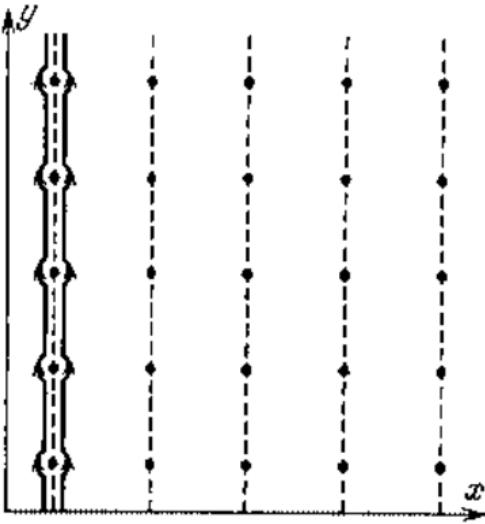


Figura 2.1: Imagen tomada de la conferencia Nobel brindada por Abrikosov [16], donde se ilustra la idea de las regiones infinitesimales que lo inspira a pensar en la red de vórtices. Cada uno de los puntos representa un cero del parámetro de orden

vidad aún no eran conocidos. En 1957, se publicaba la teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), una precisa descripción microscópica de la superconductividad en la mayoría de los compuestos clásicos que la exhiben (Al, Hg, Nb, Pb, Sn, etc). En esta teoría existe, producto de la interacción con los fonones de la red cristalina subyacente, una interacción efectiva atractiva entre electrones (ver Fig. 2.2). La deformación de la red provoca pequeños *bolsillos* donde los pares de electrones pueden formar un condensado de Bose-Einstein. Se propone que las partículas del condensado, los pares de Cooper, actúan como portadores de carga en los superconductores. La teoría predice un gap energético Δ entre los electrones apareados y el mar de Fermi debajo, valor mínimo para la ruptura de un par, que juega un rol fundamental en las propiedades superconductoras.

Sin embargo, existe una multiplicidad de fenómenos en los que la inhomogeneidad en el espacio es altamente relevante, como por ejemplo en el estudio de interfaces normal-superconductora o el estado mixto. La teoría microscópica completa en situaciones com-

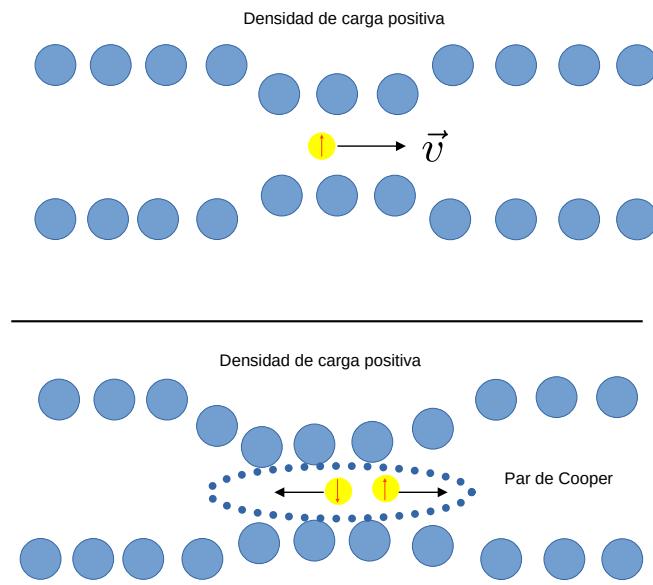


Figura 2.2: *Esquema simplificado de la formación de Pares de Cooper. Los electrones (amarillos) localmente sienten una interacción atractiva con los núcleos positivos del cristal (azules), lo que provoca deformaciones de la red. Estas deformaciones aumentan localmente la densidad de carga positiva, haciendo que otro electrón se sienta atraído a esta zona. De esta forma, se genera un estado ligado entre electrones, a pesar de la repulsión coulombiana. Las flechas naranjas representan los espines de los electrones.*

plejas como estas puede ser muy difícil de construir e interpretar. En el entorno de la temperatura de transición, la corriente $j(\mathbf{r})$ y el potencial de apareamiento entre electrones tienen variaciones espaciales lentas. Bajo estas suposiciones, las propiedades físicas de los superconductores se pueden determinar de forma muy precisa a través de una teoría tipo GL. En 1959 Gor'kov demostró [23] que las ecuaciones de GL estaban contenidas en la teoría BCS como un caso límite, que considera inhomogeneidades espaciales lentas tanto del parámetro de orden como del potencial vector y temperaturas cercanas a la temperatura de transición.

Hoy en día, los materiales superconductores exhiben una diversa gama de fases, con

transiciones de fase complejas y variadas entre estructurales, magnéticas y en algunos casos nemáticas. Los mecanismos microscópicos subyacentes que dan origen a la superconductividad en estos materiales no se conocen exactamente, aunque existen una multiplicidad de propuestas. Es aceptado en la comunidad que el rol de las fuertes correlaciones entre electrones en estos sistemas tiene un rol fundamental a la hora de la determinación de las propiedades físicas. Es en este contexto que la teoría de GL puede proveer respuestas a problemas interesantes de vanguardia, que tienen en algunos casos un correlato con datos experimentales.

2.1.2. Modelo de London de la superconductividad

Históricamente, el tratamiento formal de la superconductividad comenzó con las ecuaciones de los hermanos London. Estas ecuaciones utilizan la teoría clásica del electromagnetismo de Maxwell para describir la electrodinámica de un superconductor convencional. El modelo permite describir parámetros relevantes en la teoría, como la longitud de penetración del campo magnético λ_L , que serán de utilidad más adelante. La clave del modelo está en separar el aporte a la ley de Ohm en una densidad de portadores de carga normales y una densidad de portadores de carga superconductores n_s . Esta última es tal que a $T = 0$ se tiene $n_s = 1$ mientras que para $T > T_c$ es $n_s = 0$.

Conductores Perfectos

Para comenzar, pensemos simplemente en el caso de un conductor perfecto. Partiendo del modelo de Drude [24], podemos describir el movimiento de los electrones en un sólido bajo la acción de un campo eléctrico \mathbf{E} (se omitirán las dependencias con la posición de

ahora en más) utilizando la mecánica clásica

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathbf{E} - m \frac{\mathbf{v}}{\tau}, \quad (2.1)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad de deriva de los electrones y τ es el tiempo característico de scattering entre electrones. Esta ecuación describe la competencia entre el efecto del scattering y la aceleración producida por un campo eléctrico \mathbf{E} . En el caso estacionario $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$, los electrones se mueven con una velocidad terminal $v_T = \frac{\tau e}{m}\mathbf{E}$. Si se tienen n electrones de conducción por unidad de volumen, se establece una corriente estacionaria que sigue la ley de Ohm:

$$\mathbf{J} = nev_T = \frac{ne^2\tau}{m}\mathbf{E} = \sigma_D\mathbf{E}, \quad (2.2)$$

donde se define $\sigma_D = \frac{ne^2\tau}{m}$ como la conductividad de Drude. Si el material es superconductor, su resistividad es nula, o lo que es lo mismo, su conductividad es infinita. Esto implica que el tiempo característico de scattering se hace grande $\tau \rightarrow \infty$, por lo que podemos despreciar el efecto de este término. Luego, se tiene que

$$\frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = \frac{e}{m}\mathbf{E} = \frac{1}{ne} \frac{d\mathbf{J}}{dt} \Rightarrow \boxed{\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{ne^2}{m}\mathbf{E}} \quad (2.3)$$

Tomando rotor a esta última ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{J}_s) = \frac{n_s e^2}{m} \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{ne^2}{m} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.4)$$

Por otro lado, si el campo eléctrico no depende del tiempo, se tiene

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{4\pi}{c} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \quad (2.5)$$

Tomando rotor a esta última expresión, utilizando que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ y reemplazando la expresión para \mathbf{J}_s se tiene

$$\nabla^2 \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) = \frac{4\pi n_s e^2}{mc} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (2.6)$$

Queda definida entonces una escala espacial de apantallamiento de las variaciones del campo magnético en un conductor perfecto, llamada *longitud de penetración*, según

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi ne^2}. \quad (2.7)$$

Notar que esta longitud depende de la densidad de portadores de carga y no depende de la frecuencia de las ondas electromagnéticas en el material. La ecuación 2.6 se puede interpretar si pensamos en un sistema unidimensional que sea conductor perfecto para $x > 0$. En ese caso, y tomando en cuenta condiciones de contorno, se puede encontrar que

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right)_{t=0} e^{-x/\lambda} \quad (2.8)$$

Esto significa que la variación temporal del campo magnético dentro de un conductor decae en el tiempo y exponencialmente con la posición dentro de él, en una longitud característica λ . Sin embargo, esto no es el efecto Meissner, ya que esta ecuación da un campo constante en el interior. Por ejemplo, consideremos que se aplica un campo magnético \mathbf{B}_{ext} al sistema a $T > T_c$, cuando aún no es superconductor. Si bajamos la temperatura a $T < T_c$, se observa experimentalmente que $\mathbf{B} = 0$ dentro pero en un conductor perfecto tendríamos \mathbf{B}_{ext} en el interior. Esto muestra que un superconductor es más que un conductor perfecto.

Ecuaciones de London

Ahora, volvamos a la descripción de los *dos fluidos*, el normal y el superconductor. Para los portadores normales, las ecuaciones que los describen son las de Maxwell y se comportan como cargas en un conductor normal, siguiendo la ley de Ohm $\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E}, \mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Por otro lado, los portadores superconductores serán descriptos con las ecuaciones de London. Si nos paramos por debajo de la temperatura crítica de transición superconductora T_c y utilizamos argumentos similares a los que usamos para un conductor perfecto, donde

ahora los portadores de carga superconductores tienen carga q (a priori, desconocida) y su densidad es n_s , según vimos recién

$$\boxed{\frac{d\mathbf{J}_s}{dt} = \frac{n_s q^2}{m} \mathbf{E} = \frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{E}} \quad (2.9)$$

Esta es la primera ecuación de London para el campo eléctrico. De aquí podemos obtener que la densidad de portadores de carga superconductores es

$$n_s = \frac{mc}{4\pi q^2 \lambda_L^2} \quad (2.10)$$

Esta densidad tiene implícita una dependencia con la temperatura (pues pasa de un valor finito a $T < T_c$ a ser nula para $T > T_c$).

La segunda ecuación de London se deriva de la primera. Tomando el rotor a la ecuación (2.9)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{J}) = \frac{c}{4\pi\lambda_L^2} (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (2.11)$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$\boxed{\nabla \times \mathbf{J} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{B}}, \quad (2.12)$$

que es la segunda ecuación de London. Tomando rotor a esta ecuación y usando la identidad vectorial $\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B}$, se puede encontrar que

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \lambda^{-2} \mathbf{B} \quad (2.13)$$

Recordando que $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$, se tiene que

$$\mathbf{J} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{A} \quad (2.14)$$

en el *gauge* de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Este *gauge* es consistente con la ecuación de continuidad, ya que debe cumplirse $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$.

Las ecuaciones de London se basan en la idea de existe un fluido de portadores de carga superconductores. En el contexto de lo que sabemos hoy en día, se pueden justificar las ecuaciones obtenidas anteriormente. De la teoría microscópica, se sabe que el estado fundamental está descripto por una función de onda colectiva de muchos pares de Cooper. Esta función de onda tiene la propiedad de que en ausencia de campos externos, y debido al teorema de Bloch, el valor medio del momento en el estado fundamental debe ser nulo $\langle \psi | \mathbf{p} | \psi \rangle = 0$. Si asumimos *rigidez* de la función de onda (un parámetro cuantificable a través del análogo a una masa), es decir que esta relación se mantiene incluso ante la aplicación de campos externos, y dado que el momento canónicamente conjugado será $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, entonces

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{e\mathbf{A}}{mc}, \quad (2.15)$$

que si recordamos que $\mathbf{J} = -n_s e \langle \mathbf{v} \rangle$ implica la ecuación 2.14.

Una de las preguntas que quedan abiertas tras esta teoría es cómo se forma y describe este fluido de portadores superconductores, además de determinar cuál es la naturaleza exacta de éstos. Muchos de los grandes físicos de la época trabajaron en buscar una respuesta, aunque recién en 1957 (casi 50 años después del descubrimiento del fenómeno por Onnes) se tuvo una respuesta debido al modelo de Bardeen-Cooper-Schrieffer; modelo que les valió el premio Nobel en 1972.

2.1.3. Teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer

El camino hacia la teoría BCS está allanado por una serie de observaciones experimentales que cimentaron las bases fenomenológicas de la teoría. Un primer atisbo de la fenomenología vino a través de las mediciones del calor específico a bajas temperaturas, que mostró que el espectro de energías en un superconductor tiene un *gap*, en contraste

con el espectro casi contínuo en un metal ordinario (recordemos que la excitación electrón-agujero en las cercanías de la superficie de Fermi es muy barato energéticamente).

Otra observación clave fue el *efecto isotópico*. Estudiando la temperatura de transición superconductora T_c de materiales dopados con isótopos de sus elementos, se mostró que $T_c \propto M^{-1/2}$, donde M es la masa del isótopo. Como esta masa solo está relacionada a los iones que forman la red cristalina subyacente, esta observación experimental mostró que las variaciones de la red (los fonones) juegan un papel fundamental en la física de estos compuestos.

El aspecto central de la teoría BCS es la formación de pares de electrones acoplados, llamados pares de Cooper, con spines y momentos opuestos. Estos pares forman luego un estado coherente macroscópico, que muestra un espectro con *gap* y diamagnetismo perfecto. Un aspecto clave para la formación de los pares es la existencia de una superficie de Fermi bien definida.

Pares de Cooper

Supongamos dos electrones que interactúan entre ellos mediante un potencial atractivo, función de dos puntos, $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. La ecuación de Schrödinger asociada es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.16)$$

con $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ la función de onda y E la energía. Haciendo un cambio de variables al centro de masa del sistema $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$ y a la distancia relativa entre partículas $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, se tiene que

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.17)$$

donde $m^* = 2m$ y $\mu = \frac{m}{2}$. Como el potencial no depende de la coordenada del centro de masa \mathbf{R} , las soluciones serán del tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{KR}} \quad (2.18)$$

lo que implica

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \tilde{E} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

donde se define $\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m^*}$. El autovalor que corresponde a la energía más baja es aquel que cumple $\mathbf{K} = \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2 = 0$, es decir, cuando los dos electrones tienen momentos opuestos. Dependiendo de la simetría de la parte espacial de la función de onda, los spines de los electrones se pueden aparear en forma de singlete (si es par) o de triplete (si es impar) para respetar la antisimetría total de la función de onda.

Se puede mostar, tomando la transformada de Fourier a la ecuación de Schrödinger, que

$$\int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}') = (E - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) \psi(\mathbf{k}) \quad (2.20)$$

donde $\psi(\mathbf{k}) = \int d^3 r \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ y definimos la energía de un electrón $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Un estado ligado de dos electrones debe ser de energía $E < 2\epsilon_{\mathbf{k}}$. Si definimos la función de onda modificada $\Delta(\mathbf{k}) = (E - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) \psi(\mathbf{k})$, se tiene:

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{2\epsilon_{\mathbf{k}} - E} \Delta(\mathbf{k}') \quad (2.21)$$

Supongamos que el potencial debe ser atractivo $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -V_0$ y propongamos una solución para la función de onda $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$. Como la función de onda es par, los electrones deben estar en un estado de singlete de spin (spines antiparalelos). Realizando estos reemplazos y pensando que $\epsilon_{\mathbf{k}}, \epsilon_{\mathbf{k}'} < \hbar\omega_D$ (con ω_D la frecuencia de Debye), se tiene:

$$\Delta = \frac{V_0 \Delta m^{3/2}}{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2} \int_0^{\omega_D} \frac{d\epsilon \sqrt{\epsilon}}{2\epsilon - E} \quad (2.22)$$

$$1 = \frac{V_0 m^{3/2}}{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2} \left[\sqrt{\omega_D} - \frac{\sqrt{-E}}{2} \arctan \left(\sqrt{\frac{2\omega_D}{-E}} \right) \right]. \quad (2.23)$$

Esta última ecuación permite obtener el valor de $E < 0$ del estado ligado en función del potencial V_0 . Para que sea ligado, tomamos el límite $E \rightarrow 0^-$ para obtener el valor mínimo de V_0 :

$$V_{0,min} = \frac{\sqrt{2} \hbar^3 \pi^2}{m^{3/2} \sqrt{\omega_D}} \quad (2.24)$$

A priori, uno concluiría que es necesario un cierto límite para V_0 para que exista un estado ligado. Sin embargo, no tuvimos en cuenta un detalle importante: en el sistema verdadero de muchos cuerpos, solo los electrones que estén en el entorno del nivel de Fermi serán afectados por la interacción atractiva. Para imitar esta propiedad, ahora $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -V_0$ para los estados electrónicos desocupados por encima del nivel de Fermi $\epsilon_F, \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_F, \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F < \hbar\omega_D$. Como $\hbar\omega_D \ll \epsilon_F$, podemos aproximar la densidad de estados por su valor en el nivel de Fermi $\rho(\epsilon_F)$. Para una función de onda constante $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$ se tiene:

$$\Delta = V_0 \rho(\epsilon_F) \Delta \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{2\epsilon - E} \quad (2.25)$$

En el límite de $V_0 \rho(\epsilon_F) \ll 1$, la energía es aproximadamente la de Fermi de donde $2\epsilon_F - E + 2\hbar\omega_D \cong 2\hbar\omega_D$. Definiendo la energía de ligadura $E_b = 2\epsilon_F - E$ se obtiene

$$E_b = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{V_0 \rho(\epsilon_F)}} \quad (2.26)$$

Analizando esta expresión notamos que un estado ligado se va a formar independientemente de la amplitud de la interacción atractiva V_0 . Estos estados ligados son los *Pares de Cooper*. La propiedad física fundamental que diferencia este caso del caso de los electrones libres es la existencia de una superficie de Fermi bien definida, separando los estados ocupados de los desocupados.

El estado fundamental BCS

Como se expuso anteriormente, dos electrones en el entorno del nivel de Fermi son inestables ante la formación de un par de Cooper para una interacción atractiva arbitrariamente pequeña. El estado fundamental BCS se compondrá entonces de una superposición de muchos de estos estados.

El lenguaje natural para la formulación de este estado es el de segunda cuantización, que se encuentra por fuera de los objetivos de esta tesis. Sin embargo, mostraremos algunos aspectos fundamentales del formalismo sin entrar en detalles procedimentales.

El primer paso es proponer un hamiltoniano efectivo para el sistema

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \quad (2.27)$$

donde $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ es un operación de creación para un electrón de momento \mathbf{k} y spin σ , $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ (con μ el potencial químico). El segundo término tiene operadores de creación y destrucción para los pares de Cooper (dos electrones con momentos y spin opuestos). En la aproximación de campo medio, se define la función *gap* como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle. \quad (2.28)$$

La elección del nombre quedará claro más adelante. Realizando una transformación de Bogoliubov a los operadores de creación y destrucción,

$$c_{\mathbf{k},\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \quad (2.29)$$

$$c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k},\uparrow}, \quad (2.30)$$

donde γ son operadores fermiónicos e imponiendo que se satisfagan las relaciones de commutación fermiónicas, se deduce una condición de normalización

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (2.31)$$

Sustituyendo en el hamiltoniano original y realizando el álgebra correspondiente, se puede mostrar que

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \quad (2.32)$$

donde se define la energía de excitación $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$. Esta definición aclara el significado de $\Delta_{\mathbf{k}}$, ya que incluso en el nivel de fermi donde $\xi_{\mathbf{k}} = 0$, el espectro de energía del sistema superconductor tiene una separación de ancho $|\Delta_{\mathbf{k}}|$. Entonces, es necesario suministrar $2|\Delta_{\mathbf{k}}|$ al sistema para excitar sus cuasipartículas, llamadas *bogoliubones*. Es interesante notar que estos bogoliubones son una superposición de electrón-agujero (se crea un electron de conducción a expensas de un agujero en valencia). En el estado superconductor, los bogoliubones son una superposición de electrón-agujero y por lo tanto el estado fundamental BCS es tal que coincide con el vacío de estas cuasipartículas:

$$\gamma_{\mathbf{k},\sigma} |\Psi_{BCS}\rangle = 0. \quad (2.33)$$

En términos del estado de vacío de electrones, se puede mostrar que

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}) |0\rangle \quad (2.34)$$

Esta es una de las conclusiones más interesantes de la teoría BCS. El estado fundamental es una superposición de estados electrónicos que se describe mediante un único objeto matemático. El descubrimiento de esta función agrega una capa más de genialidad a la propuesta original de Ginzburg y Landau, ya que la teoría BCS se formuló casi 30 años después.

2.2. Teoría de Ginzburg-Landau de la Superconductividad

La teoría BCS es una excelente herramienta para analizar el estado superconductor en los casos en los que el gap de energía $\Delta_{\mathbf{k}}$ sea constante en el espacio. Sin embargo, las situaciones más ricas físicamente provienen de la inhomogeneidad espacial, como por ejemplo en el estudio del estado intermedio en superconductores tipo I, o en el estado mixto en superconductores tipo II. En tales situaciones la teoría microscópica se puede poner muy complicada y es por eso que una teoría fenomenológica como la de Ginzburg-Landau permite un estudio más sencillo de la física relevante. Además, en situaciones en las que la teoría microscópica puede ser muy compleja de formular, la teoría fenomenológica permite capturar la física esencial detrás de los sistemas y retroalimentarse con una formulación desde primeros principios.

2.2.1. La Energía Libre de Helmholtz

En gran parte de este trabajo, la variable de control será la inducción magnética $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, por lo que termodinámicamente la energía libre a utilizar es la de Helmholtz. En casos en los que el campo externo sea la variable de control (y el campo \mathbf{B} se ajuste a éste), será necesario hacer una transformada de Legendre y escribir la energía libre de Gibbs (ver Capítulo 5). La energía libre para un superconductor en el modelo original de GL es:

$$F_S = F_{N,0} + \int_V \left[\alpha_{GL} |\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m} |\mathcal{D}\psi|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{8\pi} \right], \quad (2.35)$$

donde $F_{N,0}$ es la energía libre del estado normal (a campo nulo), $\psi(\mathbf{r})$ es el parámetro de orden complejo (asociado a la densidad de pares de Cooper n_s según $|\psi(\mathbf{r})|^2 = n_s$), $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ es el potencial vector electromagnético (relacionado con la inducción magnética a través de $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r})$) y $\mathcal{D} = -i\nabla - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}$ es la derivada covariante usual.

La energía libre tiene unidades de:

$$[F_S] = \frac{ML^2}{T^2} \quad (2.36)$$

donde M, L, T son unidades de masa, longitud y tiempo respectivamente.

La dependencia con la temperatura se expresa en el parámetro de GL como $\alpha_{GL} = \alpha_0(T - T_c)$, donde por inspección se puede notar que $[\alpha_0] = \frac{[E]}{[T]} = [k_B]$, con k_B la constante de Boltzmann. El cambio de signo de α_{GL} en T_c separa la fase normal de la fase superconductora. Las unidades de β_{GL} son tales que:

$$[F_S] = L^3(L^{-3/2})^4[\beta_{GL}] \implies [\beta_{GL}] = [L]^3[E] \quad (2.37)$$

Las unidades de campo magnético se pueden encontrar a partir de la definición de la fuerza de Lorentz. Si $F_L = \frac{q}{c}\mathbf{v}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})$ entonces:

$$[F_L] = \frac{ML}{T^2} = \frac{[q]}{[c]}[\mathbf{v}(\mathbf{r})][\mathbf{B}(\mathbf{r})] \implies [\mathbf{B}(\mathbf{r})] = \boxed{\frac{ML}{QT^2}} \quad (2.38)$$

De la definición del campo magnético a partir del potencial vector entonces:

$$[\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})] = \frac{[\mathbf{A}(\mathbf{r})]}{L} = [\mathbf{B}(\mathbf{r})] \implies [\mathbf{A}(\mathbf{r})] = \boxed{\frac{ML^2}{QT^2}} \quad (2.39)$$

El parámetro m en la energía libre tiene unidades de masa y se puede asociar tanto a la masa de los pares de Cooper como a la rigidez del parámetro de orden, según la necesidad de interpretación.

Como el cuadrado del parámetro de orden tiene unidades de densidad (relacionada a la densidad de portadores superconductores $n_S(\mathbf{r})$), entonces:

$$[|\psi|^2] = \frac{1}{L^3} \implies [\psi] = L^{-3/2} \quad (2.40)$$

Esto entonces implica que las unidades de α_{GL} deben ser de energía:

$$[F_S] = L^3L^{-3}[\alpha_{GL}] \implies [\alpha_{GL}] = [F_S] \quad (2.41)$$

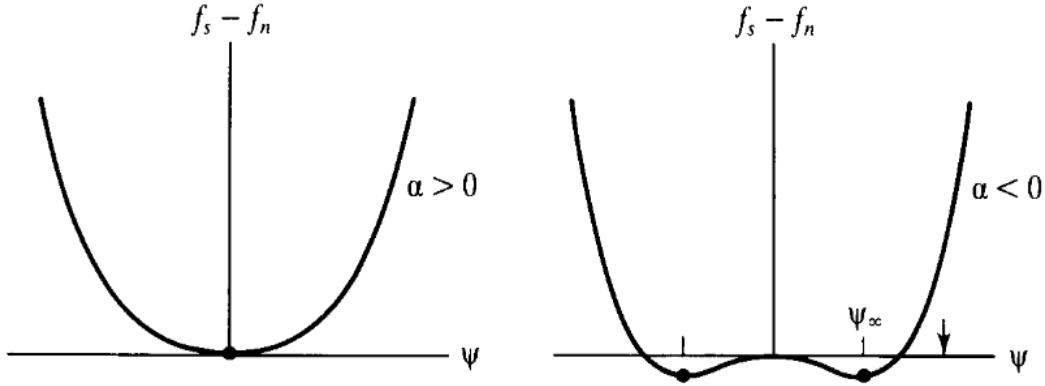


Figura 2.3: (izq.) Potencial de GL para $\alpha_{GL} > 0$. El mínimo de la energía se da para $\psi = 0$, es decir, solo el estado normal es estable. (der.) Mismo potencial para $\alpha_{GL} < 0$. El estado normal es inestable, apareciendo dos nuevos estados posibles de menor energía $\pm\psi_\infty$ (imagen tomada de [25], sección 4.1)

El parámetro α_{GL} es el que controla cuando se da la transición de fase, ya que en ausencia de campos y gradientes:

$$F_S = F_{N,0} + \int dV [\alpha_{GL}|\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2}|\psi|^4] \quad (2.42)$$

La forma cuadrática que queda definida necesita que $\beta_{GL} > 0$ ya que si no, el mínimo podría estar definido para valores arbitrariamente grandes de $|\psi|^2$. Por otro lado, los mínimos de la forma cuadrática cambian según si α_{GL} es positivo o negativo (ver Fig. 2.3). Si $\alpha_{GL} > 0$ entonces el mínimo es $|\psi|^2 = 0$, que corresponde al estado normal. Si $\alpha_{GL} < 0$, el mínimo ocurre para:

$$|\psi|_\infty^2 = -\frac{\alpha_{GL}}{\beta_{GL}} \quad (2.43)$$

En este valor, la energía libre por unidad de volumen $f = \frac{F}{V}$ toma el valor

$$f_s - f_{n,0} = -\frac{\alpha_{GL}^2}{2\beta_{GL}} \quad (2.44)$$

La energía de condensación $f_s - f_{n,0}$ del estado superconductor es la diferencia de energías entre el estado normal y el estado superconductor a campo nulo. La existencia del estado

Meissner y que éste sea reversible implica que la superconductividad se debe anular para un campo magnético crítico H_c . Este campo lleva una energía $\frac{H_c^2}{8\pi}$, que debe ser igual a la energía de condensación, en la transición de fase. De esta forma, el *campo crítico termodinámico* queda definido como

$$\frac{H_c^2}{8\pi} = f_{n,0} - f_s \quad (2.45)$$

En términos de los parámetros de GL, se tiene

$$-\frac{H_c^2}{8\pi} = f_s - f_{n,0} = -\frac{\alpha_{GL}^2}{2\beta_{GL}} \quad (2.46)$$

En todo el trabajo de esta tesis doctoral, consideraremos que el parámetro de orden superconductor presenta simetría de traslación en la dirección \hat{z} , por lo que cualquier dependencia con esta coordenada será ignorada.

2.2.2. Ecuaciones de Ginzburg-Landau

En el caso de no tener condiciones que impongan corrientes, campos o gradientes, la energía libre (2.35) toma un mínimo para un parámetro de orden constante $\psi = \psi_\infty$. Si esto no es así, el parámetro de orden deberá ajustarse para minimizar la energía libre. De aquí en más, omitiremos la dependencia explícita con la posición en los campos, a menos que sea necesario para el contexto.

Las ecuaciones de Euler-Lagrange para el potencial vector \mathbf{A} se escriben como:

$$\frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial F_S}{\partial \mathbf{A}} - \nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial (\nabla \mathbf{A})} \right) = 0 \quad (2.47)$$

Ahora, de las ecuaciones de Maxwell, se tiene:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad (2.48)$$

De donde se deduce que (ver Apéndice A):

$$\vec{J} = \frac{ie\hbar}{m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^2}{mc}|\psi|^2\mathbf{A} \quad (2.49)$$

Notar que esta expresión tiene la forma usual de una corriente de probabilidad en mecánica cuántica para una partícula cargada en un campo magnético. Incluso en ausencia de campos externos, la variación espacial del parámetro de orden produce una corriente, asociada puramente a los portadores superconductores. Estas corrientes interactúan entre ellas dando origen a otra fenomenología, como la interacción entre vórtices, como analizaremos más adelante.

Aplicamos ahora el mismo método variacional para obtener la ecuación diferencial que gobierna la dinámica del parámetro de orden superconductor. La ecuación de Euler-Lagrange correspondiente es:

$$\frac{\delta F_S}{\delta\psi^*} = \frac{\partial F_S}{\partial\psi^*} - \nabla\left(\frac{\partial F_S}{\partial(\nabla\psi^*)}\right) = 0 \quad (2.50)$$

La elección de variar respecto del parámetro conjugado tiene como objetivo que quede una ecuación para el parámetro de orden sin conjugar. Un cálculo directo (ver Apéndice A) permite obtener:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \alpha_{GL}\psi + \beta_{GL}|\psi|^2\psi + \frac{i\hbar e}{2mc}\psi\nabla.\mathbf{A} + \frac{i\hbar e}{mc}\mathbf{A}.\nabla\psi + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi. \quad (2.51)$$

La ecuación tiene una forma similar a una ecuación de Schrodinger para partículas cargadas. El término no lineal actúa como un potencial repulsivo de ψ consigo mismo, que favorece soluciones que se extienden en el espacio de la forma más uniforme posible.

Asociado al parámetro de orden superconductor existe una longitud característica ξ que mide la escala natural de variación de ψ . Para obtenerla, consideremos un caso simplificado en el que $\mathbf{A} = 0$. En este caso, ψ será real ya que todos los coeficientes son reales. Si

consideramos una función de onda normalizada unidimensional (por simplicidad) $f = \frac{\psi}{\psi_\infty}$, donde $|\psi_\infty|^2 = -\frac{\alpha_{GL}}{\beta_{GL}} > 0$, la ecuación se puede escribir como:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha_{GL}\psi + \beta_{GL}\psi|\psi|^2 \implies \frac{\hbar^2}{2m\alpha_{GL}(T)} \frac{d^2f}{dx^2} = f - f^3 \quad (2.52)$$

Definimos entonces la longitud de coherencia superconductora como:

$$\xi^2(T) = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}(T)|} \quad (2.53)$$

El trabajo de Abrikosov en 1957 [16] mostró que las ecuaciones de GL admiten soluciones tipo vórtices. El parámetro de orden ψ se hace nulo de forma suave donde hay vórtices, mientras que la fase del mismo varía en 2π alrededor de un vórtice aislado. El campo magnético local es máximo donde $\psi = 0$, como se muestra en la Fig. 2.4.

2.2.3. Cuantización del Fluxoide

A partir de la ecuación para la corriente superconductora (Ec. 2.49) es fácil mostrar que el fluxoide magnético en una muestra superconductora debe estar cuantizado. Como es un número complejo, podemos escribir al parámetro de orden superconductor como:

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|e^{i\phi(\mathbf{r})}. \quad (2.54)$$

Supongamos que podemos despreciar las variaciones de la amplitud $|\psi| \cong \text{cte}$ (que es algo bastante razonable en la medida que $d \ll \xi(T)$, con d una longitud característica del superconductor). La ecuación para la corriente superconductora \mathbf{J} será:

$$\mathbf{J} = -\frac{2e\hbar}{m}|\psi|^2\nabla\phi - \frac{e^2}{mc}|\psi|^2\mathbf{A} = \frac{e}{m}|\psi|^2\left(2\nabla\phi - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right), \quad (2.55)$$

donde absorbo un signo menos en la definición de la fase ϕ . Como esta última se refiere a la fase de un campo complejo, se tiene que:

$$\oint \hbar\nabla\phi d\mathbf{l} = 2\pi n\hbar = nh \quad (2.56)$$

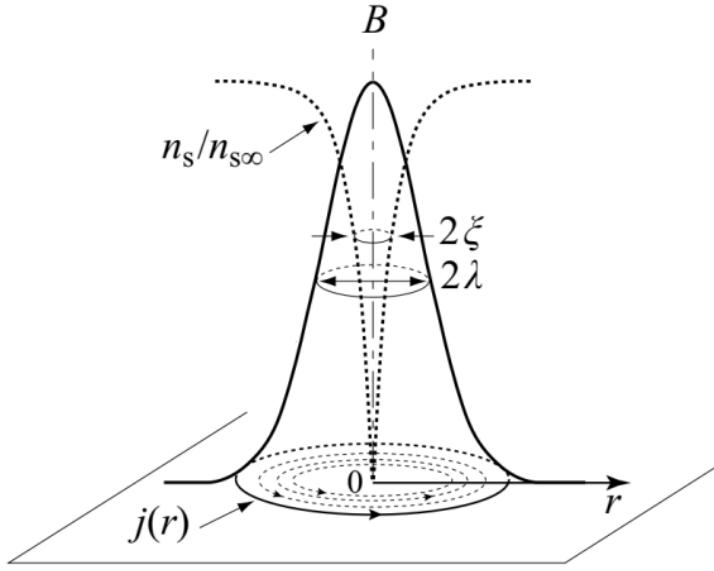


Figura 2.4: Esquema de la densidad de portadores $n_s = |\psi|^2$ (línea punteada, normalizada por la densidad de vacío $n_\infty = |\psi|_\infty^2$) y el campo magnético \mathbf{B} (línea sólida) asociado a un vórtice superconductor. Se identifican también las longitudes de coherencia superconductora ξ y la de penetración del campo magnético λ_L . El parámetro de orden tiende a cero en donde el campo magnético es máximo. Se muestran también las corrientes asociadas en cada vórtice.

para cualquier curva cerrada. Entonces:

$$\begin{aligned}
 nh &= \frac{e}{c} \oint \mathbf{A} + \frac{mc}{2e^2|\psi|^2} \mathbf{J} = \frac{e}{c} \oint \mathbf{A} + \frac{\lambda_L^2}{2} \left(\frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \right) \\
 n \left(\frac{hc}{e} \right) &= n\phi_0 = \oint \mathbf{A} + \frac{\lambda_L^2}{2} \left(\frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \right) = \Phi,
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

donde $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ es el cuanto de flujo. La existencia de esta cantidad ha sido confirmada experimentalmente en numerosas ocasiones, el primero y más importante el experimento de Little-Parks [26].

2.2.4. Nucleación de superconductividad en muestras bulk: campos críticos

Supongamos ahora que no nos limitamos a que el superconductor sea delgado y por lo tanto la amplitud del parámetro de orden puede variar. Sin embargo, las ecuaciones GL son un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales acopladas, por lo que tratar casos no límite puede ser muy complicado y las soluciones obtenidas son siempre aproximaciones. Para evitar esta complejidad, veamos qué pasa si linealizamos las ecuaciones completas. Esto es, despreciar el término $\psi|\psi|^2$ (o lo que es lo mismo, el término $\frac{\beta_{GL}}{2}|\psi|^4$ en la energía libre). Esto es válido en la medida en que $|\psi|^2 \ll \psi_\infty^2 = -\frac{\alpha_{GL}}{\beta_{GL}}$, ya que si $\psi \cong \psi_\infty$ entonces los términos proporcionales a α_{GL} y β_{GL} son del mismo orden. Así, la ecuación para el parámetro de orden superconductor se puede expresar como:

$$\left(\frac{\nabla}{i} - \frac{\mathbf{A}}{\phi_0} \right)^2 \psi = -\frac{2m\alpha_{GL}}{\hbar^2} \psi = \frac{1}{\xi^2} \psi, \quad (2.58)$$

que es idéntica a la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m bajo la acción de un campo magnético $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$, donde $-\alpha_{GL} = |\alpha_{GL}|$ juega el rol de autovalor de energía y $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ es el cuanto de flujo magnético. Una simplificación adicional para poder trabajar la ecuación proviene de que $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{ext}$ ya que podemos considerar que todos los efectos de apantallamiento debido a supercorrientes son proporcionales a $|\psi|^2$ y no los tendremos en cuenta en esta formulación.

Para ilustrar la idea, consideremos un material superconductor en volumen y un campo externo \mathbf{H} aplicado de forma perpendicular al mismo. Llámese a este eje \hat{z} . En el *gauge* de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, eligiendo $\mathbf{A} = Hx\hat{y}$ tenemos que $\nabla \times \mathbf{A} = H\hat{z}$. Reemplazando en la ecuación 2.58, se tiene:

$$\left(-\nabla^2 - \frac{Hx}{i\phi_0} \partial_y + \frac{H^2 x^2}{\phi_0^2} \right) \psi = \frac{\psi}{\xi^2} \quad (2.59)$$

Consideramos simetría de traslación en las direcciones z e y , por lo que la solución va a ser

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} f(x). \quad (2.60)$$

Reemplazando en la ecuación 2.59, se obtiene

$$-f'' + \left(\frac{2\pi H}{\phi_0} \right)^2 f (x - x_0)^2 = f \left(\frac{1}{\xi^2} - k_y^2 \right), \quad (2.61)$$

donde $x_0 = \frac{\phi_0 k_y}{2\pi H}$. Notemos que, formalmente, esta ecuación es igual (tras multiplicar ambos miembros por $\frac{\hbar^2}{2m}$) a la ecuación de Schrödinger para una partícula cargada en un campo magnético, identificando que

$$V_{OA} = k(x - x_0)^2 \quad ; \quad k = \frac{H^2 \hbar^2 k_y^2}{2m \phi_0^2} \quad (2.62)$$

hace las veces de un potencial armónico. Esto nos lleva a los conocidos niveles de Landau, separados entre ellos en $\hbar\omega_c$, la frecuencia de ciclotrón. Las energías son [25]

$$\epsilon_n = (2n + 1) \frac{\hbar e H}{mc}, \quad (2.63)$$

que deberían ser iguales a las autoenergías $\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_y^2 \right)$. Despejando, obtenemos

$$H = \frac{\phi_0}{2\pi(2n+1)} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_y^2 \right) \quad (2.64)$$

El máximo campo posible para el cual existe superconductividad, el campo crítico H_{c2} , será para $k_y = 0$ y $n = 0$. Así resulta que

$$H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi\xi^2(T)}. \quad (2.65)$$

La teoría BCS permite calcular la longitud de coherencia de manera exacta en función de la temperatura

$$\xi(T) = \frac{\phi_0}{2\sqrt{2}\pi H_c(T)\lambda_L(T)}, \quad (2.66)$$

y a partir de esta expresión se obtiene el parámetro de GL

$$\kappa = \frac{\lambda_L(T)}{\xi(T)} = \frac{2\sqrt{2}\pi H_c \lambda_L^2(T)}{\phi_0} \quad (2.67)$$

Reemplazando entonces en 2.65, obtenemos expresiones equivalentes para el campo crítico H_{c2}

$$H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi\xi^2(T)} = \frac{4\pi H_c^2 \lambda_L^2}{\phi_0} = \sqrt{2}\kappa H_c \quad (2.68)$$

Esta última expresión muestra que el valor $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ separa aquellos superconductores de tipo I ($H_c > H_{c2}$) de los tipo II ($H_c < H_{c2}$). En los superconductores de tipo II, penetra campo magnético dentro del material superconductor en forma de vórtices, cada uno contribuyendo en ϕ_0 al flujo magnético. Para cualquier campo menor que H_{c2} existirá una cantidad finita de vórtices dentro del material. Definimos el campo crítico a partir del cual penetra el primer vórtice dentro de la muestra como H_{c1} . En este valor de campo, la energía libre de Gibbs $G_S = F_S - \frac{1}{4\pi} \int_V \mathbf{B} \cdot \mathbf{H} dV$ debe ser igual, por definición de transición de fase, tanto si el vórtice está (G_v) o no (G_{nv}) dentro de la muestra. Cada vórtice lleva una energía ϵ_1 por unidad de longitud (el vórtice tiene simetría de traslación en dirección \hat{z} , debido a que la muestra es bulk). Se tiene entonces que

$$G_{nv} = G_v \implies F_S = F_S + \epsilon_1 L - \frac{H_{c1}}{4\pi} \int_V B dV \quad (2.69)$$

Como cada vórtice contribuye en ϕ_0 y el campo magnético se encuentra localizado alrededor de él, la integral se calcula fácilmente como

$$\int_V B dV = \phi_0 L \quad (2.70)$$

donde L es la longitud del vórtice. De esta forma, el campo crítico H_{c1} resulta

$$H_{c1} = \frac{4\pi\epsilon_1}{\phi_0} \quad (2.71)$$

Para $\kappa \gg 1$ se puede mostrar que [25]

$$H_{c1} = \frac{H_c}{\sqrt{2}\kappa} \ln \kappa \quad (2.72)$$

2.3. La nematicidad electrónica

Los cristales líquidos se suelen componer de moléculas poliméricas que tienen una dimensión de longitud mucho más grande que las otras, es decir, sus componentes son moléculas alargadas. En un fluido isótropo a temperatura finita, las orientaciones y posiciones de los centros de masa de las moléculas son aleatorios, ya que no existen fuerzas intrínsecas entre ellas que seleccionen una u otra dirección de orientación. En una fase nemática, las posiciones de los centros de masa de las moléculas siguen siendo aleatorias pero sus ejes largos están orientados (en promedio) en alguna dirección dada por un vector director \mathbf{n} , como podemos observar en la Fig. 2.5. En términos de simetrías, podemos pensar que se mantiene la simetría de traslación del fluido pero se rompe la simetría de rotación.

En años recientes, se ha encontrado que existen numerosas evidencias experimentales que apuntan a la existencia de una fase **nemática electrónica** [27–29]. Mediciones experimentales [5–12] han mostrado una fuerte anisotropía en las propiedades de transporte, muy dependientes de la temperatura, tanto en cupratos de alta temperatura crítica como en materiales basados en hierro. En el caso de fluidos clásicos, el origen de las anisotropías viene fuertemente dado por la forma de las moléculas que componen los fluidos y las interacciones entre las mismas. En los materiales superconductores que presentan nematicidad, los constituyentes son electrones y por lo tanto son partículas cuasi-puntuales, por lo que pierde sentido la definición clásica referida al orden de orientación de un conjunto de moléculas extensas. El origen físico de las anisotropías en estos materiales proviene de las interacciones microscópicas y de las correlaciones entre los electrones que los componen. El espacio

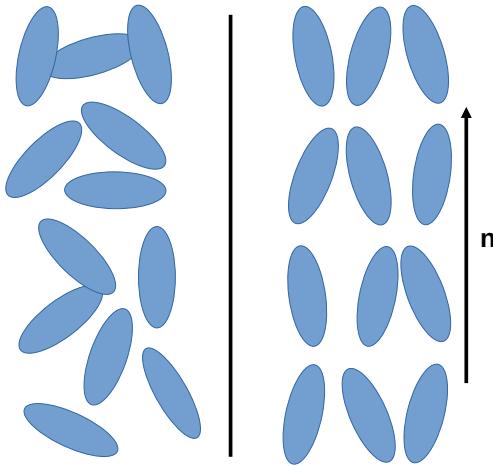


Figura 2.5: *Esquema de las fases isótropa (izq.) y nemática (der.) en un líquido clásico. En un líquido isotrópico las orientaciones de las moléculas y sus centros de masa siguen una distribución aleatoria, por lo que no hay un ordenamiento de largo alcance. En la fase nemática, existe un orden orientacional de largo alcance, con ruptura local de la simetría de rotación, dado por el vector n .*

de fases suele ser rico e incluye una serie de simetrías que se rompen espontáneamente, entre las cuales se destaca la fase nemática.

Usaremos de aquí en más el término *nemático electrónico* para un fluido electrónico que rompe alguna simetría del Hamiltoniano subyacente y que intercambia dos ejes del sistema, es decir, rompe la simetría de rotación [13]. La fase nemática se suele presentar en sistemas que son materiales conductores metálicos y en el mejor de los casos superconductores. En el caso más sencillo, dado un cristal con simetría de rotación en 90° (i.e., simetría C_4) la fase nemática provoca una reducción de la simetría a una más sencilla de rotación de 180° (C_2). Es común referirse a este tipo de nematicidad como *Ising-nematic*.

En cuanto a su representación formal, en el contexto de la teoría de Landau, el parámetro de orden nemático puede ser una serie de distintos observables físicos. Gran parte de la física asociada a sistemas nemáticos electrónicos se puede entender en términos de simetrías que espontáneamente se rompen. En rigor, la nematicidad se puede representar como un

tensor simétrico de traza nula [13], por lo que cualquier cantidad medible que cumpla estos requisitos puede funcionar como un buen parámetro de orden. Algunos de los más utilizados son la anisotropía resistiva, la anisotropía estructural (medida como la resta ponderada de los factores de estructura cristalinos) o las anisotropías en las correlaciones de spin.

En muchas familias de superconductores no convencionales (aquellos no descriptos por la teoría BCS, como los basados en hierro que describiremos en la sección 2.4) la fase nemática aparece en conjunto con una transición de fase de la estructura cristalina subyacente de tetragonal a ortorrómbica, que rompe la simetría C_4 a una simetría C_2 [11, 14]. A diferencia de lo que ocurre en un líquido clásico, donde la ruptura de simetría es continua y el parámetro de orden tiene carácter tensorial [13], una consecuencia natural de la ruptura de simetría es la aparición de paredes de dominio que separan regiones con distinta orientación de los ejes cristalinos (ver Fig. 4.1). Como discutimos en [18], la nematicidad electrónica aparece íntimamente relacionada a la ruptura de la simetría cristalina. Es por esta razón que en esta tesis trabajaremos con un parámetro de orden real tipo Ising, que cumple con la propiedad de simetría de cambiar su signo ante una rotación de 90° de la estructura cristalina. En la sección 3.4 y en la introducción del Capítulo 4 nos referiremos a esta cuestión en más detalle.

Mientras que los aspectos relacionados a la simetría son fáciles de tratar desde la perspectiva de la mecánica estadística, los mecanismos microscópicos que dan origen a fases nemáticas electrónicas son ampliamente debatidos hasta el día de hoy. Por la complejidad y variabilidad de fenómenos en los que la nematicidad tiene influencia, un tratamiento teórico puede ser muy complejo y varía ampliamente de material en material. Existen una multiplicidad de teorías microscópicas que dan idea de la formación de estados nemáticos. Por mencionar algunos ejemplos, se propone por ejemplo una inestabilidad de Pomeran-

chuk [30, 31](de origen termodinámico) que rompe la simetría de la superficie de Fermi, aplicaciones de la teoría de líquidos nemáticos clásicos [32] o la existencia de puntos críticos cuánticos [13, 33, 34]. En todos los casos, las teorías predicen una fuerte anisotropía en las propiedades de transporte, dependiente de la magnitud de la nematicidad, y una relevancia no trivial de los grados de libertad elásticos.

2.4. Superconductores basados en hierro

Entre las familias de materiales que exhiben fase superconductora se destacan aquellos que no pueden ser descriptos teóricamente mediante la teoría BCS, comúnmente denominados *superconductores no convencionales*. Esto es así ya que el mecanismo que da origen al apareamiento entre electrones no proviene de vibraciones de la red subyacente (fonones) y no se conoce el mecanismo microscópico exacto. Una particularidad de estos materiales es que presentan, entre otras propiedades, una serie de fases muy interesantes como fase superconductora, nemática o fases con orden magnético. Además, las correlaciones entre electrones tienen un papel fundamental en la determinación de sus propiedades físicas.

En el año 2008, se descubrieron los superconductores basados en hierro (FeSC) [35]. El hallazgo fue un gran paso hacia adelante en la temática, ya que el hierro es el material magnético por excelencia, fenómeno que no se lleva bien con la superconductividad debido al efecto Meissner. Existe una gran cantidad de evidencia hoy en dia [36–40] para decir que el mecanismo de apareamiento entre electrones es no convencional, es decir, no mediado por fonones.

Estos materiales presentan en su conjunto una temperatura crítica entre los 20 K y los 60K a presión ambiente (ver Tabla 2.1), aumentando en muchos casos hasta 140 K bajo presiones del orden de los GPa. Para más detalles sobre las interesantes propiedades

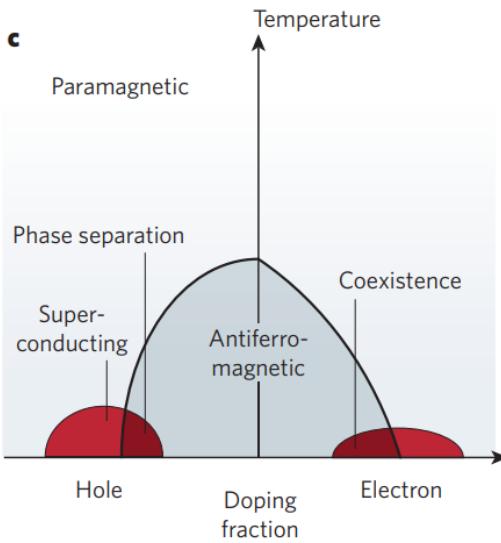


Figura 2.6: *Diagrama de fase representativo para la familia 122 de FeSC (tomado de [41]), siendo el BaFe₂As₂ un ejemplo. Los átomos de Ba se reemplazan por K (dotándolo de agujeros), los de Fe por Co (dotándolo de electrones) y los de As por P, suprimiendo el magnetismo sin cambiar la concentración de portadores de carga. El diagrama muestra que son fuertemente antiferromagnéticos en parte de su diagrama de fase y que la superconductividad emerge al suprimir el magnetismo, aunque existe una región de coexistencia de las fases.*

de estos materiales y posibles aplicaciones, se sugiere consultar las referencias [42–44]). A continuación, haremos una presentación de las propiedades relevantes a esta tesis.

Las interacciones electrón-electrón tienen un rol importante en la forma de sus diagramas de fase (ver Fig. 2.6). Es interesante que en algunos de estos materiales, como en los cupratos, la superconductividad emerge al suprimir el magnetismo mediante dopaje (aunque existen superconductores de este tipo que no presentan orden magnético de largo alcance, para más detalles se recomienda consultar [42]). Sin embargo, es posible también que emerja la superconductividad sin cambiar la densidad de carga por ejemplo mediante la aplicación de presión, el dopaje con P reemplazando As o diluyendo la capa de Fe con materiales como el Ru.

En cuanto a la estructura de estos compuestos, es sabido que hay al menos 5 estructuras

Pnictides de O	$T_c(K)$	Otros Pnictides	$T_c(K)$
$LaO_{0,89}FeAs$	26	$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	38
$LaO_{0,9}Fe_{0,2}As$	28.5	$Ca_{0,6}Na_{0,4}Fe_2As_2$	26
$CeFeAsO_{0,84}F_{0,1}$	41	$CaFe_{0,9}Co_{0,1}AsF$	22
$SmFeAsO_{0,9}F_{0,1}$	43	$Sr_{0,5}Sm_{0,5}FeAsF$	56
$NdFeAsO_{0,89}F_{0,11}$	52	FeSe	$\cong 19$

Cuadro 2.1: Algunos datos de temperaturas críticas de transición para FeSC, tomada de la referencia [44], para compuestos pnictides con y sin vacancias de oxígeno.

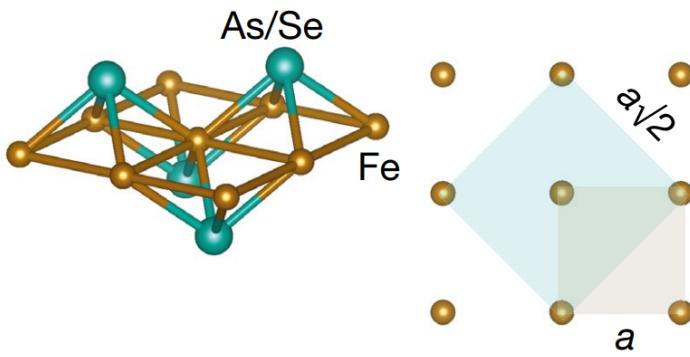


Figura 2.7: (Izq.) Plano de átomos de Fe en un FeSC típico, que se arreglan en una red cuadrada con los átomos coordinados fuera de este plano. (Der.) Estructura simplificada de una celda unidad conteniendo un único átomo de Fe (beige) y la celda unidad típica utilizada en cristalográfica, que contiene dos átomos (azul).

cristalinas compatibles con la superconductividad [42]. Todas estas estructuras presentan simetría tetragonal a temperatura ambiente. Los átomos de Fe se arreglan en una red cuadrada, coordinados tetraédricamente con elementos del grupo V (los pnictógenos P o As) o del grupo VI (calcógenos como S, Se y Te) (ver Fig. 2.7). Es común encontrar que tienen una transición de fase estructural de tetragonal a ortorrómbica. Los ejes cristalográficos en la fase ortorrómbica están rotados en 45° con respecto a los ejes tetragonales. Las muestras exhiben un denso arreglo de *maclas* estructurales, que separan distintos dominios [45].

La nematicidad electrónica, entendida en el sentido de la ruptura de la simetría discre-

ta de rotación, tiene un papel fundamental en las propiedades físicas reportadas. Existe evidencia experimental de anisotropías asociadas a propiedades de transporte [46], propiedades ópticas [47] y configuración electrónica local [48]. Cada una se puede asociar a una anisotropía en el plano de grados de libertad orbitales [49], magnéticos [50] y elásticos [51]. Estas mediciones son consistentes con una fase nemática electrónica. Existe un debate abierto respecto de qué grados de libertad son los más importantes en el desarrollo de la nematicidad. Sin embargo, mediciones de elasto-resistividad [52], de espectroscopía Raman [53] y de rigidez elástica [51] muestran que el carácter de la anisotropía es principalmente electrónico y de baja energía. No queda claro cuál es el mecanismo subyacente, ya que tanto grados de libertad electrónicos de espín u orbitales podrían ser los responsables; aunque las diferencias entre ellos pueden ser sutiles debido a que funcionan de forma conjunta. En general, la aparición del carácter nemático en las propiedades físicas viene acompañada de una transición de fase estructural de tetragonal a ortorrómbica. Por ejemplo, en compuestos basados en FeAs el orden nemático aparece como consecuencia directa de la distorsión estructural ortorrómbica (junto con un orden magnético de largo alcance, a diferencia de compuestos basados en FeSe que exhiben nematicidad sin magnetismo) [42].

Debido a la estrecha relación entre nematicidad y estructura cristalina, además de los grados de libertad de microscópicos electrónicos es necesario considerar los grados de libertad elásticos de la red cristalina si se quiere hacer un tratamiento completo del problema. Es cuestión de debate hasta el día de hoy si aparece primero la anisotropía estructural, que tenga efecto sobre los grados microscópicos, o es la anisotropía en el fluido electrónico que lleva a los grados estructurales.

Capítulo 3

Interacción Vortice-Vórtice en superconductores con nematicidad

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau son consistentes con la existencia de un núcleo normal dentro del material superconductor, límite que encontró Abrikosov en su estudio de las propiedades magnéticas de superconductores tipo II [2]. Estas singularidades llevan consigo una unidad de cuanto de flujo magnético $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ y son denominados comúnmente como *vórtices*. Alrededor de estos vórtices se producen corrientes con dirección azimutal que pueden interactuar de forma atractiva o repulsiva, según el signo relativo de las vorticidades que determina el sentido de giro de las corrientes.

La interacción vórtice-vórtice ha llamado la atención de diversas áreas de la física a lo largo de los años, desde la materia condensada hasta la física de altas energías, donde las soluciones tipo vórtices aparecen como soluciones no perturbativas del modelo de Higgs y otras teorías de campos [54].

Un primer paso en la dirección de la descripción de las interacciones entre vórtices se dio por Kramer [55], quien formuló una expresión sencilla (aproximada) para el potencial de interacción vórtice-vórtice. En términos del parámetro de GL, $\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$, mostró que para $\kappa <$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ los vórtices tienen una interacción atractiva, mientras que para $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$ la interacción es repulsiva. Este límite es también el que separa los superconductores de tipo I y tipo II, estos últimos caracterizados por la penetración de flujo magnético dentro del superconductor en forma de vórtices y la organización de éstos en redes triangulares. En el valor crítico $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$, los vórtices no interactúan entre ellos y se puede calcular su energía de forma exacta (como se presenta más adelante en este capítulo) y es proporcional al cuanto de flujo (o más precisamente, a la cantidad de vórtices en el material).

En este capítulo introduciremos una modificación a la teoría de Ginzburg-Landau presentada anteriormente, donde prescribiremos una dinámica temporal para las variables. Este modelo se conoce como *Teoría de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo* (o TDGL por sus siglas en inglés originalmente propuesto por Schmid [56]. Los resultados obtenidos que figuran en este capítulo se encuentran actualmente publicados en [17]. Presentaremos el parámetro de orden nemático η en el marco de esta teoría y cómo se acopla con la superconductividad mediante la introducción de dos términos en la energía libre: uno bicuadrático y uno trilineal. Mediante la resolución de las ecuaciones asociadas, observamos que la nematicidad tiene el efecto de disminuir el valor crítico κ_c que separa la superconductividad tipo I y II. Además, introduciremos el método numérico, central al desarrollo de esta tesis: un método pseudo-espectral que resuelve las ecuaciones dinámicas a partir de una expansión de Fourier de las variables y la utilización de transformadas rápidas de Fourier para el cómputo de términos no lineales.

3.1. Teoría de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo (TDGL)

Una modificación a las ecuaciones de GL que incluye el tiempo se puede establecer bajo la suposición de que la derivada de la energía libre es una fuerza generalizada [56]. Los

vórtices en una muestra superconductora se pueden pensar como defectos en el material, que tienen un centro normal compuesto por electrones. Al moverse, estos centros disipan energía en forma de calor (por efecto Joule). Además, puede haber efectos termodinámicos que provocan cambios irreversibles en el parámetro de onda superconductor. La dinámica puramente disipativa para el parámetro de orden superconductor y el potencial vector la escribimos como

$$\frac{\hbar^2}{2mD}\partial_t\psi = -\frac{\delta F}{\delta\psi^*} \quad \frac{\sigma}{c^2}\partial_t\mathbf{A} = -\frac{\delta F}{\delta\mathbf{A}}. \quad (3.1)$$

El parámetro σ es la conductividad eléctrica del estado normal (con unidades de $[\sigma] = [T]^{-1}$) +y D es una constante de difusión (con unidades de $[L]^2[T]^{-1}$). En lo que sigue, ignoraremos el término proporcional a la derivada segunda de \mathbf{A} y trabajaremos en un gauge tal que el potencial eléctrico escalar es $A_0 = \Phi = 0$. Es fácil mostrar que estas ecuaciones efectivamente son de una dinámica disipativa, ya que la derivada de la energía respecto del tiempo es siempre negativa:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\delta F_s}{\delta\psi^*}\partial_t\psi^* + \frac{\delta F}{\delta\mathbf{A}}\partial_t\mathbf{A} = -\left(\frac{2mD}{\hbar^2}\frac{\delta F}{\delta\psi^*}\frac{\delta F}{\delta\psi} + \frac{c^2}{\sigma}\frac{\delta F}{\delta\mathbf{A}}\frac{\delta F}{\delta\mathbf{A}}\right) < 0. \quad (3.2)$$

Para escribir el modelo en términos de variables adimensionales, reescalamos el parámetro de orden superconductor y el potencial vector según

$$\psi = \sqrt{\rho_0}\tilde{\psi} \quad \mathbf{A} = \frac{mc|\alpha_{GL}|}{e\hbar}\mathbf{a}, \quad (3.3)$$

con $\rho_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\beta_{GL}}$ que tiene unidades de $[\rho_0] = [L]^{-3}$. Esta redefinición implica que las unidades del potencial vector son ahora $[\mathbf{a}] = [L]$, con lo que $B = \nabla \times \mathbf{a}$ es adimensional. Recordando que el parámetro de GL es $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}$, la energía libre superconductora quedará escrita como

$$F = |\alpha_{GL}|\rho_0 \int dV \left[\frac{1}{2}(|\tilde{\psi}|^2 - 1)^2 + \xi^2|\nabla\tilde{\psi}|^2 - \mathbf{a}\text{Im}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi}) + \frac{1}{4\xi^2}\mathbf{a}^2\tilde{\psi}^2 + \frac{\kappa^2}{4}(\nabla \times \mathbf{a}) \right], \quad (3.4)$$

con la derivada covariante reescalada como $\mathcal{D} = -i\nabla - \frac{\mathbf{a}}{2\xi^2}$. Es posible reescribir la teoría si hacemos una redefinición del tiempo en términos de una variable adimensional τ tal que

$$t = \frac{\hbar^2}{2mD|\alpha_{GL}|}\tau. \quad (3.5)$$

Será conveniente también redefinir la conductividad eléctrica y la constante de difusión como

$$\sigma_1 = \frac{4\pi\sigma}{c^2} \frac{2mD|\alpha_{GL}|}{\hbar^2}, \quad D_\eta = D_n(\rho_0/\eta_0^2). \quad (3.6)$$

Notar que con esta redefinición, la conductividad ahora tiene unidades de $\sigma_1 = [L]^{-2}$. La dinámica de los campos en términos de las nuevas variables se va a escribir como

$$\partial_\tau \tilde{\psi} = - \left(\frac{1}{|\alpha_{GL}|\rho_0} \right) \frac{\delta F}{\delta \tilde{\psi}^*} \quad \partial_\tau \mathbf{a} = - \left(\frac{1}{|\alpha_{GL}|\rho_0} \right) \frac{2}{\kappa^2 \sigma_1} \frac{\delta F}{\delta \mathbf{a}}. \quad (3.7)$$

Un cálculo directo a partir de estas expresiones permite encontrar ecuaciones que describen la dinámica para los parámetros de orden y el potencial vector (el procedimiento detallado se puede consultar en el Apéndice A). Para el parámetro de orden superconductor, se tiene

$$\partial_\tau \tilde{\psi} = \xi^2 \nabla^2 \tilde{\psi} + \tilde{\psi}(1 - |\tilde{\psi}|^2) - i\mathbf{a} \cdot \nabla \tilde{\psi} - \frac{i}{2} \tilde{\psi} \nabla \cdot \mathbf{a} - \frac{1}{4\xi^2} a^2 \tilde{\psi}, \quad (3.8)$$

mientras que para el potencial vector electromagnético se tiene

$$\partial_\tau \mathbf{a} = \frac{2}{\kappa^2 \sigma_1} \text{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla \tilde{\psi}) - \frac{1}{\kappa^2 \xi^2 \sigma_1} \mathbf{a} |\tilde{\psi}|^2 - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a}). \quad (3.9)$$

Este conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas no tiene una solución analítica. En general, se proponen 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 ninguna aproximación ni suposición previa.

3.2. Método Numérico

Un aspecto central de esta tesis es la aplicación de métodos espectrales en el ámbito de la superconductividad. En particular, utilizamos el programa *Geophysical High-Order Suite for Turbulence*, o GHOST por sus siglas en inglés. Este es un código pseudo-espectral paralelizado con MPI [19] y optimizado por P. D. Mininni et al [20]. Originalmente pensado para resolver PDE's en fluidos turbulentos y magnetohidrodinámica [57–59], recientemente se ha adaptado al estudio de turbulencia en condensados rotantes de Bose-Einstein [21].

En esta sección haremos una introducción a los métodos espectrales y las condiciones numéricas que permiten la estabilidad y convergencia de los códigos así como la implementación particular al problema de GL. Aquellos lectores familiarizados con métodos numéricos espectrales, pueden adelantar a la sección 3.2.3 para la aplicación del método en esta tesis.

3.2.1. Métodos Pseudoespectrales

Entre todos los métodos numéricos existentes los métodos finitos (ya sea de diferencias, elementos o volúmenes finitos) son los más utilizados debido a la simpleza con la que se expresan las derivadas, la sencillez para escribir condiciones de contorno y el fácil control del error a través de un método de Taylor. Si bien ha sido aplicado con éxito en el estudio de numerosos problemas en la temática de la superconductividad, desde el punto de vista práctico presentan algunas desventajas. Por un lado, la precisión del método está íntimamente relacionada a la resolución espacial utilizada, lo que aumenta los costos de cómputo, y pueden volverse inestables fácilmente. Además, presentan disipación y dispersión numérica, que puede ocasionar la obtención de resultados espúreos especialmente a orden bajo en las derivadas [60]. Por disipación numérica nos referimos al fenómeno de supresión exage-

rada de modos de alta frecuencia al realizar una integración numérica, que puede llevar a imprecisiones en los cálculos de las energías; otra forma de entender el fenómeno es pensar que se introduce una viscosidad artificial de origen numérico. La dispersión numérica, por otro lado, es una dispersión espúrea asociada a modos espaciales que se propagan más rápido de lo esperado y por lo tanto presentan oscilaciones o *wiggles* en los campos [?, 61].

En esta tesis se trabajó con un método pseudo-espectral, novedoso en la temática de la superconductividad. Los métodos espectrales se basan en una descomposición de Fourier de cada variable dinámica (en este caso, los parámetros de orden superconductor y nemático y el potencial vector electromagnético) en un conjunto grande (pero finito) de modos y se resuelve un sistema de ecuaciones que determina la evolución temporal de los coeficientes de Fourier. Esto asegura una convergencia exponencialmente rápida del método. Dos de las ventajas más importantes de estos métodos están en el sencillo cómputo de las derivadas (por ejemplo, el término $\nabla^2\psi$ se transforma en $-k^2\psi_{\mathbf{k}}$) y la utilización de la transformada rápida de Fourier para computar de manera sencilla los términos no lineales.

Los términos no lineales se convierten en convoluciones, que involucran como mínimo $\mathcal{O}(N)$ operaciones (donde N es la resolución espacial). Por ejemplo, un término que aparece muy seguido es:

$$\widehat{(|\tilde{\psi}|^2)}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{m}} \hat{\psi}_{\mathbf{m}}^* \hat{\psi}_{\mathbf{k}-\mathbf{m}}. \quad (3.10)$$

El costo computacional de computar la transformada de Fourier escala con la resolución. Para eso, se realizan dos Transformadas Rápidas de Fourier (que requieren $\mathcal{O}(N \log N)$ operaciones) y los productos de las funciones se realizan en el espacio real. Luego, se transforma el resultado de dicha operación nuevamente al espacio espectral.

Una consecuencia del desarrollo en serie de Fourier es lo que se conoce como *aliasing*. Debido a que los cálculos se realizan en grillas de puntos $x_m = \frac{2\pi m}{N}$ ($m = 0, 1, \dots, N - 1$)

los modos Fourier e^{ikx_m} son indistinguibles sobre la grilla de los modos $e^{i(k+mN)x_m}$ [62]. 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. Existe una regla debido a Orszag [62] que implica el recorte de $1/3$ de los modos al realizar antitransformadas, conocido como *Regla de los 2/3*. En resumidos términos, si el corte en los modos en el espacio Fourier es $K = \frac{N}{2}$ (debido a que para computar los campos necesitamos $N/2$ modos para positivos y $N/2$ para los negativos, es decir $-N/2 < K < N/2$) entonces para evitar modos espúreos alcanza con que $|k| < \frac{2}{3}K$. Dados dos modos l y p si $l+p > N/2$, el modo se puede mapear a uno dentro del dominio de interés y por lo tanto es espúreo. Supongamos que tenemos un K_{max} y entonces:

$$l + p - N < -K_{max} \quad l + p + N > K_{max} \quad (3.11)$$

es decir, que los modos espúreos caigan por fuera (por dentro) del rango que estoy filtrando. Además, los modos l y p cumplen que $l + p \leq 2K_{max}$. Entonces:

$$l + p - N \leq 2K_{max} - N < -K_{max} \implies K_{max} < \frac{N}{3} \quad (3.12)$$

Los modos que se sacan entonces son:

$$2 \times \left(\frac{N}{2} - \frac{N}{3} \right) = \frac{2}{3} \quad (3.13)$$

Notemos que la longitud mínima que se puede resolver fijada una resolución espacial es:

$$K_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} < \frac{N}{3} \implies \lambda_{min} > 3 \times \frac{2\pi}{N} = 3\Delta r \quad (3.14)$$

Frente a los métodos de diferencias finitas más utilizados tienen varias ventajas. Por un lado, los métodos de diferencias finitas presentan menor precisión en las soluciones que los métodos pseudo-espectrales, para el mismo número de puntos. Los métodos de diferencias

no proveen una idea general de la solución, debido a que pueden resolver algunas escalas muy bien y otras muy mal. En un método pseudo-espectral, todas las escalas se resuelven igual de bien, por lo que la convergencia de la solución es global. En problemas en donde es necesario una precisión alta, los métodos pseudo-espectrales pueden ser más eficientes, no en términos de tiempo de cómputo, sino en calidad de las soluciones. En general, los métodos pseudo-espectrales tienen que realizar menos operaciones para una precisión dada, en comparación con los métodos de diferencias finitas.

Las simulaciones se realizan en una caja de tamaño $2\pi L_x \times 2\pi L_y$ en el plano xy , donde las longitudes L_x y L_y se pueden elegir de forma arbitraria. Para las simulaciones presentadas en este capítulo se utilizó $L_x = L_y = 1$ (lo que a su vez implica que la caja mide 2π) y una resolución espacial de $N = 512$. Así queda definida una grilla 2D con un espaciado entre puntos de $\Delta r = \frac{2\pi}{512} = 1,2 \times 10^{-2}$. Fijamos la longitud de coherencia en $\xi = 0,04L$ que es similar a $3\Delta r \cong 0,036$, según el límite impuesto por el método.

3.2.2. Condición Courant-Fredrich-Lowy

Debido a que el sistema es disipativo, los términos difusivos (proporcionales a ∇^2) son los responsables de determinar las escalas temporales para las simulaciones numéricas. En cálculo numérico, la condición Courant-Friedrich-Lowy (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 Δr , el intervalo temporal para la discretización del tiempo $\Delta\tau$ cumple una cierta relación que depende de los parámetros de las ecuaciones diferenciales. A partir del primer término de la derecha de la Ec. (3.8) y del último término del lado derecho de la Ec. (3.9) se pueden construir dos números de

Courant

$$C_{\tilde{\psi}} = \xi^2 \frac{\Delta\tau}{\Delta r^2}, \quad C_a = \frac{1}{\sigma_1} \frac{\Delta\tau}{\Delta r^2}. \quad (3.15)$$

La condición que asegura la convergencia del método se obtiene cuando $C < 1$. Para las simulaciones realizadas en este capítulo, se utilizó una longitud de coherencia $\xi = 0,04$ y una conductividad de $\sigma_1 = 530$ con resolución espacial $N = 512$, lo que implica que el intervalo temporal debe ser tal que $\Delta\tau < 2,3 \times 10^{-5}$ para asegurar la convergencia.

3.2.3. Condiciones Iniciales

Como mencionamos anteriormente, las simulaciones realizadas en esta tesis se realizaron utilizando el código GHOST. En particular, el código trae una implementación para resolver la ecuación de GL real advectiva, que se utiliza en dinámica de fluidos para la preparación de condiciones iniciales que contengan vórtices para inicializar otras simulaciones [63]. Uno de los aspectos más importantes de esta tesis es la adaptación de este código para incluir la dinámica del potencial vector (equiparable al campo de velocidades en fluidos, ver el Apéndice B) y el parámetro de orden nemático [17].

Para inicializar las simulaciones, necesitamos darle una condición inicial tanto al parámetro de orden superconductor como al potencial vector electromagnético. Siguiendo la referencia [63], tomamos para el parámetro de orden superconductor la función

$$\tilde{\psi}(x, y, t = 0) = \tilde{\psi}_v \frac{(\lambda + i\mu)}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}}{\sqrt{2}\xi}\right), \quad (3.16)$$

que tiene un gráfico como el que se observa en la Fig. 3.1, panel izquierdo. Esta función tiene un polo de orden 1 en las posiciones $(\pi/2, \pi/2)$, $(\pi/2, 3\pi/2)$, $(3\pi/2, \pi/2)$ y $(3\pi/2, 3\pi/2)$ en el plano xy , asociadas a las posiciones de los vórtices. Nuestro sistema de interés será el subsector $[0, \pi] \times [0, \pi]$; los otros sectores se pueden pensar como un truco matemático que

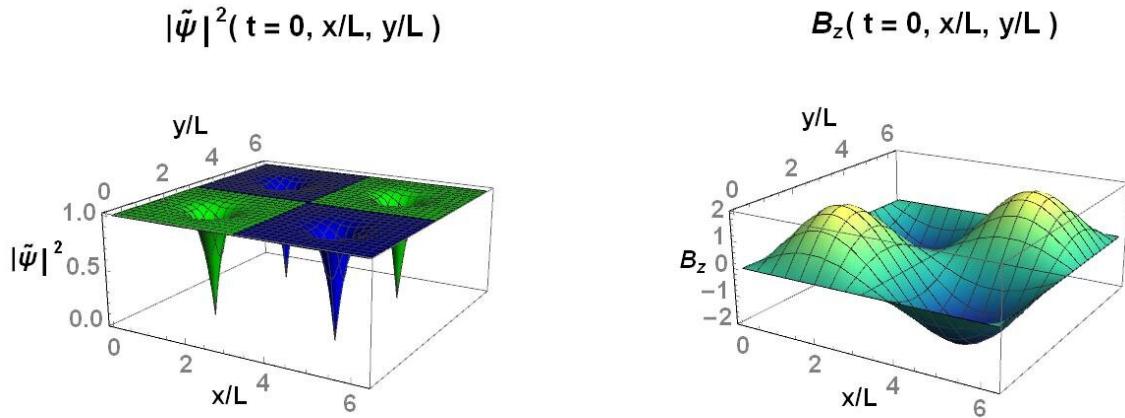


Figura 3.1: Gráficos 3D de las condiciones iniciales para el parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2(x, y, t = 0)$ (izq.) y el campo magnético $B_z(x, y, t = 0)$ (der.) en la caja de simulación de tamaño $2\pi L_x \times 2\pi L_y$. El signo de la vorticidad coincide con el campo magnético cuadrante a cuadrante, como se identifica de los colores.

permite imponer las condiciones de contorno periódicas en el dominio extendido. Siempre que ξ y λ_L (y cuando haya nematicidad, l_η , la longitud de coherencia asociada al parámetro de orden nemático) sean pequeños y las posiciones de los vórtices no estén muy cerca de los bordes de la caja éstos no sentirán la presencia de los demás vórtices. Más vórtices se pueden obtener tomando potencias de la Ec. 3.16 o aplicando un operador de traslación a la misma.

Para el potencial vector, tomamos una condición inicial conocida en el ámbito de la dinámica de fluidos como configuración de Taylor-Green [64]

$$a_x(x, y, t = 0) = a_0 \sin(x) \cos(y), \quad (3.17)$$

$$a_y(x, y, t = 0) = a_0 \cos(x) \sin(y), \quad (3.18)$$

que establece que el campo magnético inicial es $B_z(x, y, t = 0) = 2a_0 \sin x \sin y$ donde a_0 es una constante de normalización asociada al flujo magnético, como se verá más adelante. Si bien esta elección para el campo magnético no responde a ninguna situación física particular

en superconductividad, permite rápidamente empalmar el flujo magnético en la caja de simulación a la cantidad de vórtices que haya en el dominio. El flujo de campo magnético (o la circulación del potencial vector) en la caja completa es nulo, debido a las condiciones periódicas de contorno. Sin embargo, en el sector $[0, \pi] \times [0, \pi]$ el flujo magnético es

$$\int B_Z ds = \int_0^\pi \int_0^\pi 2a_0 \sin(x) \sin(y) dx dy = 8a_0. \quad (3.19)$$

Es fácil chequear que este valor es igual en módulo en los distintos sectores. El signo del flujo en cada subsector se correlacionará con la vorticidad de cada vórtice, como se puede ver en la Fig. 3.1, panel derecho.

Para terminar, necesitamos ajustar la cantidad de flujo inicial a la cantidad de vórtices que haya en la caja, por lo cual será necesario dar un valor de a_0 . Para eso, necesitamos que esta normalización empalme con el flujo total en la muestra $\Phi = n_v \phi_0$, donde n_v es el número de vórtices y $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ el cuánto de flujo. Usando la definición de la longitud de London $\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0}$ y de la longitud de coherencia superconductora $\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|}$, se puede escribir al cuánto de flujo como:

$$\Phi_0 = 4\pi\kappa\xi^2 \sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} \quad (3.20)$$

Entonces, se tiene que el parámetro a_0 debe cumplir que

$$a_0 = \frac{n_v \kappa \xi^2 \sqrt{\rho_0 |\alpha_{GL}|}}{2\sqrt{2}} \quad (3.21)$$

3.3. Validación del Método: vórtices en ausencia de nematicidad

En esta sección realizaremos un chequeo del método numérico contra resultados conocidos en la temática. La reproducción de estos resultados nos permitirá ajustar el método numérico y depurar posibles errores. Recordamos que en la dinámica de vórtices, el parámetro relevante es la proporción que existe entre las longitudes de coherencia superconductora

y de penetración de London, el parámetro de GL $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}$. En esta tesis no nos estamos enfocando en los procesos transitorios sino en la existencia de estados de equilibrio, por lo que es despreciable la influencia de parámetros como la constante de difusión o la conductividad eléctrica del estado normal (más allá de la determinación del número de Courant). En particular, para la constante de difusión tomamos un valor tal que $\frac{\hbar}{2mD} = 1$.

Comenzamos con el caso de un único vórtice en el plano xy y nos enfocamos en tres valores del parámetro de GL: $\kappa_- = 0,49$, $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y $\kappa_+ = 0,92$. Estos valores específicos son elegidos para comparar con resultados conocidos en cálculos variacionales de energía [65], que se reportarán más adelante.

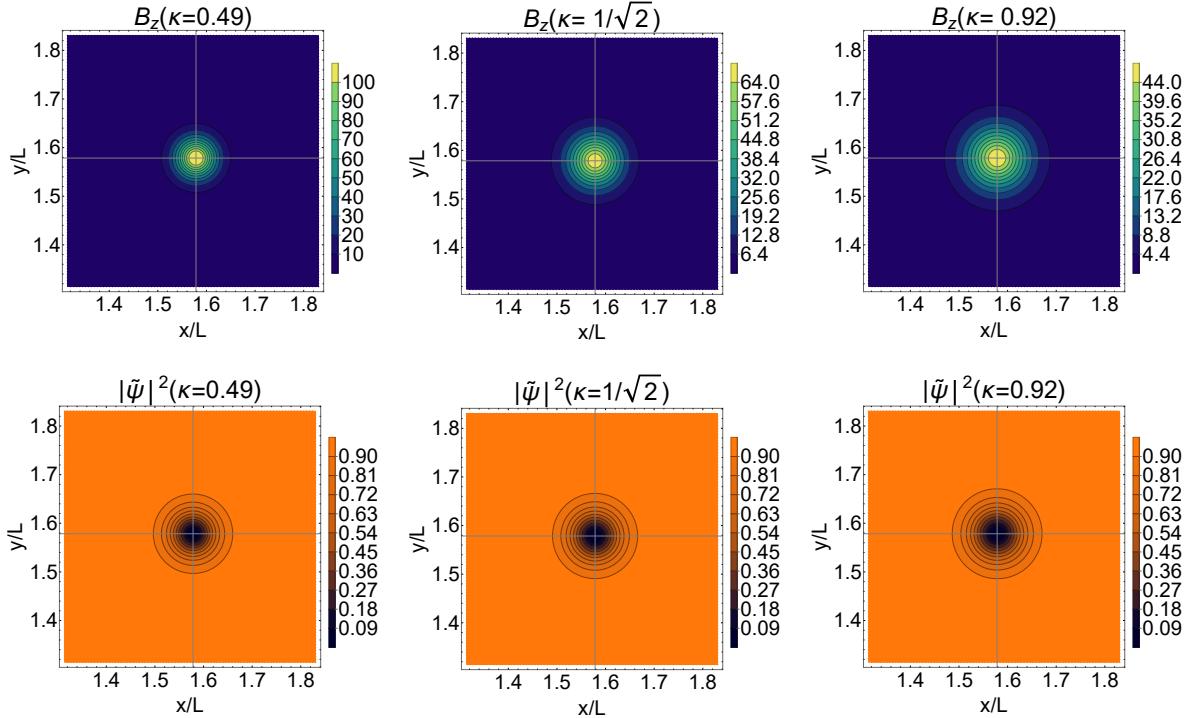


Figura 3.2: Gráficos de densidad del campo magnético B_z (sup.) y del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ (inf.). Las líneas grises sirven como guía visual y se intersecan en $(x/L, y/L) = (\pi/2, \pi/2)$. Siendo fija la longitud de coherencia $\xi/L = 0,04$, se puede apreciar que para distintos κ se afecta el tamaño de la dispersión de campo magnético alrededor del vórtice; esta es menor que ξ para $\kappa_- < \kappa_c$ y mayor para $\kappa_+ > \kappa_c$.

En el caso de un único vórtice, es sabido que existen soluciones con simetría cilíndrica

para cualquier valor de κ . En la Fig. 3.2 se pueden ver densidades en el plano del campo magnético (sup.) y del parámetro de orden superconductor (inf.) para los valores de κ mencionados anteriormente. Estas soluciones se obtienen tras una rápida relajación del parámetro de orden. La longitud de coherencia superconductora se fijó en $\xi = 0,04$, por lo que al variar el valor de κ deberíamos observar una variación en la longitud de London. Este efecto se puede apreciar observando el panel superior de la Fig. 3.2, creciente en κ de izquierda a derecha. En el entorno del centro del vórtice se puede ver como se ensanchan las isolíneas de campo magnético.

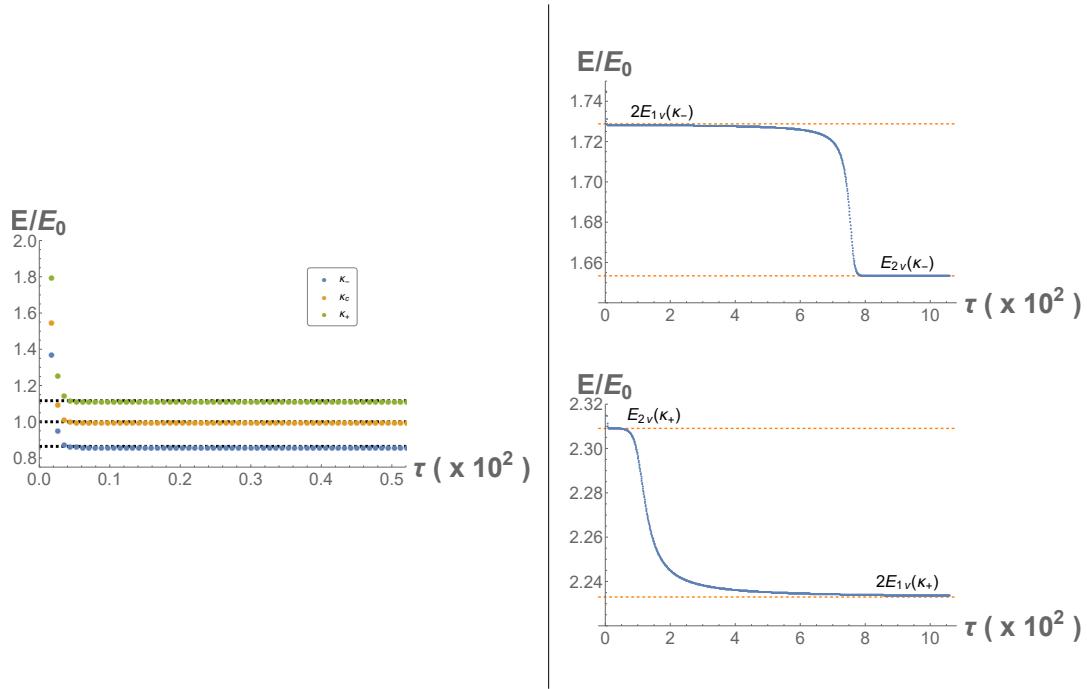


Figura 3.3: (Izq.) Energía adimensional normalizada E/E_0 como función del tiempo adimensional τ para una configuración de un único vórtice para distintos valores de κ . Tras una rápida relajación, la energía converge a valores calculados en [65] (líneas punteadas). (Der.) Energía en función de τ para una configuración de dos vórtices con $\kappa = 0,49$ (sup.) y $\kappa = 0,92$ (inf.).

El tiempo necesario para obtener una configuración estacionaria en este caso se puede determinar a partir de la evolución de la energía por unidad de longitud en función del

tiempo. En la Fig. 3.3 panel izquierdo se puede ver la evolución de la energía en función del tiempo para los 3 valores de κ propuestos anteriormente. Es sabido [66] que en el valor crítico del parámetro de GL $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ una configuración de n_v vórtices tiene una energía por unidad de longitud $E = n_v E_0$, donde $E_0 = \phi_0/2$ es la energía de un vórtice. Utilizamos E_0 como medida de normalización de la energía. En todos los casos, nuestros cálculos de energía coinciden con cálculos realizados a partir de principios variacionales [65] y obviamente dependen del valor de κ . A partir de estos cálculos podemos ganar fiabilidad en el programa, ya que reproduce resultados numéricos exactos y conocidos.

Consideremos ahora el caso en que colocamos dos vórtices en el plano xy ($n_v = 2$). Es sabido que existen soluciones estacionarias tipo vórtice únicamente para $\kappa \leq \kappa_c$, mientras que para $\kappa = \kappa_c$ existen configuraciones de vórtices estáticas que no interactúan, a distancias arbitrarias entre ellos. Para $\kappa < \kappa_c$ se espera tener una solución tipo *vórtice gigante* (que corresponden a la superposición de dos vórtices de $n_v = 1$), donde domina la interacción atractiva entre vórtices, mientras que para $\kappa > \kappa_c$ esperamos que no exista una configuración de equilibrio debido a la naturaleza repulsiva de la interacción vórtice-vórtice.

Como mencionamos anteriormente, tomaremos la condición inicial en este caso como un producto de funciones como las presentadas en la Ec. 3.16, particularmente su cuadrado. Esto produce dos nodos (vórtices) superpuestos en cada subsector. En el panel derecho de la Fig. 3.3 se observa la evolución temporal de la energía para este estado tomando $\kappa_+ = 0,92$ y $\kappa_- = 0,49$. Para κ_- tomamos una distancia inicial entre vórtices de $d = 3,5\xi$ y dejamos que evolucione el sistema. La dinámica muestra que los vórtices se atraen entre ellos hasta colapsar en un único vórtice de tamaño más grande. Notar que la energía inicial de la configuración es el doble de la energía correspondiente a un vórtice con ese valor de κ_- (tomado de la Ref. [65]) y evoluciona al valor reportado para un vórtice gigante de

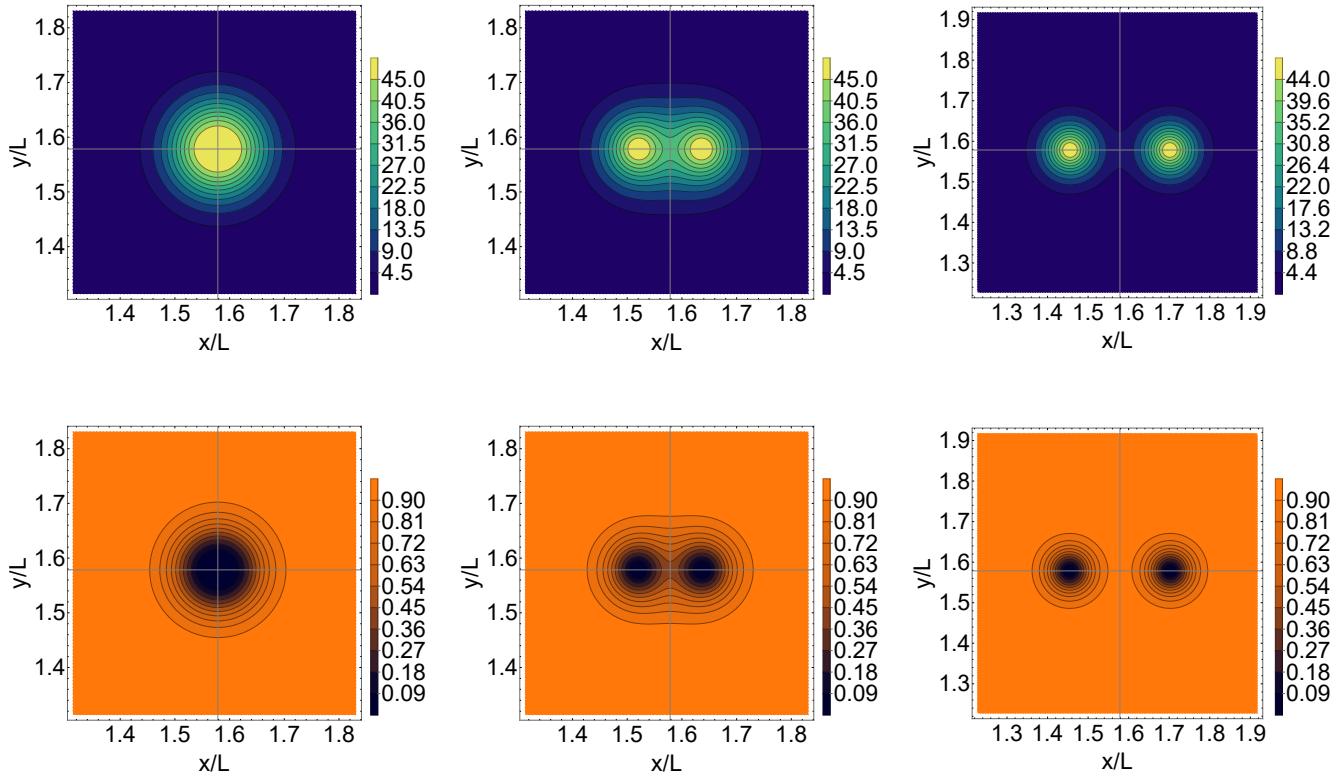


Figura 3.4: Gráficos del campo magnético B_z (sup.) y del parámetro de orden $|\tilde{\psi}|^2$ (inf.) durante la dinámica TDGL. Los paneles corresponden a tres tiempos distintos (aumentando de izquierda a derecha) para $\kappa = 0.92$. La longitud de coherencia superconductora se fijó en $\xi = 0.04$. Se comprueba que los vórtices arrancan superpuestos en una configuración inestable, evolucionando a una configuración de dos vórtices separados.

vorticidad $n_v = 2$. En el caso de κ_+ , tomamos una distancia inicial de $d = 0$ y dejamos que evolucione el sistema. La energía del mismo arranca en el valor correspondiente a un vórtice gigante de $n_v = 2$ con κ_+ y evoluciona a dos veces la energía de un solo vórtice con ese valor de κ . En la Fig. 3.4 se pueden observar las evoluciones del parámetro de orden superconductor y el campo magnético para κ_+ . Los vórtices superpuestos son una solución estable para κ_- pero es inestable para κ_+ .

Para terminar esta sección de constatación con resultados conocidos, realizamos un cálculo de la energía en función de la distancia entre vórtices, comparando los valores con los

obtenidos por otros métodos en [65]. En la Fig. 3.5 se observa la energía normalizada al valor de la energía de un vórtice $E(x/\lambda_L)/E_0$ para $\kappa_+ = 0,92$. El método dinámico se muestra en línea punteada azul mientras que los puntos rojos son tomados de la referencia [65]. Para construir este resultado, calculamos la energía en función del tiempo $E(t)$ y la distancia entre vórtices en función del tiempo $d(t)$. La composición de estas funciones nos permite obtener $E = E(x)$, de donde fácilmente se puede obtener la fuerza entre vórtices de manera numérica a través de la expresión $F = -\frac{dE(x)}{dx}$. Este método será reutilizado en el Capítulo 4 para el cálculo de la fuerza de interacción entre un vórtice y una pared de dominio nemática.

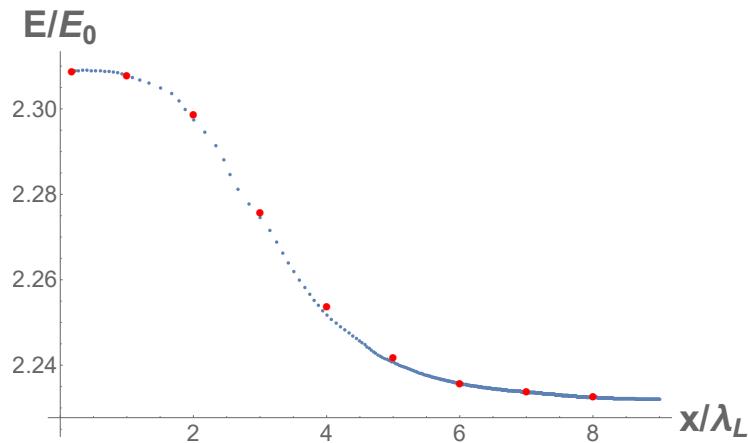


Figura 3.5: Energía normalizada E/E_0 en función de la distancia adimensional x/λ_L calculada con una dinámica TDGL completa. Los puntos rojos son valores obtenidos en [65] a partir de métodos variacionales.

3.4. Vórtices en la fase nemática

Pasamos ahora al estudio de vórtices en fase superconductora con los distintos acoplos con la nematicidad. Comenzaremos por plantear el modelo teórico para incluir la nematicidad en TDGL, luego estudiaremos la influencia de cada uno de los acoplos en la estructura de un único vórtice con un fondo de nematicidad constante y terminaremos con una caracterización de la interacción vórtice-vórtice en función de cada acople por separado y en el

caso en que ambos estén presentes en la energía libre.

3.4.1. La energía libre para el parámetro nemático η

En esta sección estudiaremos como se modifican los resultados anteriores al agregar la nematicidad en interacción con la superconductividad. Como se mencionó en la sección 2.3 de esta tesis, en muchas familias de superconductores no convencionales la nematicidad está asociada a una transición de fase estructural de tetragonal a ortorrómbica. Por lo tanto, el parámetro de orden para la nematicidad electrónica η tendrá carácter real y tal que transforme como $\eta \rightarrow -\eta$ ante una rotación en $\pi/2$ de la estructura cristalográfica.

La energía libre para el parámetro de orden nemático será

$$F_N = \int_V \gamma_2 (\nabla \eta)^2 + \gamma_3 \eta^2 + \frac{\gamma_4}{2} \eta^4 \quad (3.22)$$

Notemos que esta es una típica energía libre para un parámetro de orden que exhibe una ruptura espontánea de simetría. En el caso de la nematicidad, los estados de vacío corresponderán a elegir una u otra orientación de los ejes cristalinos.

El acople con la superconductividad se hará a través de dos términos distintos. Por un lado, un acople biquadrático que toma la forma

$$F_{bi} = \lambda_2 \int_V \eta^2 |\psi|^2 dV \quad (3.23)$$

que no depende necesariamente del carácter nemático de η y es un tipo de acople muy usual en distintos tipos de teorías con múltiples parámetros de orden [67]. Por otro lado, un acople trilineal (a través de la derivada covariante) entre la nematicidad y la superconductividad se escribe como:

$$F_{tri} = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda_1 \int_V \eta e_{ij} \mathcal{D}_i \psi (\mathcal{D}_j \psi)^* \quad (3.24)$$

donde $e_{ij} = 2(n_i n_j - \frac{1}{2}\delta_{ij})$ y $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ es el vector director que tiene la información sobre la orientación de la nematicidad. Las componentes del tensor e_{ij} en términos de α son:

$$e_{xx} = 2 \left(\cos^2 \alpha - \frac{1}{2} \right) \quad e_{xy} = 2 \cos \alpha \sin \alpha = e_{yx} \quad e_{yy} = 2 \left(\sin^2 \alpha - \frac{1}{2} \right) \quad (3.25)$$

En este capítulo se utilizará $\alpha = \frac{\pi}{2}$ para el estudio de la interacción vórtice-vórtice. La energía libre total en el caso de la presencia de nematicidad será una suma de ambos términos:

$$F = F_S + F_{bi} + F_{tri} \quad (3.26)$$

En este formalismo, la dinámica del parámetro de orden nemático se prescribe siguiendo la misma lógica que para el parámetro SC y el potencial vector:

$$\frac{\hbar^2}{2mD_n} \partial_t \eta = -\frac{\delta F}{\delta \eta} \quad (3.27)$$

donde D_n es una constante de difusión específicamente para el parámetro nemático.

Para que la nematicidad presente ruptura espontánea de simetría, como estamos proponeando, es necesario que $\gamma_3 < 0$. La longitud de coherencia nemática quedará definida en términos de los parámetros del modelo como

$$l_\eta^2 = \frac{\gamma_2}{|\gamma_3|}. \quad (3.28)$$

Al igual que con el parámetro de orden superconductor, adimensionalizamos el parámetro nemático según

$$\eta = \eta_0 \tilde{\eta}, \quad (3.29)$$

con $\eta_0^2 = \frac{|\gamma_3|}{\gamma_4}$. Además, redefinimos los parámetros de la teoría nemática como

$$\hat{\lambda}_1 = \frac{\lambda_1 \eta_0}{\hbar} \quad ; \quad \hat{\lambda}_2 = \frac{\lambda_2 \eta_0^2}{|\alpha_{GL}|}, \quad \Gamma_2 = \frac{\gamma_2}{|\alpha_{GL}|(\rho_0/\eta_0^2)}, \quad \Gamma_4 = \frac{\gamma_4 \eta_0^2}{(|\alpha_{GL}| \rho_0 / \eta_0^2)}. \quad (3.30)$$

Bajo estas redefiniciones, los parámetros $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$ y Γ_4 resultan adimensionales mientras que $[\Gamma_2] = [L]^2$. Notar también que la longitud de coherencia nemática en estos nuevos parámetros es $l_\eta^2 = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_4}$. De esta manera, la energía libre completa para el caso con nematicidad se escribe como

$$F = |\alpha_{GL}|\rho_0 \int dV \left[\frac{1}{2}(|\tilde{\psi}|^2 - 1)^2 + \xi^2 |\nabla \tilde{\psi}|^2 - \mathbf{a} \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla \tilde{\psi}) + \frac{1}{4\xi^2} \mathbf{a}^2 \tilde{\psi}^2 + \frac{\kappa^2}{4} (\nabla \times \mathbf{a})^2 + \Gamma_2 (\nabla \tilde{\eta})^2 + \frac{\Gamma_4}{2} (\tilde{\eta}^2 - 1)^2 + \xi^2 \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta} (|\mathcal{D}_x \tilde{\psi}|^2 - |\mathcal{D}_y \tilde{\psi}|^2) + \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}^2 \tilde{\psi}^2 \right]. \quad (3.31)$$

La dinámica del nuevo parámetro nemático será

$$\frac{D}{D_\eta} \partial_\tau \tilde{\eta} = - \left(\frac{1}{|\alpha_{GL}|\rho_0} \right) \frac{\delta F}{\delta \tilde{\eta}}, \quad (3.32)$$

que permite obtener una ecuación que prescribe la dinámica según

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_\eta} \partial_\tau \tilde{\eta} &= 2\Gamma_2 \nabla^2 \tilde{\eta} + 2\Gamma_4 \tilde{\eta} (1 - \tilde{\eta}^2) - 2\hat{\lambda}_2 \tilde{\psi}^2 \tilde{\eta} - \xi^2 \hat{\lambda}_1 (|\partial_x \tilde{\psi}|^2 - |\partial_y \tilde{\psi}|^2) \\ &\quad - \frac{\hat{\lambda}_1}{4\xi^2} \tilde{\psi}^2 (a_x^2 - a_y^2) + \hat{\lambda}_1 (a_x \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_x \tilde{\psi}) - a_y \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_y \tilde{\psi})). \end{aligned} \quad (3.33)$$

La presencia del parámetro de orden nemático modificará también las ecuaciones de la sección anterior. Para el parámetro de orden superconductor, se tiene

$$\begin{aligned} \partial_\tau \tilde{\psi} &= \xi^2 \nabla^2 \tilde{\psi} + \tilde{\psi} (1 - |\tilde{\psi}|^2) - i\mathbf{a} \cdot \nabla \tilde{\psi} - \frac{i}{2} \tilde{\psi} \nabla \cdot \mathbf{a} - \frac{1}{4\xi^2} a^2 \tilde{\psi} - \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}^2 \tilde{\psi} \\ &\quad - \frac{i\hat{\lambda}_1}{2} \tilde{\eta} (a_x \partial_x \tilde{\psi} - a_y \partial_y \tilde{\psi}) - \frac{\hat{\lambda}_1}{4\xi^2} \tilde{\eta} \tilde{\psi} (a_x^2 - a_y^2) + \xi^2 \hat{\lambda}_1 (\partial_x (\tilde{\eta} \partial_x \tilde{\psi}) - \partial_y (\tilde{\eta} \partial_y \tilde{\psi})) \\ &\quad - \frac{i\hat{\lambda}_1}{2} (\partial_x (a_x \tilde{\eta} \tilde{\psi}) - \partial_y (a_y \tilde{\eta} \tilde{\psi})) \end{aligned} \quad (3.34)$$

mientras que para las componentes del potencial vector encontramos

$$\partial_\tau a_x = \frac{2(1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \sigma_1} \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_x \tilde{\psi}) - \frac{(1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \xi^2 \sigma_1} a_x |\tilde{\psi}|^2 - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a})_x, \quad (3.35)$$

$$\partial_\tau a_y = \frac{2(1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \sigma_1} \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_y \tilde{\psi}) - \frac{(1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \xi^2 \sigma_1} a_y |\tilde{\psi}|^2 - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a})_y. \quad (3.36)$$

La existencia de las soluciones quedará supeditada a relaciones que deben cumplir los parámetros para la consistencia de la teoría. Mirando la parte de energía potencial en la energía libre

$$V(|\tilde{\psi}|^2, \tilde{\eta}^2) = \rho_0 |\alpha_{GL}| \int dV \left[\frac{1}{2} (|\tilde{\psi}|^2 - 1)^2 + \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}^2 \tilde{\psi}^2 + \frac{\Gamma_4}{2} (\tilde{\eta}^2 - 1) \right]. \quad (3.37)$$

podemos establecer cotas para los parámetros. Los términos cuárticos en los parámetros de orden superconductor y nemático tienen la estructura de una forma cuadrática en $|\tilde{\psi}|^2$ y $\tilde{\eta}^2$, representada por la matriz

$$\Gamma = \frac{|\alpha_{GL}| \rho_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & \hat{\lambda}_2 \\ \hat{\lambda}_2 & \Gamma_4 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Imponiendo que esta forma sea definida positiva, se obtiene que

$$\hat{\lambda}_2 > -\sqrt{\Gamma_4}. \quad (3.39)$$

Como mencionamos, la teoría supone que tanto la simetría de $\tilde{\psi}$ como de $\tilde{\eta}$ están rotas desde el inicio. Consideramos $\tilde{\psi}_v$ y $\tilde{\eta}_v$ como los valores de equilibrio de los parámetros de orden superconductor y nemático respectivamente y corresponden a mínimos de la energía potencial Ec. (3.37). Para que cumplan esta restricción, debe ser que $\nabla V(\tilde{\psi}_v, \tilde{\eta}_v) = 0$. Esta imposición deriva en un sistema de ecuaciones que permite encontrar dichos valores,

$$|\tilde{\psi}_v|^2 + \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}_v^2 = 1, \quad \frac{\hat{\lambda}_2}{\Gamma_4} |\tilde{\psi}_v|^2 + \tilde{\eta}_v^2 = 1, \quad (3.40)$$

que tienen como solución

$$|\tilde{\psi}_v|^2 = \frac{1 - \hat{\lambda}_2}{1 - (\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}, \quad \tilde{\eta}_v^2 = \frac{1 - (\hat{\lambda}_2/\Gamma_4)}{1 - (\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}. \quad (3.41)$$

Estos mínimos existirán en la medida en que las constantes del modelo satisfagan ciertas relaciones entre ellas. Para el acople biquadrático, alcanza con pedir que las soluciones

existen, lo que deriva en que

$$\hat{\lambda}_2 < 1, \quad \hat{\lambda}_2 < \Gamma_4, \quad |\hat{\lambda}_2| < \sqrt{\Gamma_4}. \quad (3.42)$$

Por lo tanto, los valores permitidos para el acople biquadrático son aquellos que cumplan

$$-\sqrt{\Gamma_4} < \hat{\lambda}_2 < \min(1, \Gamma_4). \quad (3.43)$$

Finalmente, para terminar esta sección notemos que a partir de la Ec. (3.34) se debe cumplir que para $\tilde{\eta} = \tilde{\eta}_v$ los términos en derivadas segundas de $\tilde{\psi}$ deben ser positivos. Imponer esta condición implica entonces un rango de valores permitidos para el acople $\hat{\lambda}_1$. Para un valor constante de nematicidad, estos términos son

$$\xi^2(1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_v) \partial_x^2 \tilde{\psi} + \xi^2(1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_v) \partial_y^2 \tilde{\psi}, \quad (3.44)$$

lo que implica que

$$|\hat{\lambda}_1| < \frac{1}{\tilde{\eta}_v} < \sqrt{\frac{1 - (\hat{\lambda}_2^2/\Gamma_4)}{1 - (\hat{\lambda}_2/\Gamma_4)}}. \quad (3.45)$$

3.4.2. Un vórtice con orden nemático

Comenzamos el estudio de los vórtices en la fase nemática explorando el efecto del acople biquadrático, proporcional a $\hat{\lambda}_2$ en la energía libre. La idea es entender el rol que tiene cada uno de los acoplos en la interacción vórtice-vórtice.

En una aproximación lineal, hacemos una perturbación alrededor del valor de vacío de cada uno de los parámetros de orden

$$\tilde{\psi} = \tilde{\psi}_v + h_1, \quad \tilde{\eta} = \tilde{\eta}_v + h_2, \quad (3.46)$$

donde h_1 y h_2 son pequeñas perturbaciones. Sustituyendo en las ecuaciones (3.33) y (3.34) se tiene

$$\nabla^2 \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2\tilde{\psi}_v^2}{\xi^2} & \frac{2\hat{\lambda}_2 \tilde{\psi}_v \tilde{\eta}_v}{\xi^2} \\ \frac{2\hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}_v \tilde{\psi}_v}{\Gamma_2} & \frac{2\tilde{\eta}_v^2}{l_\eta^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Los autovalores de esta matriz (α_1, α_2) estarán relacionados con las soluciones de las perturbaciones, que serán una combinación lineal de funciones de Bessel (en el modelo de Higgs, el inverso de estos autovalores está relacionado con las masas efectivas del modelo)

$$h_{1,2} = C_1 K_0(\sqrt{\alpha_1}(r - r_0)) + C_2 K_0(\sqrt{\alpha_2}(r - r_0)). \quad (3.48)$$

Para valores pequeños del acople $\hat{\lambda}_2$ se puede realizar una expansión perturbativa en potencias del parámetro. Encontramos para los autovalores expresiones

$$\alpha_1 = \frac{2}{l^2} \left(1 - \frac{\hat{\lambda}_2}{\Gamma_4} - \frac{l^2 \hat{\lambda}_2^2}{\Gamma_4(l_\eta^2 - \xi^2)} \right) + O(\hat{\lambda}_2^3), \quad (3.49)$$

$$\alpha_2 = \frac{2}{\xi^2} \left(1 - \hat{\lambda}_2 + \frac{\xi^2 \hat{\lambda}_2^2}{\Gamma_4(l_\eta^2 - \xi^2)} \right) + O(\hat{\lambda}_2^3), \quad (3.50)$$

mientras que si $l_\eta = \xi$, se tiene

$$\alpha_1 = \frac{2(\Gamma_4 - \hat{\lambda}_2^2)}{\Gamma_4 \xi^2}, \quad \alpha_2 = \frac{2(\hat{\lambda}_2 - 1)(\hat{\lambda}_2 - \Gamma_4)}{\Gamma_4 \xi^2}. \quad (3.51)$$

Notemos que entonces si $\hat{\lambda}_2 > 0$ ($\hat{\lambda}_2 < 0$) el tamaño del centro del vórtice aumenta (decrece), según se puede apreciar en el tercer panel de la Fig. 3.6. El modelo lineal deja de ser válido para valores grandes de κ y se necesitan términos de orden superior (manteniendo términos relacionados con el campo de *gauge* \mathbf{a}) para predecir correctamente el comportamiento asintótico [68].

Para realizar esta simulación utilizamos el modelo TDGL con las mismas condiciones iniciales que en la sección anterior para el parámetro de orden superconductor y el potencial vector electromagnético. Para el parámetro de orden nemático tomamos un fondo uniforme $\tilde{\eta}(t = 0, x, y) = \tilde{\eta}_v$. En la Fig. 3.6 se pueden ver gráficos de la densidad de campo magnético B_z , la densidad de portadores superconductores $|\tilde{\psi}|^2$ y el parámetro de orden nemático $\tilde{\eta}$ para $\kappa_+ = 0,92$ para dos valores del acople biquadrático. Para $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ (panel superior en

Fig. 3.6) notamos que la longitud de coherencia efectiva del vórtice se ensancha respecto de su valor original, mientras que disminuye para $\hat{\lambda}_2 = -0,5$

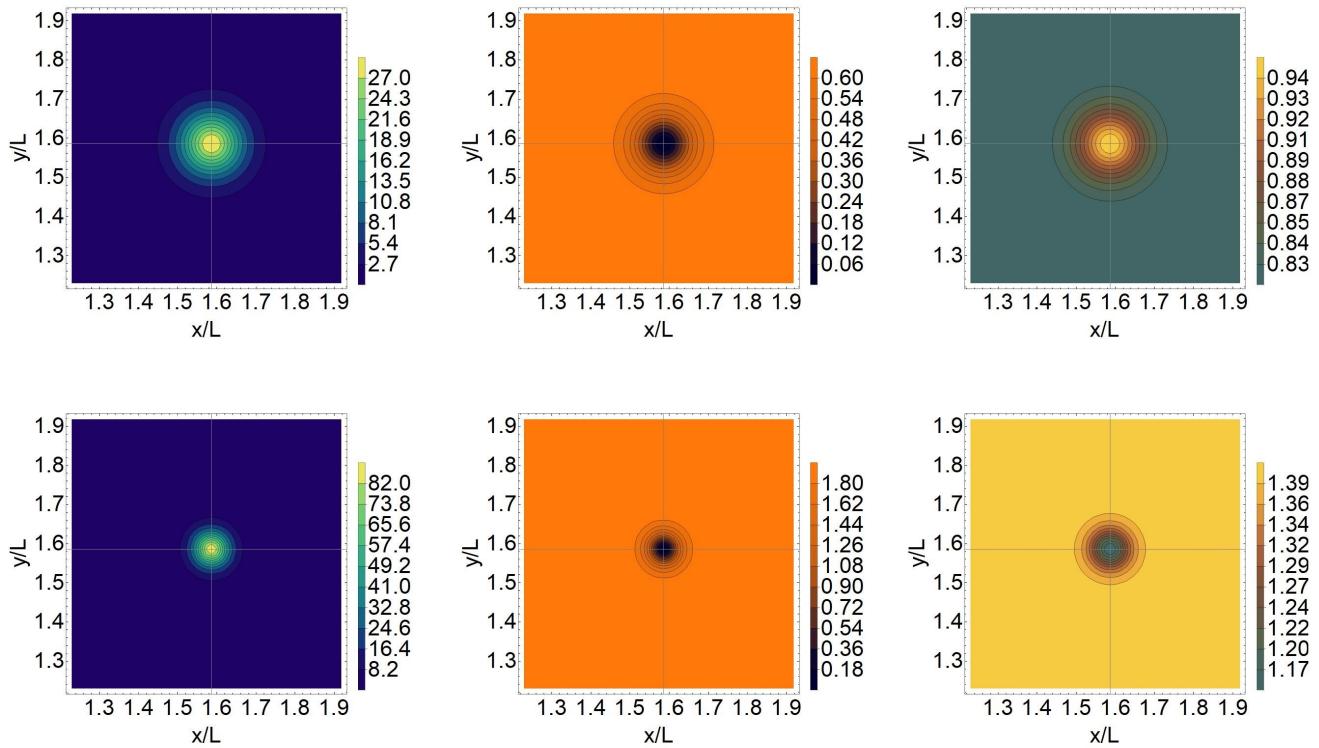


Figura 3.6: Gráficos del campo magnético B_z (izq.), del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ (centro) y del parámetro de orden nemático $\tilde{\eta}$ (der.) para $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ (sup.), $\hat{\lambda}_2 = -0,5$ (inf.) y $\hat{\lambda}_1 = 0$. El parámetro de GL es $\kappa = 0,92$ en ambos casos. La simetría cilíndrica se mantiene y el parámetro nemático tiene una variación en el centro del vórtice: aumenta (disminuye) para $\hat{\lambda}_2 > 0$ (< 0)

En cuanto al parámetro nemático, notamos que el mismo aumenta su valor en el centro del vórtice para $\hat{\lambda}_2 > 0$ (es decir, compitiendo con la superconductividad) mientras que disminuye para $\hat{\lambda}_2 < 0$ (cooperando con la superconductividad). Esta fenomenología será fundamental en el Capítulo 3, ya que determinará el carácter de la interacción entre vórtices y paredes de dominio nemáticas (repulsiva en el caso competitivo y atractiva en el caso cooperativo). Además, dado que el acople que rompe la simetría es $\hat{\lambda}_1 = 0$ las configuraciones de equilibrio del campo magnético y los parámetros de orden tienen simetría cilíndrica.

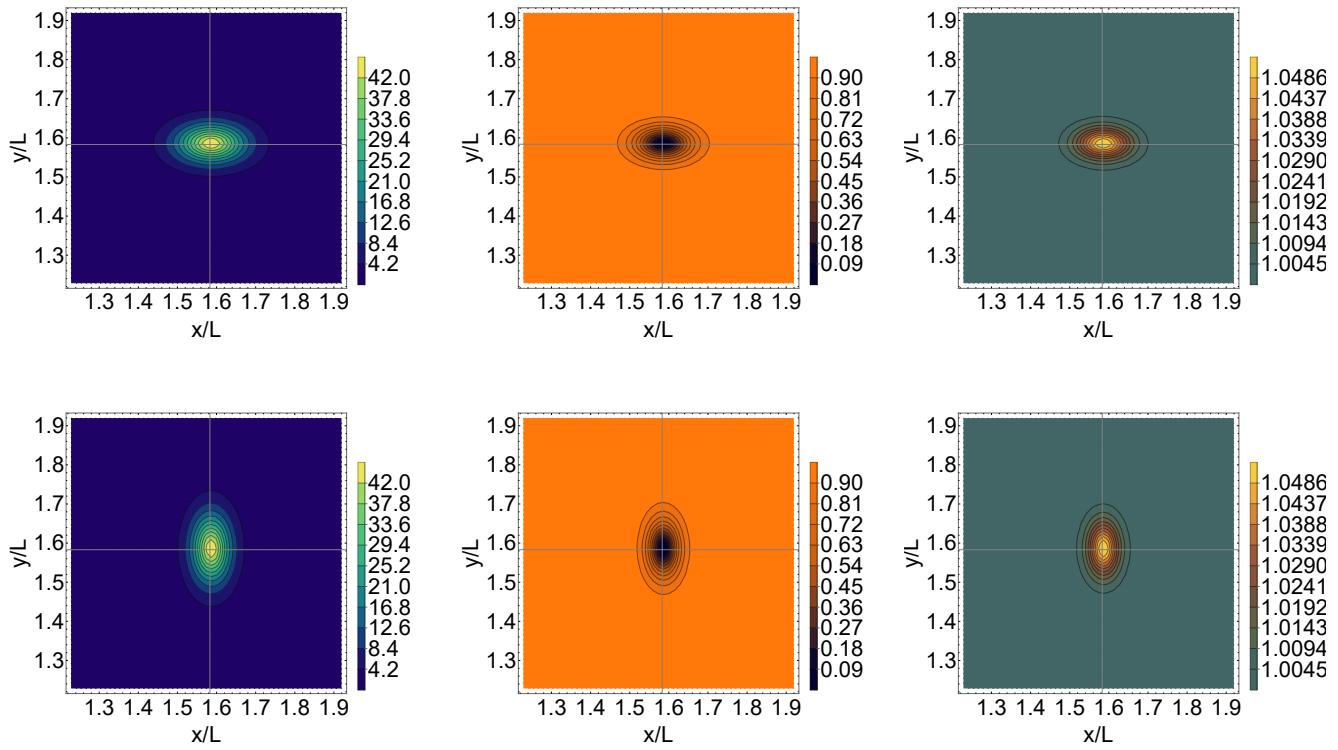


Figura 3.7: Graficos de B_z (izq.), $|\tilde{\psi}|^2$ (cent.) y $\tilde{\eta}$ (der.) obtenidas de la dinámica TDGL con $\hat{\lambda}_1 = -0,5$ (sup.), $\hat{\lambda}_1 = 0,5$ (inf.) y $\hat{\lambda}_2 = 0$ en ambos casos. Los centros de los vórtices se elongan en la dirección que minimiza la energía en cada caso, según el signo del parámetro de acople. Para ambos signos de $\hat{\lambda}_1$, el parámetro nemático aumenta en el centro del vórtice.

Ahora, permitiremos al vórtice romper la simetría de rotación dando valores no nulos a $\hat{\lambda}_1$. Recordamos que este acople es el encargado de la ruptura de simetría C_4 a C_2 . En particular, consideramos dos valores $\hat{\lambda}_1 = \pm 0,5$. En la energía libre, este parámetro acopla a la nematicidad a las derivadas tanto de \mathbf{a} como de $\tilde{\psi}$ de manera distinta, es decir, con un signo diferente para las direcciones \hat{x} y \hat{y} , tal como se observa en la Fig. 3.7. Por inspección de energía libre (Ec. 3.31), podemos notar que según el signo del acople el vórtice se elongará en una u otra dirección. A diferencia de lo que ocurre con el acople biquadrático, al romper la simetría en ambos casos la nematicidad aumenta en el centro del vórtice. En el caso en que tanto $\hat{\lambda}_1$ y $\hat{\lambda}_2$ son no nulos y debido a que al romper la simetría en ambos casos aumenta

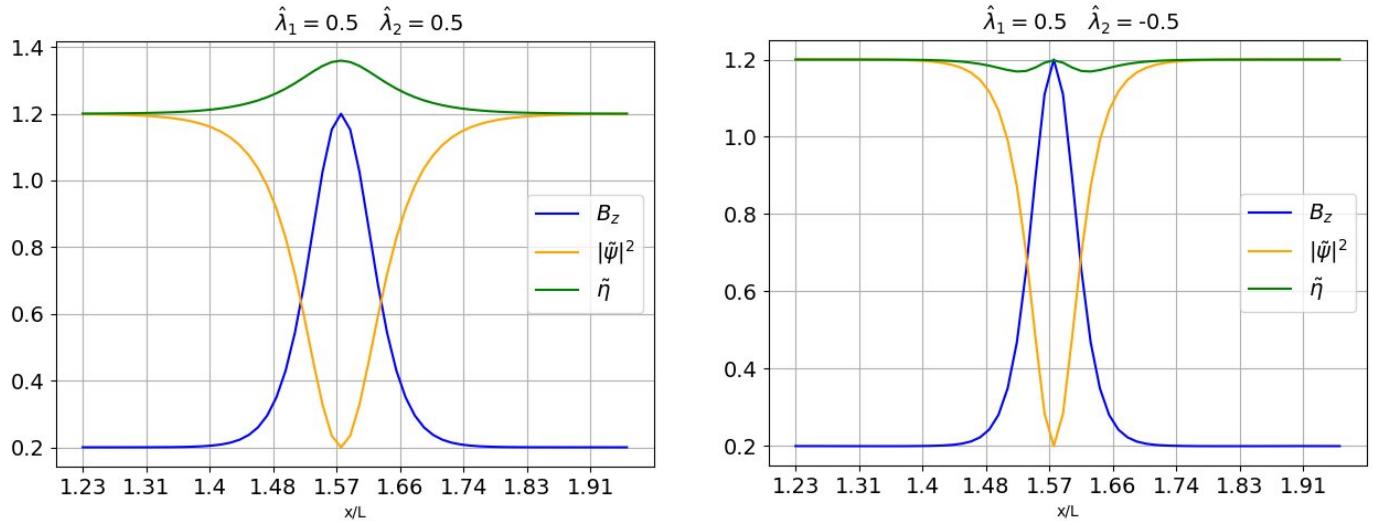


Figura 3.8: Perfiles de las variables dinámicas sobre la línea ($x/L, y/L = \pi/2$ con $\hat{\lambda}_1 = 0,5$. En el panel izquierdo se eligió $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ y en el derecho $\hat{\lambda}_2 = -0,5$. El máximo de B_z se alinea con el máximo de $\tilde{\eta}$ si ambos son positivos, mientras que un efecto competitivo se observa cuando $\hat{\lambda}_1 > 0$ y $\hat{\lambda}_2 < 0$.

la nematicidad en el centro del vórtice, se genera un efecto de competencia si $\hat{\lambda}_2 < 0$. El parámetro $\hat{\lambda}_1$ siempre aumenta la nematicidad pero $\hat{\lambda}_2 < 0$ la deprime en la misma región causando que el mínimo del parámetro nemático este en un anillo alrededor del centro del vórtice, como se puede observar en la Fig. 3.8.

3.4.3. Cálculo del κ_c en un fondo de nematicidad constante

En esta sección vamos a mostrar explícitamente que la nematicidad tiene el efecto de modificar la frontera entre la superconductividad tipo I y tipo II, mediante el cambio en el valor del parámetro crítico de GL κ_c . La demostración se inspira en una modificación sencilla al razonamiento original presentado en [66] y permite entender principalmente el rol del parámetro $\hat{\lambda}_1$.

Si consideramos un fondo de nematicidad constante, en tiempo y en espacio, $\tilde{\eta}(x, y, t) =$

$\tilde{\eta}_b$ se tiene que la energía libre se puede escribir como

$$F = \rho_0 |\alpha_{GL}| \int_V \frac{1}{2} \left(|\tilde{\psi}|^2 - 1 \right)^2 + \xi^2 (1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_b) \left| \mathcal{D}_x \tilde{\psi} \right|^2 + \xi^2 (1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_b) \left| \mathcal{D}_y \tilde{\psi} \right|^2 + (3.52)$$

$$+ \frac{\kappa^2}{4} (\nabla \times \mathbf{a})^2 + \hat{\lambda}_2 |\tilde{\psi}|^2 \tilde{\eta}_b^2.$$

Definimos los parámetros $\Gamma_x = 1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_b$ y $\Gamma_y = 1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta}_b$ y calculamos la identidad de Bogomol'nyi modificada

$$|\sqrt{\Gamma_x} \mathcal{D}_x \tilde{\psi} - i \sqrt{\Gamma_y} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}|^2 = \Gamma_x \mathcal{D}_x \tilde{\psi} \mathcal{D}_x \tilde{\psi}^* + \Gamma_y \mathcal{D}_y \tilde{\psi} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}^* + i \sqrt{\Gamma_x \Gamma_y} (\mathcal{D}_x \tilde{\psi} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}^* - \mathcal{D}_x \tilde{\psi}^* \mathcal{D}_y \tilde{\psi}). \quad (3.53)$$

y a menos de un término de derivada total

$$\xi^2 (\Gamma_x |\mathcal{D}_x \tilde{\psi}|^2 + \Gamma_y |\mathcal{D}_y \tilde{\psi}|^2) = \xi^2 |\sqrt{\Gamma_x} \mathcal{D}_x \tilde{\psi} - i \sqrt{\Gamma_y} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}|^2 - \frac{\sqrt{\Gamma_x \Gamma_y}}{2} |\tilde{\psi}|^2 \nabla \times \mathbf{a}. \quad (3.54)$$

Por otro lado, se tiene que

$$\frac{\kappa^2}{4} (\nabla \times \mathbf{a})^2 = \frac{\kappa^2}{4} [(\nabla \times \mathbf{a} - c_1 (|\tilde{\psi}|^2 - c_2))^2 + 2c_1 (|\tilde{\psi}|^2 - c_2) \nabla \times \mathbf{a} - c_1^2 (|\tilde{\psi}|^2 - c_2)^2]. \quad (3.55)$$

Reemplazando estas expresiones en la energía libre, obtenemos

$$F = |\alpha_{GL}| \rho_0 \int_V \left[\xi^2 |\sqrt{\Gamma_x} \mathcal{D}_x \tilde{\psi} - i \sqrt{\Gamma_y} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}|^2 + \frac{\kappa^2}{4} (\nabla \times \mathbf{a} - c_1 (|\tilde{\psi}|^2 - c_2))^2 - \frac{c_1 c_2 \kappa^2}{2} (\nabla \times \mathbf{a}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (c_1 \kappa^2 - \sqrt{\Gamma_x \Gamma_y}) |\tilde{\psi}|^2 (\nabla \times \mathbf{a}) + \frac{1}{2} \left(|\tilde{\psi}|^2 - 1 \right)^2 - \frac{\kappa^2 c_1^2}{4} (\tilde{\psi}^2 - c_2)^2 + \hat{\lambda}_2 |\tilde{\psi}|^2 \tilde{\eta}_b^2 \right]. \quad (3.56)$$

En el punto $\kappa = \kappa_c$ elegimos valores de los parámetros que permitan escribir a la energía libre como la suma de términos cuadráticos y un término de energía magnética. Resulta entonces que

$$c_1 \kappa_c^2 = \sqrt{\Gamma_x \Gamma_y}, \quad \frac{1}{2} = \frac{\kappa_c^2 c_1^2}{4}, \quad \frac{\kappa_c^2 c_1^2 c_2}{2} = 1 - \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}_b^2. \quad (3.57)$$

Las configuraciones de mínima energía se encontrarán cuando los términos cuadráticos sean nulos, es decir, que se cumpla

$$\sqrt{\Gamma_x} \mathcal{D}_x \tilde{\psi} = i \sqrt{\Gamma_y} \mathcal{D}_y \tilde{\psi}, \quad (3.58)$$

$$\nabla \times \mathbf{a} = c_1 (\tilde{\psi}^2 - c_2). \quad (3.59)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones que queda planteado a partir de la elección de los parámetros, se tiene por un lado que

$$c_1 = \frac{2}{\sqrt{\Gamma_x \Gamma_y}}, \quad c_2 = 1 - \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}_b^2, \quad (3.60)$$

y por otro lado que el valor del parámetro crítico es

$$\kappa_c^2 = \frac{\Gamma_x \Gamma_y}{2} = \frac{(1 - \hat{\lambda}_1^2 \tilde{\eta}_b^2)}{2}. \quad (3.61)$$

Si el acople entre nematicidad y superconductividad es nulo, recuperamos el valor de la teoría de GL sin nematicidad $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Para valores de $\hat{\lambda}_1 \neq 0$, independientemente de su signo, el valor crítico disminuye. Notar que el parámetro de acople biquadrático $\hat{\lambda}_2$ no tiene influencia en este cálculo.

Finalmente, en el valor crítico se tiene que la energía por unidad de longitud de un vórtice es

$$F = \frac{\Phi_0}{2} (1 - \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}_b^2) \sqrt{1 - \hat{\lambda}_1^2 \tilde{\eta}_b^2}. \quad (3.62)$$

La energía es proporcional al flujo magnético (lo que indica que no hay interacción entre vórtices) y se reduce al resultado estándar de Bogomol'nyi para $\hat{\lambda}_{1,2} = 0$

3.4.4. Interacción vórtice-vórtice en presencia de nematicidad

Como ya se mencionó, en ausencia de nematicidad el valor de $\kappa_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ es el que separa la superconductividad tipo I y tipo II y, desde la perspectiva de la dinámica de vórtices,

tiene que ver con la interacción atractiva o repulsiva entre ellos. En la sección anterior mostramos explícitamente que al romper la simetría C_4 poniendo valores no nulos a $\hat{\lambda}_1$ este valor se ve reducido, sin influencia del parámetro biquadrático $\hat{\lambda}_2$. En esta sección utilizaremos el método TDGL para estudiar como cambia κ_c al incluir los acoplos de la nematicidad con la superconductividad. Para hacerlo, colocamos dos vórtices en el plano xy con una separación d (del orden de ξ) entre ellos y estudiamos su evolución dinámica. Este método particular permite obtener resultados rápidos, ya que nos independiza del tiempo característico de separación entre vórtices, que puede ser muy largo cerca de κ_c .

Las condiciones iniciales utilizadas en este caso son similares a las que ya se han utilizado en la sección anterior sin nematicidad:

$$\tilde{\psi}(t=0, x, y) = \tilde{\psi}_1(t=0, x, y)\tilde{\psi}_2(t=0, x, y), \quad (3.63)$$

$$\tilde{\psi}_{1,2}(t=0, x, y) = \tilde{\psi}_v \frac{((\lambda \pm d) + i\mu)}{\sqrt{(\lambda \pm d)^2 + \mu^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{(\lambda \pm d)^2 + \mu^2}}{\sqrt{2}\xi} \right), \quad (3.64)$$

Esta condición inicial coloca dos vórtices enfrentados en el plano xy a una distancia $\cong 2\xi$ entre ellos en el eje \hat{x} .

Primero, estudiamos la influencia del acople biquadrático en la interacción vórtice-vórtice. Como hemos establecido anteriormente, este acople no revela la estructura nemática del parámetro de orden (en el sentido de ruptura local de simetría). Los valores permitidos de $\hat{\lambda}_2$ dependen del valor Γ_4 . En estas simulaciones elegimos $\Gamma_4 = 0,5$, una relación entre longitudes de coherencia nemática y superconductora de $l_\eta = 0,5\xi$. También, fijamos $\xi = 0,04$ y variaremos λ_L (cambiando el valor de κ).

En la Fig. 3.9 (sup.) se ven los gráficos de densidad en el plano xy para valores $\hat{\lambda}_2 = -0,35$. El valor del κ_c se estableció a partir de observar la distancia entre vórtices en función del tiempo y, en κ_c , esta distancia no debería cambiar en forma apreciable para tiempos

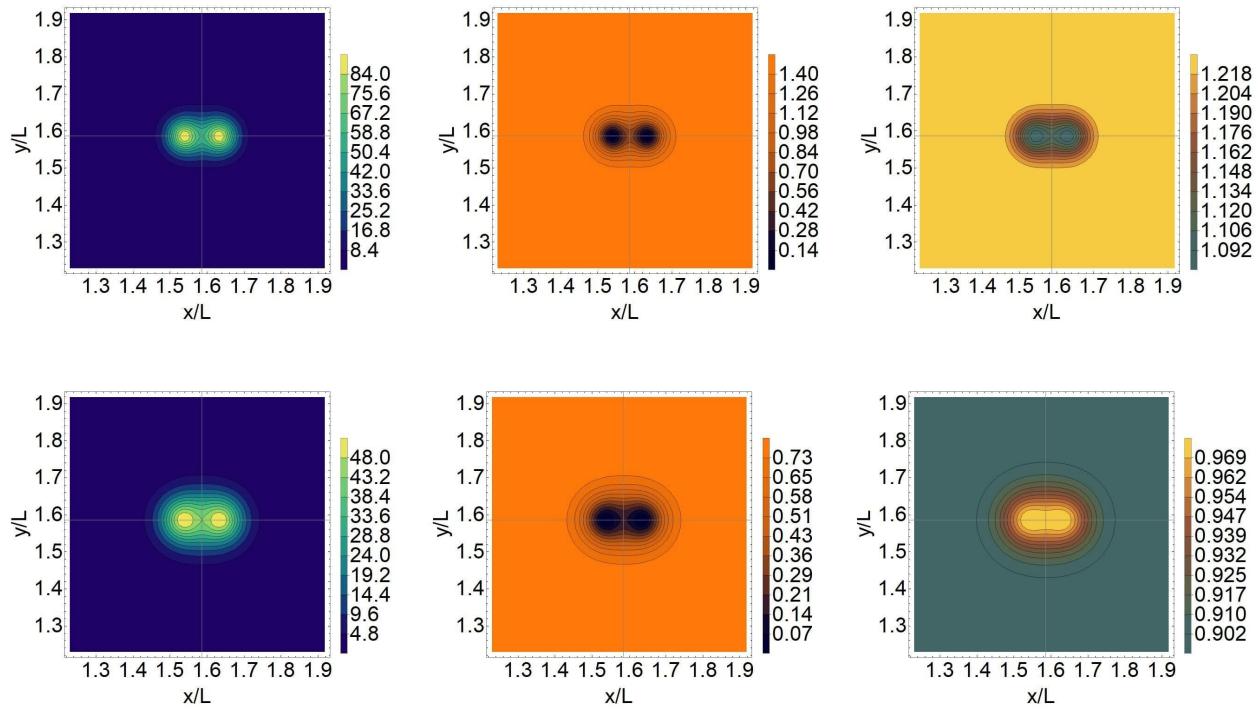


Figura 3.9: Gráficos de B_z , $|\tilde{\psi}|^2$ y $\tilde{\eta}$ para el valor crítico estimado del parámetro de GL $\kappa_c = 0,85$, con $\hat{\lambda}_2 = -0,35$ (sup.) y $\hat{\lambda}_2 = 0,25$ (inf.). Los paneles corresponden a tres tiempos distintos (aumentando de izquierda a derecha) donde se observa que la distancia intervórtice no cambia.

largos. En una simulación larga ($\tau \cong 10^3$) con $\kappa \cong 0,85$, no observamos movimientos apreciables de los centros del vórtice. Realizamos simulaciones con $\kappa = 0,84$ y $\kappa = 0,86$, observando pequeñas atracciones o pequeñas repulsiones (respectivamente) en cada caso. El hecho de que $\kappa_c > \frac{1}{\sqrt{2}}$ implica que la interacción entre vórtices es más atractiva, agrandando la región tipo I.

En el panel inferior de la Fig. 3.9 mostramos una situación similar para $\hat{\lambda}_2 = 0,24$ y $\kappa_c = 0,74$, estimado como detallamos anteriormente. Podemos inferir que independientemente del signo del acople biquadrático, éste siempre induce una interacción atractiva entre vórtices. Exploramos también como estos resultados se ven afectados al variar otros parámetros, resultados que mostramos en la tabla 3.1. Para el rango de parámetros que exploramos, κ_c

$\hat{\lambda}_2 = -0,353$				$\hat{\lambda}_2 = 0,240$			
Γ_4	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 0,5$	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 1,0$	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 2,0$	Γ_4	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 0,5$	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 1,0$	$\frac{l_\eta^2}{\xi^2} = 2,0$
0.25	1.05 ± 0.05	1.05 ± 0.05	1.05 ± 0.05	0.25	0.81 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.80 ± 0.01
0.5	0.85 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.88 ± 0.01	0.5	0.74 ± 0.01	0.76 ± 0.01	0.77 ± 0.01
1	0.76 ± 0.01	0.77 ± 0.01	0.78 ± 0.01	1	0.73 ± 0.01	0.73 ± 0.01	0.73 ± 0.01
2	0.74 ± 0.01	0.74 ± 0.01	0.74 ± 0.01	2	0.72 ± 0.01	0.72 ± 0.01	0.72 ± 0.01

Cuadro 3.1: Valores estimados del parámetro crítico de GL κ_c en el caso en que solo hay acople biquadrático, para dos valores representativos de $\hat{\lambda}_2$. No aparece una dependencia clara con el cociente entre las longitudes de coherencia. Observamos que el valor de κ_c decrece conforme aumenta Γ_4 .

no muestra una dependencia clara con la longitud de coherencia nemática l_η . Sin embargo, a valor fijo de $\hat{\lambda}_2$, podemos ver que $\kappa_c \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}$ a medida que aumenta Γ_4 . Esto es razonable de esperar ya que al aumentar Γ_4 , el parámetro de orden $\tilde{\eta}$ es constante y el efecto del acople es despreciable.

Consideramos ahora el acople que rompe la simetría C_4 explícitamente. Como calculamos anteriormente en este capítulo, sabemos que el efecto que tiene $\hat{\lambda}_1$ es de elongar los vórtices en dirección x o y según el signo del acople y que la nematicidad siempre aumenta en el centro del vórtice. Además, vimos que podemos encontrar exactamente como $\hat{\lambda}_1$ afecta el valor crítico que separa la superconductividad de tipo I o tipo II, en particular, disminuyendo su valor. Esto implica que el acople $\hat{\lambda}_1$ siempre induce una interacción repulsiva.

En el caso de un parámetro de orden nemático que tenga dinámica, como afectan los demás parámetros el valor de κ_c debe ser estudiado de forma numérica. La longitud de coherencia nemática, en ausencia de acoplos con la superconductividad, se calcula según $l_\eta^2 = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_4}$ mientras que fijamos la longitud de coherencia superconductora $\xi = 0,04x/L$. En lo que sigue, elegimos parámetros tales que se mantenga la relación $\frac{l_\eta}{\xi} = O(1)$.

Dentro de la precisión numérica que nos permite el código, no encontramos una variación

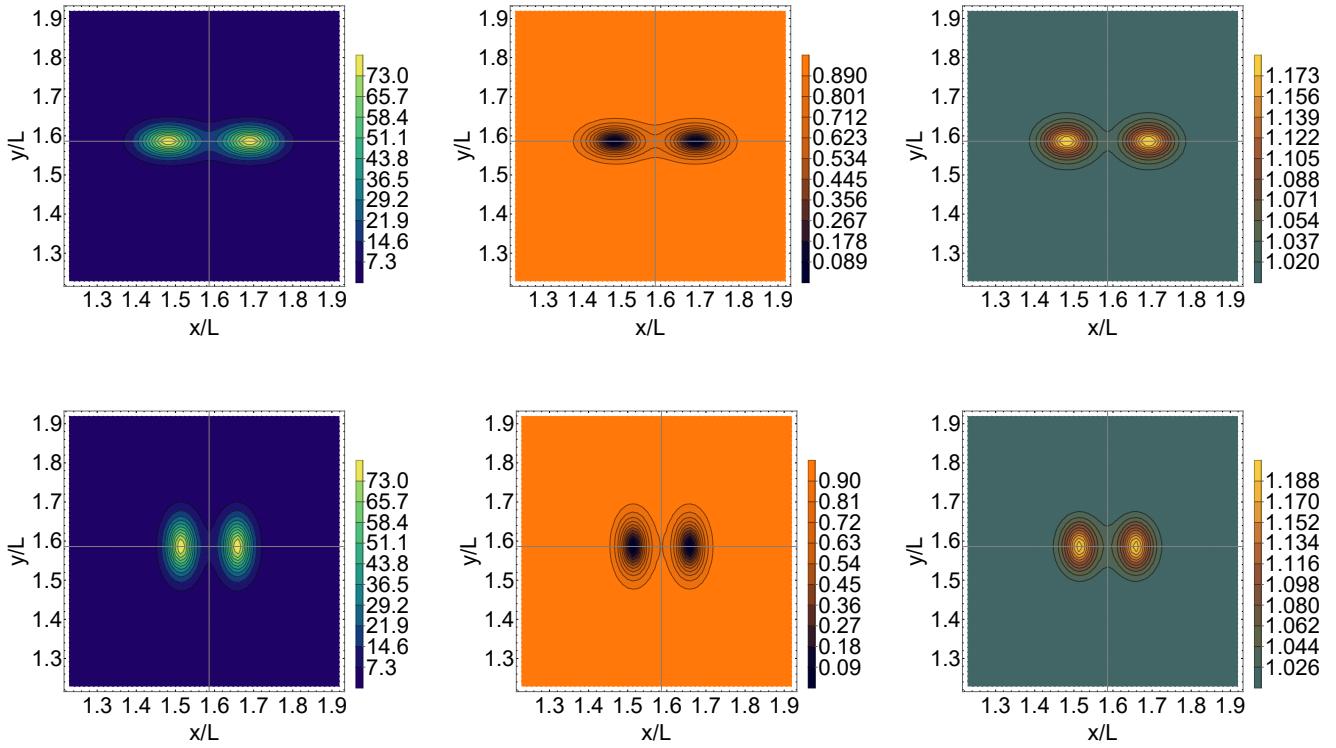


Figura 3.10: Gráficos de B_z (izq.), $|\tilde{\psi}|^2$ (cent.) y $\tilde{\eta}$ (der.) para una configuración de dos vórtices separados con $\hat{\lambda}_1 = 0,5$ (sup.) y $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ (inf.) en el valor $\kappa_c = 0,61$ (ver Ec. 3.61). No se observa variación de la distancia intervórtice en este valor.

del valor de κ_c al variar el signo del parámetro $\hat{\lambda}_1$, el valor de la longitud l_η o el parámetro Γ_4 . Según la Ec. (3.61), para $\hat{\lambda}_1 = \pm 0,5$ se obtiene $\kappa_c = 0,61$. Esta predicción coincide con los cálculos realizados, así como el valor de la energía por unidad de longitud que calculamos. En la Fig. 3.10 se observan los gráficos de densidad de los parámetros de orden y el campo magnético. Notar que los vórtices se elongan en direcciones distintas según el signo de $\hat{\lambda}_1$ y que la nematicidad aumenta en el centro del vórtice.

Para finalizar esta sección, realizamos simulaciones con ambos parámetros de acople no nulos. Debido a lo establecido anteriormente, fijamos el valor de $\Gamma_4 = 1$, lo que a su vez determina el rango de valores permitidos para el acople biquadrático según la Ec. (3.42). Como la dependencia con la longitud de coherencia nemática (en particular, con $\frac{l_\eta}{\xi}$) es

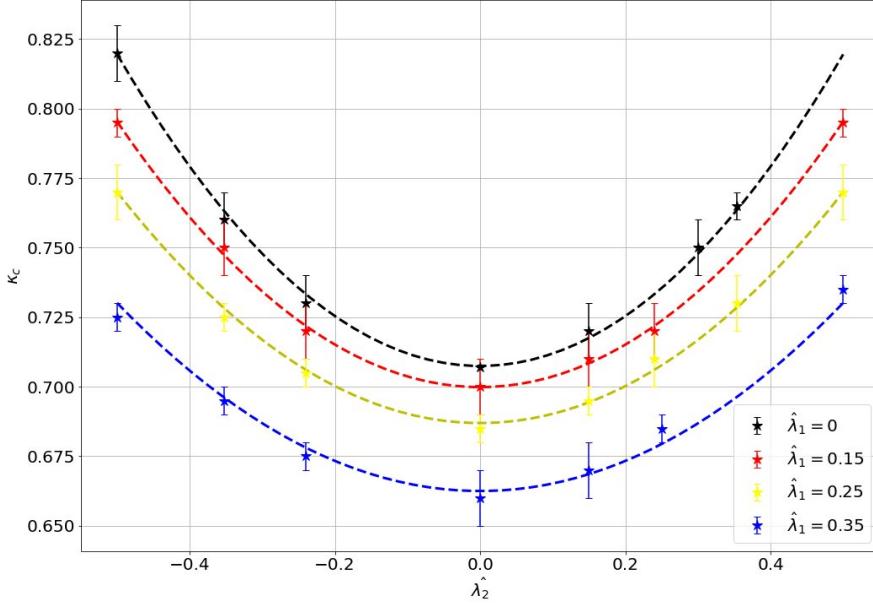


Figura 3.11: Dependencia con $\hat{\lambda}_2$ del valor crítico del parámetro de GL κ_c , para distintos valores de $\hat{\lambda}_1$. Los puntos (azules, naranjas, verdes, rojos) corresponden a $\hat{\lambda}_1 = (0, 0,15, 0,25, 0,35)$. Un modelo cuadrático ajusta los datos con residuos de orden 10^{-3} . El coeficiente que multiplica a $\hat{\lambda}_2^2$ es una función decreciente de $\hat{\lambda}_1$.

prácticamente despreciable, fijamos el valor en $\frac{l_n}{\xi} = 0,5$. Para estos valores, realizamos un barrido en $\hat{\lambda}_2$ para $\hat{\lambda}_1$ fijo y estudiamos la dependencia $\kappa_c = \kappa_c(\hat{\lambda}_2)$. Los resultados se observan en la Fig. 3.11. Dentro del rango de valores estudiados, concluimos que κ_c es cuadrático con $\hat{\lambda}_2$ y que el efecto de $\hat{\lambda}_1$ es reducir el valor de κ_c . En particular, los datos se ajustan según la formula

$$\kappa_c = \kappa_{c,0}(\hat{\lambda}_1) + a(\hat{\lambda}_1)\hat{\lambda}_2^2. \quad (3.65)$$

Para los datos presentados, encontramos que $a(\hat{\lambda}_1) \cong 0,45 - 0,5\hat{\lambda}_1$ y

$$\kappa_{c,0}(\hat{\lambda}_1) \cong \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{1}{2}\hat{\lambda}_1^2\tilde{\eta}_v^2\right), \quad (3.66)$$

que es consistente con el cálculo realizado anteriormente. El gráfico permite concluir lo siguiente respecto del rol de cada acople en la interacción vórtice-vórtice: el acople $\hat{\lambda}_2$ induce una interacción atractiva y por lo tanto estabiliza una fase Tipo I mientras que el

acople $\hat{\lambda}_1$ estabiliza una fase tipo II.

En resumen, en este capítulo se introdujo el problema de un vórtice superconductor interactuando con la nematicidad mediante la introducción de dos términos de acople en la energía libre superconductora: uno biquadrático y uno trilineal, que explícitamente rompe la simetría C_4 . Introdujimos el modelo, las ecuaciones que gobiernan la dinámica de los parámetros de orden y del campo magnético y mostramos el efecto de cada uno de los acoplos. Por un lado, el acople biquadrático $\hat{\lambda}_2$ tiene el efecto de modificar el valor de equilibrio de los parámetros de orden y según el signo del parámetro de acople puede aumentar o disminuir la nematicidad en el centro del vórtice. El acople trilineal tiene el efecto de deformar el centro del vórtice alineándolo con alguno de los ejes tetragonales (según el signo del parámetro de acople $\hat{\lambda}_1$). En este caso la nematicidad aumenta en el centro para ambos signos del acople trilineal, generando una competencia o cooperación según los signos relativos de $\hat{\lambda}_1$ y $\hat{\lambda}_2$.

Por otro lado, mostramos analíticamente que el acople trilineal tiene el efecto de reducir el valor crítico del parámetro de Ginzburg-Landau κ (induciendo una interacción repulsiva entre vórtices) y mostramos numéricamente su validez. Variando el parámetro $\hat{\lambda}_2$ y calculando el valor crítico κ_c para distintos valores de $\hat{\lambda}_1$, mostramos que la función $\kappa_c(\hat{\lambda}_2)$ es cuadrática en un rango amplio de $\hat{\lambda}_1$. En conclusión, el acople biquadrático induce una interacción atractiva y el acople trilineal una interacción repulsiva.

Capítulo 4

Interacción vórtice - pared de dominio nemática

En este capítulo estudiamos la interacción entre vórtices y paredes de dominio nemáticas en el contexto de la teoría de Ginzburg-Landau. Los resultados de este capítulo fueron recientemente publicados y se pueden encontrar en [18]. Introducimos una modificación a la teoría que permite comparar con situaciones experimentales que, a pesar de su simpleza, describe correctamente la fenomenología observada en FeSC.

En particular, encontramos que el signo del acople biquadrático determina el carácter atractivo o repulsivo de la interacción vórtice-pared de dominio nemática, consistente con lo observado en FeSe y BaFeCoAs respectivamente. El término trilineal, como ya describimos en la sección 3.4.2, es responsable de la deformación del núcleo de los vórtices. En la sección 4.3.2 de este capítulo mostramos además que induce una desviación de las trayectorias de los vórtices, con respecto a los ejes cristalinos. Por último, en el caso de la interacción atractiva, mostramos que un núcleo con forma cardioide es consistente con mediciones por STM en compuestos de FeSe.

Una de las consecuencias de la aparición de una fase nemática es la formación de densos

arreglos de dominios estructurales y nemáticos. Estos han sido observados y caracterizados mediante distintas técnicas experimentales [69, 70]. El rol de estos dominios y las paredes que los separan (las llamadas *paredes de dominio nemáticas*) en las propiedades de la fase normal es un tema de amplio debate [71, 72].

Una de las consecuencias naturales de la ruptura de la simetría C_4 a una C_2 del parámetro de orden nemático es la aparición de *paredes de dominio nemático*, que separan dominios con diferentes valores de nematicidad. Como hemos discutido en [18], en todos los materiales estudiados, la nematicidad electrónica ocurre de forma simultánea y parece estar íntimamente relacionada con una ruptura de la simetría cristalina. Como consecuencia de esta ruptura de simetría cristalina, también se espera que en el material aparezcan maclas de origen estructural.

Existe una creencia generalizada de que los grados de libertad nemáticos están fuertemente acoplados a los elásticos. En la literatura, se suele hablar casi indistintamente o de manera intercambiable (y, en ocasiones, de forma algo confusa) de maclas y paredes de dominio. En nuestra descripción, los grados de libertad elásticos no están incluidos; por lo tanto, estos podrían provocar efectos adicionales (ya sea cooperativos o competitivos) con los descritos aquí.

La influencia de las paredes de dominio nemáticas/maclas ha sido reportado en una serie de diferentes experimentos magnéticos y de transporte [69, 73, 74] y la interacción entre vórtices y estos defectos ha sido caracterizado en distintos compuestos [75–81]. En los compuestos de la familia BaFeCoAs la interacción es cooperativa, deprimiendo la superconductividad en la macla y actuando como centros de anclaje para los vórtices; por otro lado, en compuestos de FeSe la interacción es competitiva y las maclas repelen los vórtices.

En este capítulo mostraremos resultados referidos a la interacción entre vórtices y pa-

redes de dominio nemáticas en el marco de la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau. Realizaremos una modificación al modelo presentado en el capítulo anterior para representar con más fidelidad situaciones experimentales y caracterizaremos la fuerza de interacción entre vórtice y pared a través del estudio de la energía en función del tiempo. Por último, mostraremos que la anisotropía del vórtice induce una fuerza paralela a la pared que desvía a los vórtices de su trayectoria.

4.1. Modelo de Ginzburg-Landau modificado

El modelo de Ginzburg-Landau presentado en el capítulo consta básicamente de la suma de tres energías libres, una para cada parámetro de orden y una de interacción

$$F = F_S + F_N + F_{SN}. \quad (4.1)$$

La energía libre del parámetro de orden superconductor y la energía libre del parámetro nemático mantienen la estructura del capítulo anterior

$$F_S = \int_V \left[\alpha_{GL} |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m} |\mathcal{D}\psi|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} \right], \quad (4.2)$$

$$F_N = \int_V \left[\gamma_2 (\nabla \eta)^2 + \gamma_3 \eta^2 + \frac{\gamma_4}{2} \eta^4 \right]. \quad (4.3)$$

La interacción entre nematicidad y superconductividad es a través de dos términos

$$F_{SN} = F_{bi} + F_{tri}, \quad (4.4)$$

un término biquadrático (sin carácter nemático) y uno trilineal que explícitamente rompe la simetría cristalina.

Para el término biquadrático, utilizaremos la misma expresión que en el capítulo anterior

$$F_{bi} = \lambda_2 \int_V \eta^2 |\psi|^2. \quad (4.5)$$

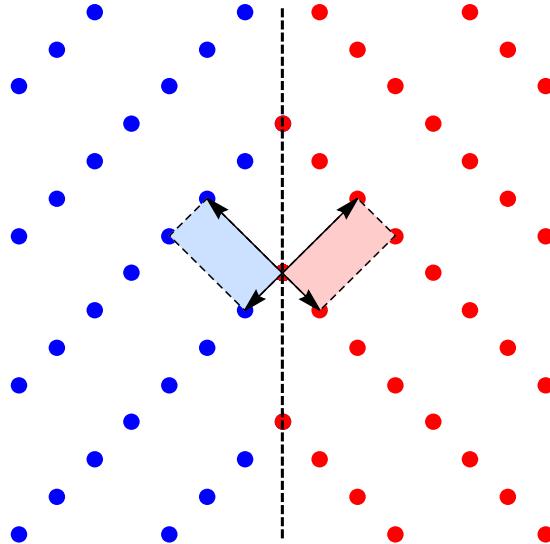


Figura 4.1: Representación esquemática de una pared de dominio nemática y la consecuente ruptura de simetría ortorrómbica. Los ejes cristalinos se encuentran a 45° entre ellas y con la pared.

Recordar que el parámetro λ_2 tiene ciertas restricciones, como se detalló en la Ec. 3.43 y anteriores.

Utilizaremos configuraciones con invariancia translacional en dirección \hat{z} , por lo que despreciamos la dependencia con esta coordenada. En cuanto a los ejes ab (en el plano) hay que prestar especial atención. En compuestos superconductores basados en hierro (como en muchos cupratos) la nematicidad ocurre simultáneamente con una transición de fase estructural de tetragonal a ortorrómbica. Durante la transición de fase, los dominios estructurales con distinta orientación de los ejes ortorrómbicos se pueden formar, creando paredes de dominio/maclas, si suponemos (como es común en la literatura) que los dominios nemáticos y estructurales coinciden.

Para tener esto en cuenta, modificamos el término trilineal según

$$F_{tr} = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda_1 \int_V \eta e_{ij} \mathcal{D}_i \psi (\mathcal{D}_j \psi)^*, \quad (4.6)$$

donde

$$e_{ij} = 2(n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij}), \quad (4.7)$$

y $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ es el vector director que señala la orientación del orden nemático con respecto a la base coordenada (que en este capítulo será la base tetragonal). Inspirados en la fenomenología en los superconductores basados en hierro, elegimos α de la siguiente manera: como el director se alinea con los ejes ortorrómbicos, si elegimos \hat{x} e \hat{y} coincidentes con la base tetragonal entonces $\alpha = \pi/4$. Recuperamos fácilmente la teoría del capítulo anterior si pensamos que $\alpha = 0$, es decir, alineando los ejes con la base ortorrómbica.

La energía libre completa que utilizaremos entonces en este capítulo es

$$\begin{aligned} F = & |\alpha_{GL}| \rho_0 \int_V \frac{1}{2} (|\tilde{\psi}|^2 - 1)^2 + \xi^2 |\nabla \tilde{\psi}|^2 - \mathbf{a} \operatorname{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla \tilde{\psi}) + \frac{1}{4\xi^2} \mathbf{a}^2 \tilde{\psi}^2 + \frac{\kappa^2}{4} (\nabla \times \mathbf{a})^2 \\ & + \Gamma_2 (\nabla \tilde{\eta})^2 + \frac{\Gamma_4}{2} (\tilde{\eta}^2 - 1)^2 + \hat{\lambda}_2 \tilde{\eta}^2 \tilde{\psi}^2 - \xi^2 \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta} [(\mathcal{D}_x \psi)^* \mathcal{D}_y \psi + (\mathcal{D}_y \tilde{\psi})^* \mathcal{D}_x \tilde{\psi}], \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde repetimos las definiciones de los parámetros de orden

$$\psi = \sqrt{\rho_0} \tilde{\psi}, \quad \eta = \eta_0 \tilde{\eta} \quad \mathbf{A} = \frac{mc|\alpha_{GL}|}{\hbar e} \mathbf{a}, \quad (4.9)$$

y las constantes $\rho_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\beta_{GL}}$ y $\eta_0^2 = \frac{|\gamma_3|}{\gamma_4}$. La dinámica disipativa de las variables queda prescripta por

$$\frac{\hbar^2}{2mD} \partial_t \psi = -\frac{\delta F}{\delta \psi^*}, \quad \frac{\sigma}{c^2} \partial_t \mathbf{A} = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{A}}, \quad \frac{\hbar^2}{2mD_n} \partial_t \eta = -\frac{\delta F}{\delta \eta}. \quad (4.10)$$

y una forma explícita de las ecuaciones resultantes se puede consultar en el Apéndice A.

Nuevamente trabajaremos bajo la suposición de que tanto la simetría del parámetro de orden superconductor y la del nemático están rotas. Esto implica minimizar el término del potencial, obteniendo valores de equilibrio

$$\tilde{\psi}_v^2 = \frac{1 - \hat{\lambda}_2}{1 - \frac{\hat{\lambda}_2^2}{\Gamma_4}}, \quad \tilde{\eta}_v^2 = \frac{1 - \frac{\hat{\lambda}_2}{\Gamma_4}}{1 - \frac{\hat{\lambda}_2^2}{\Gamma_4}}. \quad (4.11)$$

En estos valores la energía libre es

$$F_0 = |\alpha_{GL}| \rho_0 V \frac{(\tilde{\psi}_v^2 - 1)(\tilde{\psi}_v^2 + \tilde{\eta}_v^2)}{2\tilde{\eta}_v^2}. \quad (4.12)$$

Por conveniencia, en lo que sigue nos referiremos a este valor de referencia para reportar la energía

$$\tilde{F} = F - F_0. \quad (4.13)$$

4.2. El parámetro de orden superconductor y la pared de dominio nemática

Es sabido que una teoría con un parámetro de orden real tipo Ising admite soluciones no triviales que representan un defecto topológico 2-dimensional, llamados *paredes de dominio* [82]. Es sencillo de chequear que en el caso $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2 = 0$, el parámetro de orden nemático tiene como solución estacionaria

$$\tilde{\eta}(x) = \tilde{\eta}_v \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}l_\eta}\right), \quad (4.14)$$

donde l_η es la longitud de coherencia nemática definida anteriormente y se relaciona con el ancho de la pared. Esta expresión representa una pared de dominio centrada en $x = 0$, siguiendo la orientación típica de una macla estructural. La posición y orientación de la pared es fácilmente manejable.

La condición inicial utilizada en las simulaciones para el parámetro nemático en este capítulo será una pared de dominio centrada en $x/L = \pi/2$

$$\tilde{\eta}(x, y, t = 0) = \frac{\tilde{\eta}_v}{\tanh\left(\frac{1}{\sqrt{2}l_\eta}\right)} \tanh\left(\frac{\lambda(x)}{2l_\eta}\right). \quad (4.15)$$

con $\lambda(x) = \sqrt{2} \cos(x)$.

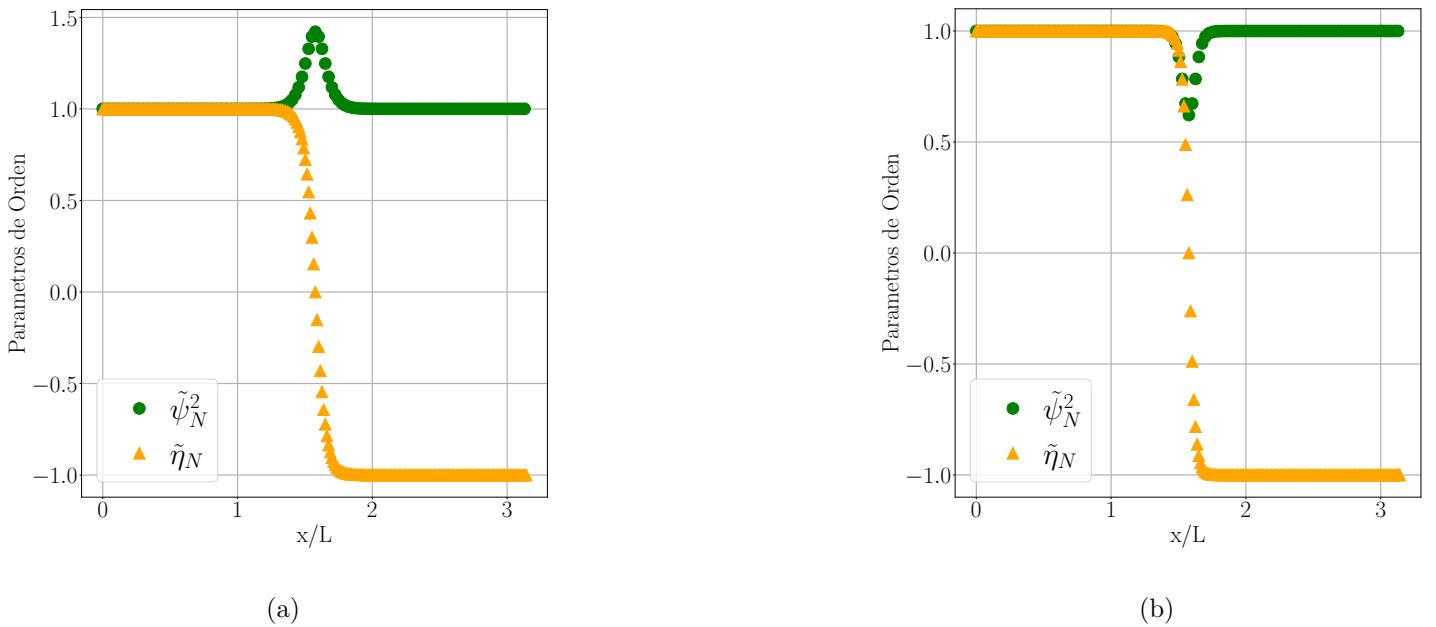


Figura 4.2: Perfiles de los parámetros de orden superconductor $\tilde{\psi}_N = \frac{|\psi|^2}{|\tilde{\psi}_v|^2}$ y nemático $\tilde{\eta}_N = \frac{\eta}{\eta_v}$, ambos normalizados por sus respectivos valores de equilibrio. En (a) y (b) se muestran los casos $\hat{\lambda}_2 > 0$ y $\hat{\lambda}_2 < 0$ respectivamente.

La energía que esta pared introduce en el sistema se puede calcular explícitamente (apendice)

$$E_{wall} = \frac{4}{3}\rho_0|\alpha_{GL}|\sqrt{2\Gamma_2\Gamma_4}, \quad (4.16)$$

Nuestras simulaciones muestran que la condición inicial propuesta relaja rápidamente a una situación estacionaria compatible con la solución analítica y la energía se calcula con una precisión $\mathcal{O}(10^{-4})$.

Comenzamos estudiando el comportamiento de un parámetro de orden superconductor uniforme $|\tilde{\psi}|^2 = \rho_0$ en presencia de una pared de dominio, con $\hat{\lambda}_1 = 0$. En el capítulo anterior mostramos que si $\hat{\lambda}_2 > 0$ ($\hat{\lambda}_2 < 0$) la superconductividad se mejora (deprime) en el centro del vórtice. En la Fig. 4.2 mostramos que el mismo fenómeno se observa en el caso de tener una pared de dominio. El hecho es consistente con la competencia (cooperación)

entre nematicidad y superconductividad para $\hat{\lambda}_2 > 0$ ($\hat{\lambda}_2 < 0$).

4.3. Interacción vórtice-pared

A continuación se presentan los resultados de la interacción entre un único vórtice y una pared de dominio nemática. Estudiaremos primero el efecto del término de acople biquadrático y luego veremos como se modifican estos resultados ante la presencia del término de acople trilineal.

4.3.1. Acople Bicuadrático

Como dijimos anteriormente, la superconductividad se favorece para $\hat{\lambda}_2 > 0$ y se deprime para $\hat{\lambda}_2 < 0$. En el caso en que se favorece, el vórtice tenderá a mover su centro (que es una región normal) lejos de la pared mientras que si está deprimida, tenderá a acercar su centro a la misma. Esto implica que la interacción es atractiva para un acople negativo mientras que es repulsiva para un acople positivo.

En la Fig. 4.3 (panel superior) se muestra un gráfico de la densidad $|\tilde{\psi}|^2$ para el caso atractivo. Comenzamos con un vórtice con simetría cilíndrica ubicado a una distancia $d = 3\xi$ de la pared de dominio. Elegimos los parámetros de forma tal que la longitud de coherencia nemática sea del orden de la superconductora, $l_\eta \cong \xi$ por simplicidad. La configuración estacionaria es la del vórtice completamente fijado a la pared. Como el parámetro de orden nemático también tiene dinámica, la pared se dobla durante el proceso de anclaje de los vórtices. Esta rigidez es controlable a través del parámetro Γ_2 . En la misma Fig. pero en el panel inferior mostramos la dinámica en el caso repulsivo ($\hat{\lambda}_2 > 0$). La condición inicial en este caso consiste en un vórtice anclado inicialmente a la pared que, al evolucionar la dinámica, es repelido de la pared. Notar también que como mostramos en el caso

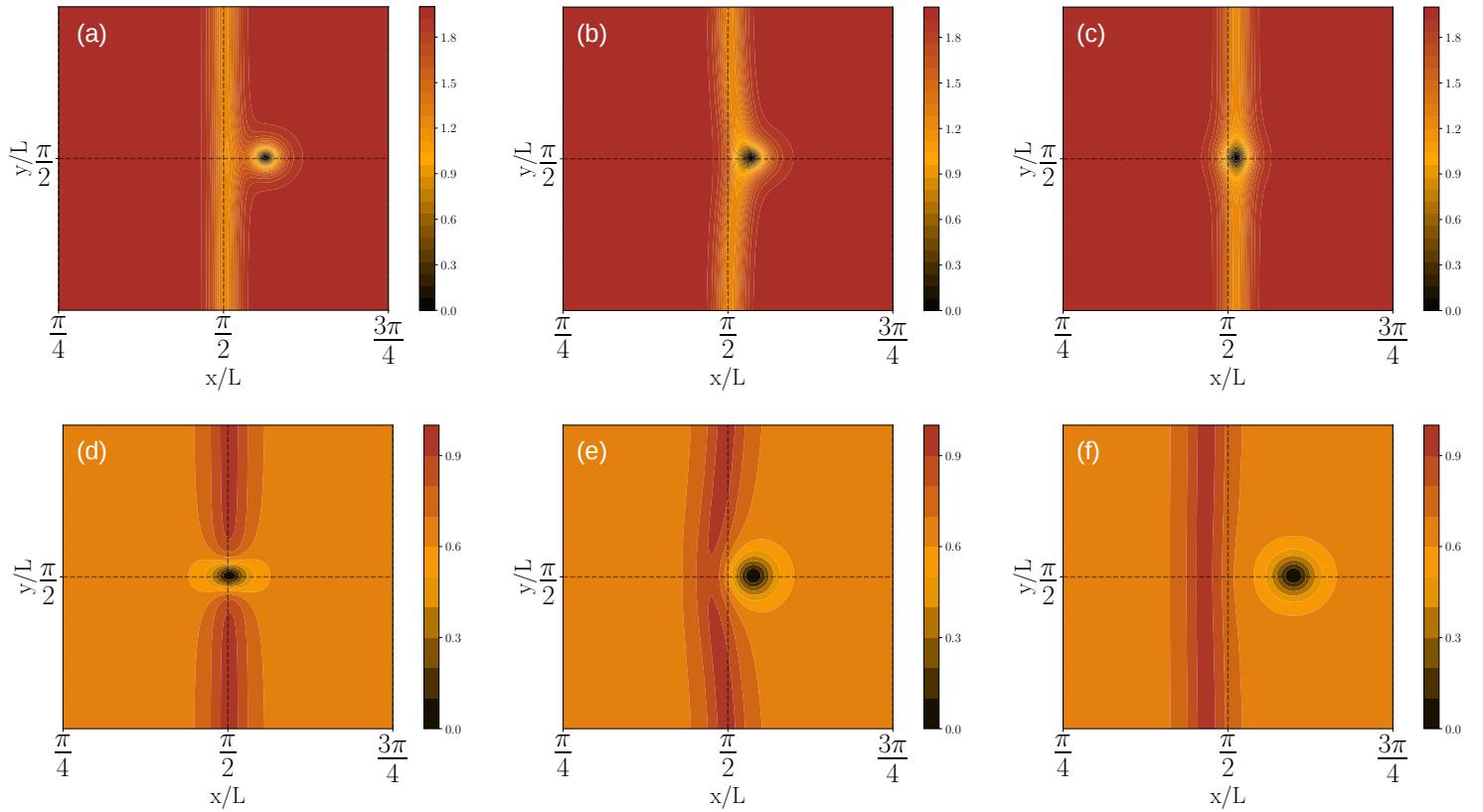


Figura 4.3: *Capturas a tiempo fijo del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ (creciente de izquierda a derecha) en el caso de acople únicamente biquadrático. El parámetro Γ_2 se ajustó de forma que $l_\eta = \xi = 0,04$ (los anchos efectivos dependen del signo de $\hat{\lambda}_2$). En el panel superior se muestra la dinámica para $\hat{\lambda}_2 = -0,5$ y en el inferior para $\hat{\lambda}_2 > 0$. La pared de dominio se dobla considerablemente cuando el vórtice es repelido de la pared, retomando su forma original rápidamente tras salir el vórtice.*

de un único vórtice, la longitud de coherencia efectiva depende de $\hat{\lambda}_2$, por lo que el núcleo del vórtice es notablemente mayor que en el caso atractivo. El efecto de deformación de la pared es también más intenso en el caso repulsivo que en el atractivo.

Lejos de la pared de dominio, el vórtice tiene simetría cilíndrica, ya que no hay acople trilineal. A medida que se ve atraído por la pared, pierde esta simetría y se elonga en la dirección de la simetría de translación de la pared (en este caso, el eje \hat{y}). Debido a que no existe acople directo entre la nematicidad y el potencial vector, esta pérdida de simetría

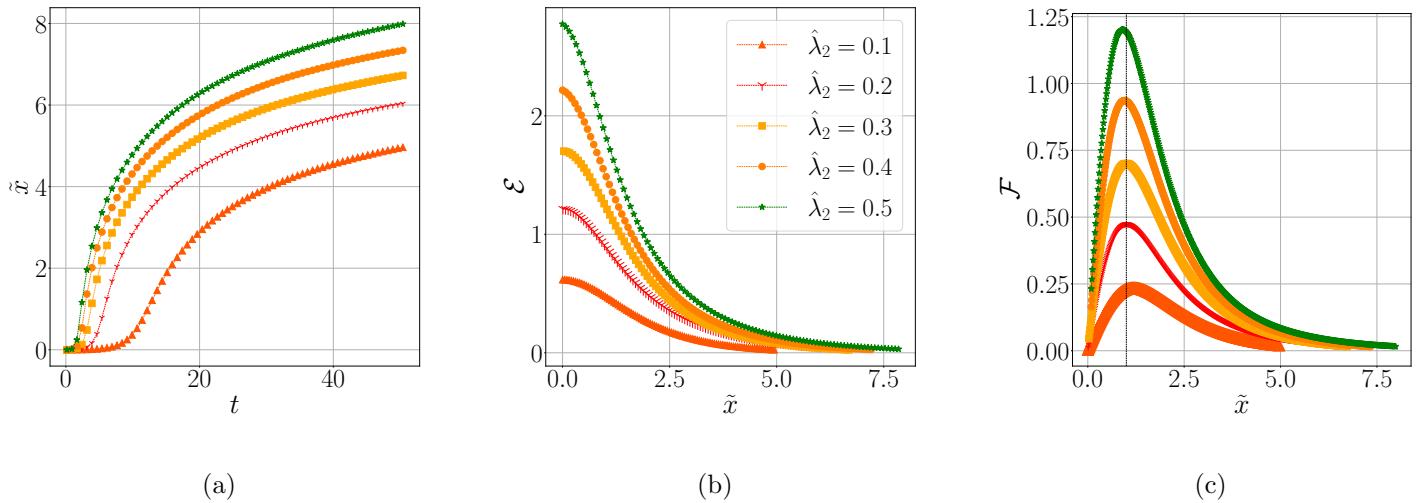


Figura 4.4: (a) Distancia \tilde{x} del vórtice a la pared de dominio nemática, medida desde el centro de la pared $(\pi/2, \pi/2)$, como función del tiempo para distintos valores de $\hat{\lambda}_2$ con $\hat{\lambda}_1 = 0$. (b) Energía adimensional de interacción como función de \tilde{x} (c) Fuerza adimensional de interacción vórtice-pared de dominio como función de \tilde{x} .

prácticamente no se ve en el campo magnético (no mostrado).

Vamos ahora a caracterizar la interacción entre vórtice y pared de una forma más cuantitativa. Por simplicidad, nos concentraremos en el caso repulsivo (un análisis similar se puede hacer para el caso atractivo con resultados equivalentes).

El primer observable relevante es la trayectoria del vórtice. Podemos observar a partir de la densidad del parámetro superconductor que la trayectoria es en dirección \hat{x} , perpendicular a la dirección de simetría de translación de la pared (\hat{y}). Realizamos un seguimiento del vórtice en el plano xy observando el perfil del mismo para $(x, y = \pi/2)$ y luego ajustando con una función gaussiana. Esto nos permite obtener de forma precisa la posición del vórtice tiempo a tiempo a través del cálculo del valor medio del ajuste. Esta información se puede combinar con la energía en función del tiempo y, mediante una composición, obtener así la energía en función de la distancia del vórtice a la pared. Para realizar este análisis de forma cuidadosa, es necesario conocer tanto la energía de la pared como la energía del

$\hat{\lambda}_2$	\mathcal{E}_0	c_1	c_2
0.1	0.617	1.658	2.434
0.2	1.176	2.490	2.757
0.3	1.703	3.358	3.044
0.4	2.223	4.546	3.413
0.5	2.761	6.328	3.922

Cuadro 4.1: Valores de los parámetros del ajuste de \mathcal{E} en el caso biquadrático repulsivo ($\hat{\lambda}_2 > 0$).

vórtice de forma aislada y luego restarselas a la energía total. En particular, nos interesan las energías por unidad de longitud. Como estamos asumiendo simetría de traslación en el eje \hat{z} , integramos únicamente en el plano xy . Definiendo cantidades espaciales adimensionales $\tilde{x} = x/\xi$, $\tilde{y} = y/\xi$ y un potencial vector adimensional $\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{a}/\xi$, podemos expresar

$$\tilde{E} = \tilde{E}_0 \mathcal{E}, \quad (4.17)$$

donde \mathcal{E} es una función adimensional de las variables κ , $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$, Γ_4 , y Γ_2/ξ^2 , mientras que \tilde{E}_0 establece la escala para la energía por unidad de longitud

$$\tilde{E}_0 = |\alpha_{GL}| \rho_0 \xi^2 = \frac{|\alpha_{GL}|^2}{\beta} \xi^2 = \frac{H_c^2}{4\pi} \xi^2, \quad (4.18)$$

con H_c el campo crítico termodinámico.

De esta forma, queda definida la energía de interacción vórtice-pared adimensional como

$$\mathcal{E}_{int} = \frac{\tilde{E}_T - \tilde{E}_{vortex} - \tilde{E}_{wall}}{\tilde{E}_0}. \quad (4.19)$$

A partir de esta energía, podemos calcular la fuerza efectiva de interacción tomando una derivada

$$\tilde{F}_{eff} = -\frac{\partial \mathcal{E}_{int}}{\partial x} = F_0 \mathcal{F} = \frac{H_c^2}{4\pi} \xi \mathcal{F}, \quad (4.20)$$

con \mathcal{F} una función adimensional.

En la Fig. 4.4 mostramos las trayectorias, energías en función de la posición y fuerzas entre vórtice y pared con distintos valores del acople biquadrático. Los datos de energía son ajustables según la expresión

$$\mathcal{E}_{fit} = \frac{\mathcal{E}_0}{1 + c_1 \sinh^2 \frac{x}{c_2}}, \quad (4.21)$$

y los coeficientes resultantes para el ajuste se muestran en la tabla 4.1.

En la Fig. 4.4c se muestra la fuerza de interacción por unidad de longitud en función de la distancia, con las mismas normalizadas por la longitud de coherencia. El máximo de la fuerza ocurre en el borde de la pared, marcada por la línea punteada vertical. La fuerza tiende exponencialmente a cero lejos de la pared, lo que confirma la naturaleza de corto alcance de la interacción.

4.3.2. El efecto del acople trilineal

A continuación estudiamos como se modifican los resultados cuando incluimos el acople trilineal, que explícitamente rompe la simetría cristalina C_4 . Los vórtices se han observado experimentalmente y se ha confirmado que los mismos son elípticos (ver más adelante), con los ejes de la elipse orientados segun los ejes ortorrómbicos. Recordemos que en nuestras simulaciones la base xy está elegida alineada con los ejes tetragonales, por lo que esperamos ver vórtices elípticos a 45° de los ejes.

Veamos explícitamente como nuestro modelo evidencia este fenómeno. Tomaremos a la nematicidad como constante y con un valor fijo. La energía libre se puede escribir entonces como

$$\tilde{F}_s = \int_V \tilde{\alpha}_{GL} |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m} l_{ij} \mathcal{D}_i \psi \mathcal{D}_j \psi^* + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi}, \quad (4.22)$$

donde $\tilde{\alpha}_{GL} = \alpha_{GL} + \lambda_2 \eta^2$ y

$$l_{ij} = \delta_{ij} + \lambda_1 e_{ij} = (1 - \lambda_1 \eta) \delta_{ij} + 2\lambda_1 \eta n_i n_j. \quad (4.23)$$

Recordando que $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ con $\alpha = \pi/4$, se tiene que

$$\mathbf{l} = \mathbf{I}_{2x2} + \lambda_1 \eta \sigma_x, \quad (4.24)$$

donde $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ es una matriz de Pauli simétrica. Diagonalizando \mathbf{l} obtenemos que sus autovalores son

$$l_{\pm} = 1 \pm |\lambda_1 \eta|. \quad (4.25)$$

Esto da cuenta de cómo se modifican las dimensiones del vórtice, generando un eje largo y un eje corto a través de la modificación de la longitud de coherencia superconductora según

$$\xi_{\pm} = \frac{\hbar^2 l_{\pm}}{2m|\tilde{\alpha}_{GL}|}. \quad (4.26)$$

La excentricidad de una elipse se puede expresar en términos de sus ejes largo y corto como $e = (1 - a_{<}^2/a_{>}^2)^{1/2}$ donde $a_{>} (a_{<})$ son los ejes largo y corto respectivamente. Reemplazando los valores, tenemos una expresión que relaciona la excentricidad del vórtice con el parámetro de acoplamiento trilineal $\hat{\lambda}_1$:

$$e = \left(\frac{2|\hat{\lambda}_1 \eta|}{1 + |\hat{\lambda}_1 \eta|} \right)^{1/2} \quad (4.27)$$

A continuación, nos enfocamos en la dinámica del vórtice elíptico en interacción con la pared de dominio nemática. Los resultados obtenidos y su descripción escapan a una interpretación intuitiva sencilla ya que encontramos un comportamiento peculiar: a diferencia del caso del vórtice con simetría cilíndrica, el vórtice elíptico sigue una trayectoria que no es perpendicular a la pared para todo tiempo sino que tiene una componente no despreciable en la dirección \hat{y} . En la Fig. 4.5 mostramos la densidad $|\tilde{\psi}|^2$ en tres tiempos distintos (avanzando de izquierda a derecha) de la dinámica obtenida a partir de las simulaciones con $\hat{\lambda}_1 = 0,5$ y $\hat{\lambda}_2 = 0,5$.

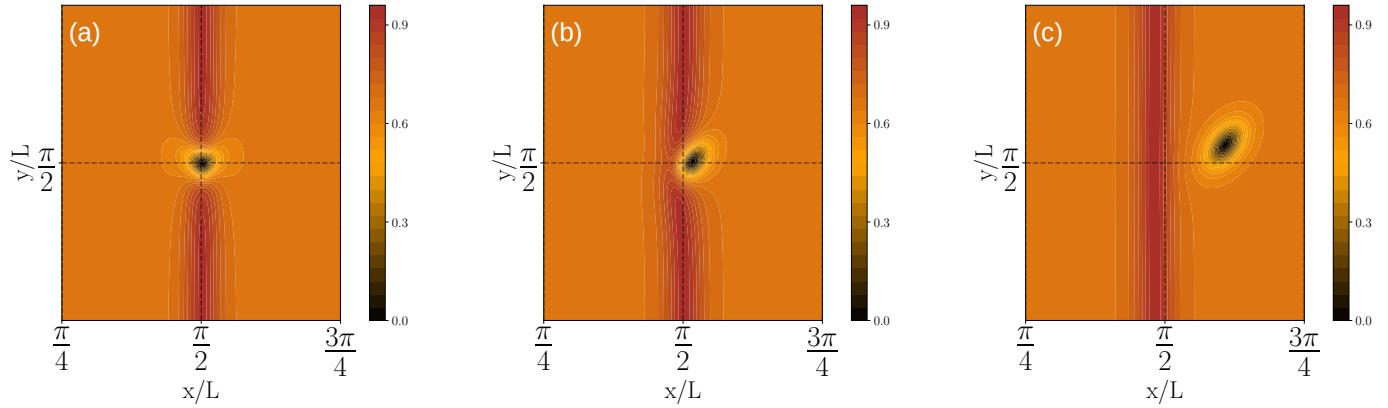


Figura 4.5: *Capturas a tiempo fijo del parámetro de orden superconductor con acople biquadrático repulsivo $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ y trilineal $\hat{\lambda}_1 = 0,5$. El parámetro de GL se fijó en $\kappa = \frac{4}{\sqrt{2}}$ y Γ_2 es tal que $l_\eta = \xi$. A medida que el vórtice abandona la pared, se vuelve más elíptico y se desvía de la trayectoria esperada $y = \pi/2$, como en el caso puramente biquadrático.*

De la misma forma que en el caso de acople biquadrático, elegimos los parámetros de forma tal que $l_\eta \cong \xi$. La dinámica del vórtice muestra que el mismo arranca con una simetría quasi cilíndrica y se vuelve más elíptico a medida que la nematicidad se acerca a un valor constante. Esto causa que el vórtice se desvíe de su trayectoria perpendicular a la pared, apareciendo una componente vertical. Para cuantificar mejor este comportamiento, calculamos las trayectorias $\tilde{y}(\tilde{x})$ para distintos valores de $\hat{\lambda}_1$ (a $\hat{\lambda}_2 = 0,5$ fijo) a partir del cálculo de $\tilde{x}(t)$ e $\tilde{y}(t)$ tal como se describió en el caso puramente biquadrático. Los resultados se muestran en la Fig. 4.6

Se puede ver que la componente $\tilde{x}(t)$ no se ve afectada al variar la elipticidad del vórtice mientras que la componente $\tilde{y}(t)$ es aproximadamente lineal con $\hat{\lambda}_1$. Las trayectorias muestran claramente como tiende a ser perpendicular a la pared a medida que $\hat{\lambda}_1 \rightarrow 0$.

Analizamos por último que pasa con los vórtices anclados a la pared en el caso de que haya ruptura de simetría C_4 . Recordamos que en el caso puramente biquadrático, el vórtice se elonga en la dirección \hat{y} al quedar anclado. En el caso que $\hat{\lambda}_1 \neq 0$ y debido a que a

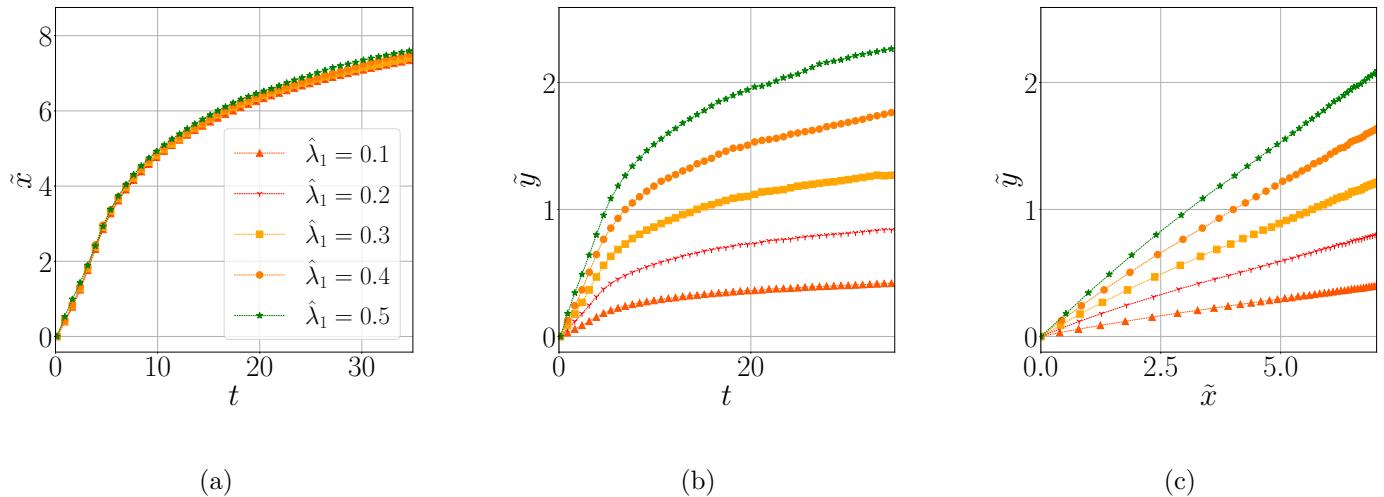


Figura 4.6: Los paneles (a) y (b) muestran $\tilde{x}(t)$ y \tilde{y} , respectivamente, medidas desde el centro de la pared $(\pi/2, \pi/2)$ para distintos valores de $\hat{\lambda}_1$. (c) Trayectorias de los vórtices $\tilde{y}(\tilde{x}(t))$ variando $\hat{\lambda}_1$. A medida que el acople tiende a cero, el ángulo de la trayectoria efectiva respecto de la recta $y = \pi/2$ tiende a cero.

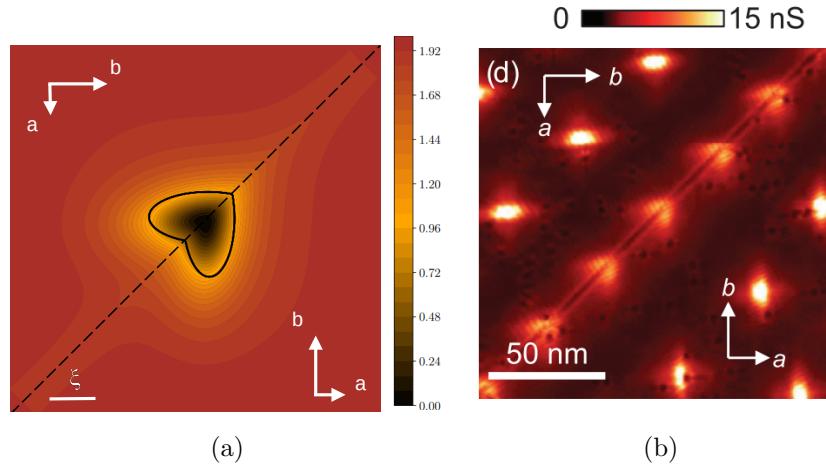


Figura 4.7: (a) Densidad del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ calculada con el modelo TDGL para un vórtice anclado a una pared nemática con $\hat{\lambda}_1 = 0.5$ y $\kappa = \frac{4}{\sqrt{2}}$. La línea punteada representa la pared nemática y los ejes ortorrómbicos a y b se muestran con las flechas blancas. (b) Imagen experimental de conductividad (a zero-bias) tomada de [77], donde se ven vórtices anclados a una pared de dominio a $T = 1.5K$ y campo magnético de $1T$ aplicado paralelo al eje perpendicular c . Los ejes cristalográficos se muestran con flechas blancas.

cada lado de la pared la nematicidad tiene un signo distinto, el vórtice anclado muestra una simetría peculiar que resulta de la superposición de dos elipses con sus ejes rotados de forma distinta a cada lado de la pared. Esto produce un efecto sobre el vórtice que se asemeja a un *corazón*.

En efecto, mostramos en la Fig. 4.7 que el perfil del vórtice anclado se puede ajustar con una cardioide

$$h(x, y) = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \pm 2|\lambda_1\eta_v||x - x_0|(y - y_0), \quad (4.28)$$

donde $(x_0, y_0) = (\pi/2, \pi/2)$ son las coordenadas del centro del vórtice. Este perfil particular es muy similar al observado por experimentos de STM en un compuesto de FeSe en [77]. Es importante destacar que a pesar de que la teoría propuesta en este capítulo es más simple que la utilizada en [77], la forma del vórtice anclado es muy similar entre las simulaciones y el experimento.

Capítulo 5

Redes de vórtices en superconductores con nematicidad

En un superconductor tipo II inmerso en un campo magnético externo de amplitud mayor a H_{c1} penetran vórtices dentro del material. Abrikosov mostró, a partir de la teoría de GL, que un conjunto de vórtices en un superconductor infinito debe arreglarse en una red triangular [2]. Sin embargo, la diferencia energética entre una configuración triangular y una cuadrada es del orden de 2% [83]. Una extensión de la teoría GL que incluya la nematicidad puede dar lugar a configuraciones de vórtices con distinta simetría.

En este capítulo sentaremos las bases numéricas para el estudio de redes de vórtices en superconductores nemáticos utilizando métodos espectrales. Presentaremos una modificación a nuestro esquema numérico y teórico para permitir la inclusión de campos magnéticos y corrientes externas. Realizamos primero un estudio de la red de Abrikosov con nuestro formalismo y método numérico para chequear el mismo contra resultados conocidos. Luego, veremos como cambian estos al introducir una anisotropía en la red de vórtices en la forma de nematicidad, que deforma los vórtices y los torna elípticos. Por último e inspirados en la fenomenología encontrada en FeSC, incluiremos paredes de dominio nemáticas en el

sistema.

5.1. Campo magnético externo y trampa de potencial

La primera modificación que necesitamos hacer en la energía libre tiene que ver con la inclusión de un campo externo. Experimentalmente, la red de vórtices se forma en un material superconductor a través de la aplicación de campos magnéticos externos. En la energía libre superconductora, Eq. 3.4, modificamos el término de energía magnética como

$$F_{mag} = |\alpha_{GL}| \rho_0 \int_v \frac{\kappa^2}{4} |\nabla \times \mathbf{a} - \mathbf{h}_{ext}|^2, \quad (5.1)$$

donde la relación entre el campo externo original y nuestra teoría es

$$\mathbf{H}_{ext} = \frac{mc|\alpha_{GL}|}{\hbar e} \mathbf{h}_{ext} = \frac{\phi_0}{4\pi\xi^2} \mathbf{h}, \quad (5.2)$$

con $[\mathbf{h}_{ext}] = [\nabla \times \mathbf{a}] = 1$. Es decir, no controlaremos exactamente el campo magnético \mathbf{B} sino que el campo externo aplicado \mathbf{h}_{ext} , lo que implica una transformación de Legendre en la energía libre. Esto es porque no pondremos más vórtices aislados como condición inicial para el parámetro de orden superconductor (controlando el flujo total de \mathbf{B} en la caja), sino que impondremos un valor de campo externo y \mathbf{B} evolucionará a un valor de equilibrio consistente con él, formando vórtices en el interior del material.

Las ecuaciones para las componentes del potencial vector se modifican según

$$\partial_\tau a_x = \frac{2(1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \sigma_1} \text{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_x \tilde{\psi}) - \frac{(1 + \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \xi^2 \sigma_1} a_x |\tilde{\psi}|^2 - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a} - \nabla \times \mathbf{h})_x, \quad (5.3)$$

$$\partial_\tau a_y = \frac{2(1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \sigma_1} \text{Im}(\tilde{\psi}^* \nabla_y \tilde{\psi}) - \frac{(1 - \hat{\lambda}_1 \tilde{\eta})}{\kappa^2 \xi^2 \sigma_1} a_y |\tilde{\psi}|^2 - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{a} - \nabla \times \mathbf{h})_y. \quad (5.4)$$

La función que elijamos para \mathbf{h}_{ext} debe cumplir restricciones relacionadas a las condiciones periódicas de contorno, impuestas por el método numérico. En una situación real, las

corrientes externas que generan los campos magnéticos aplicados a las muestras superconductoras deben estar por fuera y lejos del mismo, de forma que el campo externo en la región que ocupa el material sea lo más uniforme posible, como en un solenoide infinito. Para lograr esto numéricamente en nuestro método numérico (pseudo espectral, con condiciones de contorno periódicas y con simetría de traslación en la dirección \hat{z}) es necesario confinar la región superconductora dentro la caja de simulación y generar la corriente sobre el borde de misma.

Con este objetivo en mente, desarrollamos primero lo relativo al campo magnético. Consideremos el estado normal $\tilde{\psi} = 0$ y condiciones estacionarias. Las ecuaciones resultantes para el potencial vector en este caso se resumen en

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{a} = \nabla \times \mathbf{h}. \quad (5.5)$$

Esto implica que

$$\nabla \times \mathbf{a} = \mathbf{h} + \mathbf{K}, \quad (5.6)$$

donde \mathbf{K} es un campo vectorial tal que $\nabla \times \mathbf{K} = 0$.

Nos restringimos al caso en que el campo aplicado sea normal a la superficie superductora (en nuestro caso, donde \hat{x} y \hat{y} coinciden con los ejes ortorrómbicos, la dirección normal será \hat{z}). Para el campo \mathbf{K} asumimos entonces que

$$\mathbf{K} = k\hat{z} \implies \partial_x \mathbf{K} = \partial_y \mathbf{K} = 0. \quad (5.7)$$

Las condiciones periódicas de contorno sobre la caja de simulación M imponen que la circulación del campo magnético sea nula, es decir que

$$\int_M (\nabla \times \mathbf{a}) d\mathbf{S} = \int_M (\mathbf{h} + k\hat{z}) d\mathbf{S} = 0. \quad (5.8)$$

Luego, recordando que la caja de simulación es de tamaño $2\pi \times 2\pi$, se tiene que

$$\int_M \mathbf{h} d\mathbf{S} = -k(2\pi)^2. \quad (5.9)$$

En particular para este trabajo utilizamos la función

$$\mathbf{h}_{ext} = h_0 \left[\sin \left(\frac{x - \pi}{2} \right)^p + \sin \left(\frac{y - \pi}{2} \right)^p \right] \hat{z}, \quad (5.10)$$

donde p es un número natural. Para las simulaciones presentadas en este capítulo, se fijó $p = 32$. Un gráfico del campo magnético y la corriente asociada al mismo para este valor de p se muestra en la Fig. 5.1.

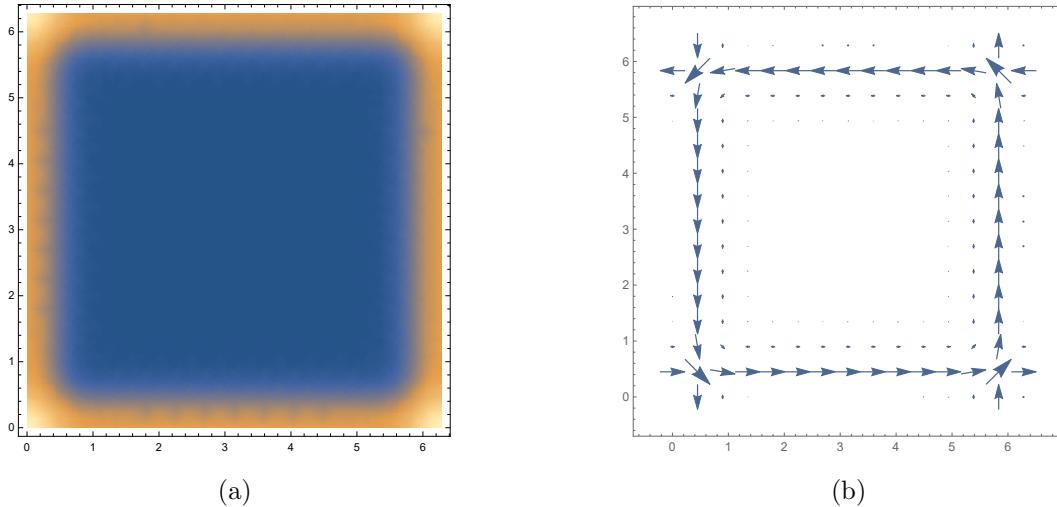


Figura 5.1: (a) Gráfico en el plano xy del campo magnético generado por la ecuación 5.10 con $p = 32$. El campo es nulo en una región (azul) donde luego pondremos la muestra superconductora, mediante una trampa acoplada a $\tilde{\psi}$. La longitud de penetración del campo en la caja de simulación está dada por el coeficiente p (b) Corriente externa generada, calculada según $\nabla \times \mathbf{h}_{ext}$ con $p = 32$

Reemplazando la ecuación 5.10 en 5.9, obtenemos

$$\int_M \mathbf{h}_{ext} \cdot d\mathbf{S} = \frac{4(-1)^p [1 + (-1)^p] \pi^{3/2} \Gamma \left(\frac{1+p}{2} \right)}{\Gamma \left(1 + \frac{p}{2} \right)}, \quad (5.11)$$

y para $p = 32$ se tiene que $\mathbf{h}_{ext} = 0,28h_0(-\hat{z})$ (con \hat{z} la dirección perpendicular al plano). Cuando entren vórtices en la región superconductora, lo harán con su campo magnético apuntando hacia adentro del plano del texto (ver Fig. 5.6, panel derecho). Realizamos simulaciones en el estado normal (que se obtiene cambiando el signo de α_{GL} en la energía libre)

y calculamos el campo que se induce, comprobando que se condice con lo calculado analíticamente. Notamos también que la conductividad del estado normal σ_1 sólo tiene influencia en el transitorio, es decir, en lo rápido que se forma el campo de equilibrio dentro de la muestra normal. En todos los casos, los campos aplicados estarán expresados en relación al campo crítico h_{c2} (ver Apéndice C, Ec. C.13).

Pasamos ahora a describir cómo confinamos la región superconductora dentro de la caja de la simulación. Utilizamos un método de trampas de potencial, adaptado de la dinámica de condensados de Bose-Einstein rotantes [84], e incluimos en la energía libre superconductora el término

$$F_{trap} = |\alpha_{GL}| \rho_0 \int_V V_0 g_{trap}(x, y) |\tilde{\psi}|^2 d^3r. \quad (5.12)$$

donde V_0 es la amplitud de la trampa y g_{trap} es una función que debe cumplir las condiciones periódicas de contorno. Esta expresión agrega un término al miembro derecho de la ecuación para el parámetro de orden superconductor (Ec. 3.34) de la forma $V_0 g_{trap} \tilde{\psi}$. En particular, la forma funcional que elegimos para la trampa es

$$g_{trap}(x, y) = 1 + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\cos x + \cos a}{b \sin a}\right) + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\cos y + \cos a}{b \sin a}\right), \quad (5.13)$$

donde a y b son parámetros reales que controlan el tamaño de la trampa y la convexidad de los bordes, respectivamente. Un gráfico representativo de la trampa utilizada se puede ver en la Fig. 5.2. Esta implementación nos permite simular una interfaz normal-superconductora, con un amplio control del tamaño y rigidez de los bordes. El efecto de esta trampa se puede entender si pensamos en el término proporcional a α_{GL} en la energía libre como

$$\alpha'_{GL} |\tilde{\psi}|^2 = -\alpha_0(T) |\tilde{\psi}|^2 + (\alpha_0(T) + \gamma) \theta(|x| - L) |\tilde{\psi}|^2, \quad (5.14)$$

donde $2L$ es la longitud de la muestra superconductora, γ es una constante positiva y $\theta(x)$ es la función escalón de Heavyside. Para valores de $x \in (-L, L)$, obtenemos que el

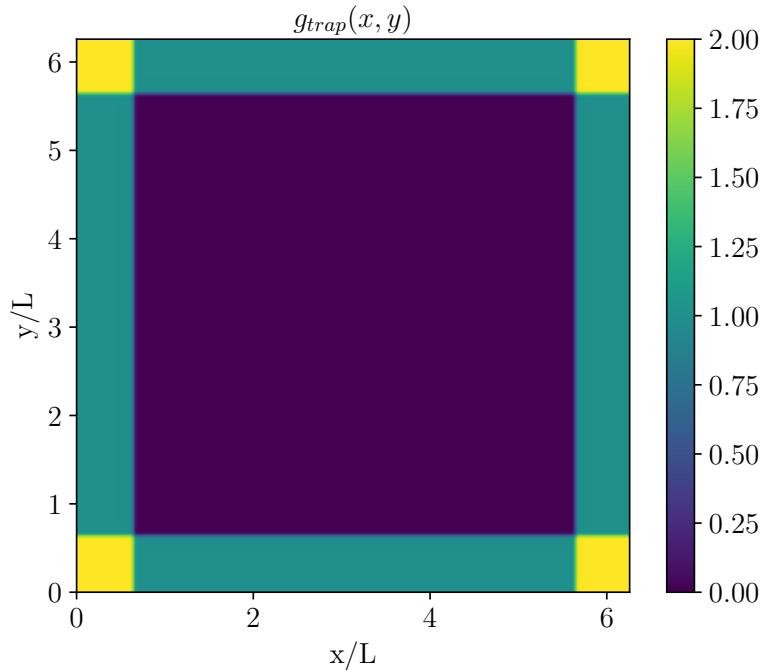


Figura 5.2: Gráfico en el plano de la función g_{trap} para el confinamiento del parámetro superconductor. En la región donde la trampa tiene un valor nulo se mantiene superconductor, mientras que el parámetro de orden se anula fuera de ella.

término que entra en la energía libre será $-\alpha_0(T)|\tilde{\psi}|^2$, que se corresponde con un estado superconductor (recordemos que $|\alpha_{GL}| = -\alpha_{GL}$ en el estado superconductor). Por otro lado, para $|x| > L$ se tiene $\gamma|\tilde{\psi}|^2$ que se corresponde con el estado normal.

La amplitud de la trampa debe ser tal que garantice una buena separación entre la fase normal y la superconductora. La cota mínima para que esto suceda proviene de pedir la negatividad del término lineal en $\tilde{\psi}$ en la ecuación de movimiento, obteniendo

$$V_0^{min} \geq \tilde{V}_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\max(g_{trap})\hbar}. \quad (5.15)$$

En particular, para todas las simulaciones presentadas en este capítulo tomamos $V_0 = 10\tilde{V}_0$

5.2. Estudio numérico de la red de Abrikosov

5.2.1. Resultados Previos

Es conocido que en ausencia de nematicidad y simetría cilíndrica de los vórtices la configuración estable de una muestra superconductora infinita sea la red de Abrikosov, una red triangular con período bien definido [16]. El período de la red se estima resolviendo las ecuaciones linealizadas de GL en el entorno del campo crítico $H \cong H_{c2}$ (asumiendo una muestra con simetría de traslación en \hat{z} , con el campo aplicado en esta misma dirección e infinita en las direcciones \hat{x} e \hat{y}). Se obtiene que cada vórtice centrado en la posición x_k tiene un parámetro de orden

$$\psi_k = e^{iky} e^{-\frac{(x-x_k)^2}{2\xi^2}}, \quad (5.16)$$

con

$$x_k = \frac{\phi_0 k}{2\pi H} \quad (5.17)$$

(ver Ec. 2.60 y la discusión alrededor). El estado general de muchos vórtices se obtiene como una combinación lineal de estas funciones centradas en distintas posiciones x_n dentro del superconductor

$$\psi = \sum_n C_n e^{ik_n y} e^{-\left(-\frac{(x-x_n)^2}{2\xi^2}\right)}. \quad (5.18)$$

Esta solución es periódica en y por construcción. También será periódica en x si $C_n = C_{n+\nu}$ para algún ν . Por ejemplo, si $C_n = C$ ($\nu = 1$) se obtiene una red cuadrada, mientras que si $\nu = 2$ y $C_1 = iC_0$ se obtiene una red triangular.

Si bien Abrikosov originalmente propone que la configuración que minimiza la energía es la red cuadrada de vórtices, se demostró poco después de su propuesta que la diferencia energética entre las configuraciones cuadrada y triangular es del 2% [83] y que es la red triangular la que minimiza la energía.

Es interesante que este resultado coincide con uno aproximado que se obtiene a partir de un argumento geométrico sencillo y utilizando las ecuaciones linealizadas de GL.

A partir del modelo linealizado de GL (en el entorno de H_{c2}), obtuvimos la ecuación 2.61. Esta ecuación es válida cuando $\psi \ll \psi_\infty$, como es en el caso del entorno de un vórtice [25].

Cualitativamente, es esperable que un arreglo cristalino de vórtices tenga menor energía que una configuración aleatoria de vórtices, por lo que vamos a pedir que la solución sea periódica. En ese caso, restringimos los valores de k en la Ec. 5.17 como

$$k = nq \quad (5.19)$$

donde n es un número entero. En ese caso, la periodicidad en el eje y es tal que

$$\Delta y = \frac{2\pi}{q} \quad (5.20)$$

y en la dirección x se tiene

$$\Delta x = \frac{nq\phi_0}{2\pi H} \quad (5.21)$$

Por lo tanto, se tiene que

$$\Delta x \Delta y = \frac{\phi_0}{H}. \quad (5.22)$$

En el caso en que $H < H_{c2}$ el resultado sigue siendo válido si cambiamos H por $\langle B \rangle$.

Veamos ahora que podemos mostrar, con un argumento muy sencillo y utilizando lo anterior, que la red triangular es efectivamente la que minimiza la energía. Recalcamos que este resultado es solo una aproximación y vale en el caso en que se haya linealizado las ecuaciones de GL y las redes sean perfectas.

Si consideramos una red cuadrada de vórtices, la periodicidad en el eje x es igual a la que tenemos en el eje y . Sea a_{sq} la distancia entre primeros vecinos en una red cuadrada

densamente empaquetada. Entonces, utilizando la Ec. 5.22

$$a_{sq}^2 = \frac{\phi_0}{B} \implies a_{sq} = \left(\frac{\phi_0}{\langle B \rangle} \right)^{1/2}. \quad (5.23)$$

Si en cambio consideramos una red triangular, y denotamos a_t el período en dirección x , podemos observar por geometría que la periodicidad en el eje y se escribe como

$$\Delta y = \frac{\sqrt{3}}{2} a_t. \quad (5.24)$$

Reemplazando en la Ec. 5.22 y simplificando, obtenemos

$$a_t = \left(\frac{4}{3} \right)^{1/4} \left(\frac{\phi_0}{\langle B \rangle} \right)^{1/2}. \quad (5.25)$$

Debido a la repulsión que existe entre vórtices, es esperable que la red más estable sea aquella que tiene mayor distancia entre vórtices, que es la triangular.

5.2.2. Estudio numérico de la red de Abrikosov

Para chequear el método numérico, realizamos simulaciones con el objetivo de replicar los resultados presentados anteriormente dentro de nuestro formalismo. Mostraremos primero que el campo aplicado en nuestro método produce la entrada de vórtices en el material, luego calcularemos la magnetización en la muestra tanto en función del tiempo como en función del campo externo aplicado, en este último caso siguiendo los resultados de la referencia [85], y por último estudiaremos la configuración de equilibrio con el objetivo de caracterizar su geometría, calculando los ángulos y distancias medias.

Entrada de Vórtices

Realizamos simulaciones partiendo de un estado superconductor homogéneo $\tilde{\psi}(t=0) = \tilde{\psi}_v$ en estado Meissner ($a_x = a_y = 0$), aplicamos un campo magnético externo de amplitud

$h_0 = 0,44h_{c2}$ y dejamos evolucionar el sistema. En la Fig. 5.3 se muestra la dinámica del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ en distintos tiempos, incrementando de izquierda a derecha. Notar que efectivamente la trampa reproduce la interfaz normal-superconductor, representado por la región negra en el segundo y tercer panel de la Fig. 5.3. La región roja representa la muestra superconductora donde entran los vórtices. El tamaño de esta región es ajustable con los parámetros a y b de la trampa (ver Ec. 5.13).

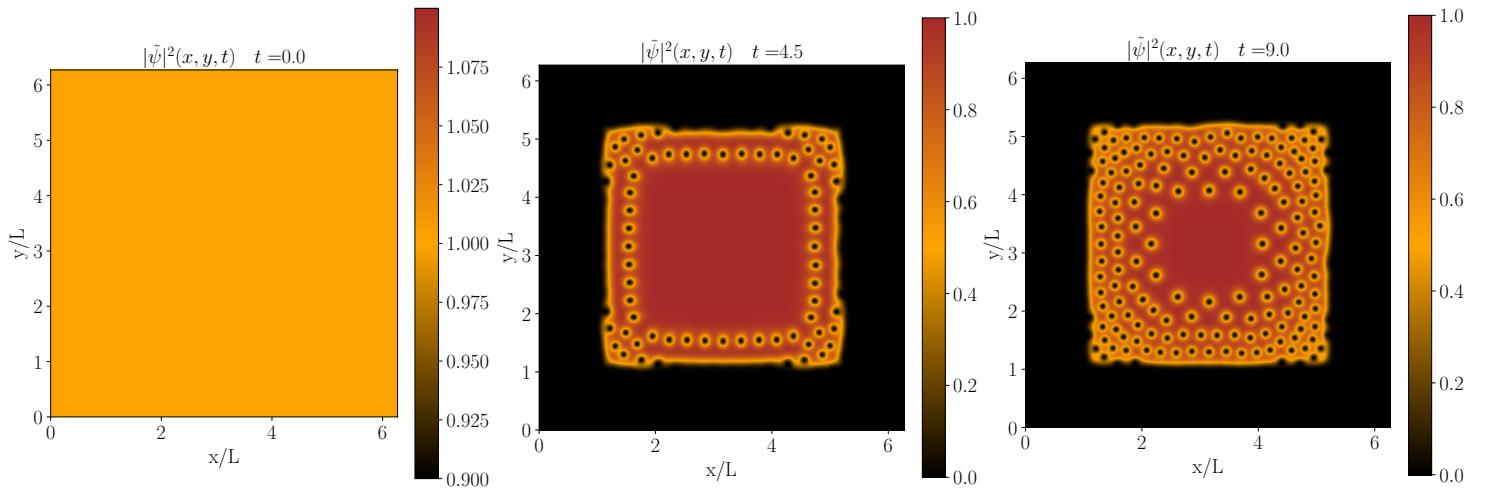


Figura 5.3: *Dinámica obtenida mediante simulaciones TDGL para un estado inicial superconductor homogéneo $\psi = \psi_\infty$ y en estado Meissner, con el tiempo aumentando de izquierda a derecha. El parámetro de GL es $\kappa = 5$, la longitud de coherencia es $\xi = 0,056$ y aplicamos un campo $h = 0,44h_{c2}$. La dinámica muestra que los vórtices entran por los bordes de la muestra.*

Los vórtices entran a la muestra por los bordes de la misma, donde el número total es desconocido a priori y está determinado por el campo externo aplicado. El proceso de entrada de los vórtices a la muestra se da en dos escalas temporales distintas: una primera escala temporal de entrada de vórtices (como podemos apreciar del último panel de la Fig. 5.3) y una segunda escala mucho más larga, que es el que tarda en llegar a la configuración final de equilibrio. Este estado se alcanza a partir del balance entre la fuerza de interacción repulsiva entre vórtices (dependiente del valor de κ) y por el espacio disponible en la

muestra para acomodar la totalidad de los vórtices.

Magnetización en función del tiempo y del campo externo

Para poder cuantificar las escalas temporales, un buen observable físico es la magnetización en la muestra, ya que la misma depende del número de vórtices dentro del material. En la Fig. 5.4 mostramos un cálculo de la magnetización de la muestra en función del tiempo. Este observable se obtiene tomando el valor medio del campo magnético inducido en la muestra \mathcal{M} para cada tiempo

$$\langle \mathbf{B} \rangle = \frac{1}{L^2} \int_{\mathcal{M}} (\nabla \times \mathbf{a}) dx dy \quad (5.26)$$

y luego calculando la magnetización en función del campo externo a partir de la expresión

$$\mathbf{B} = \mathbf{H}_{ext} + 4\pi \mathbf{M} \implies \mathbf{M}(\tau, \mathbf{H}_{ext}) = \frac{\mathbf{B}(\tau, \mathbf{H}_{ext}) - \mathbf{H}_{ext}}{4\pi}. \quad (5.27)$$

La dependencia en el tiempo viene de la variación de \mathbf{B} en la muestra al ingresar los vórtices. Un ejemplo de curva de magnetización en función del tiempo que podemos calcular se presenta en la Fig. 5.4. En una primera instancia, se observa un rápido crecimiento en la región $\tau \in [0, 12,5]$ hasta un $\cong 82\%$ de su valor final de $M_\infty \cong 2,26$. Esto define la primera escala temporal en la que se observa en la dinámica la entrada de vórtices por los bordes de la región superconductora. En una segunda instancia, en la región $\tau \in [12,5, 100]$ se produce el proceso de reacomodamiento que permite la entrada de algunos vórtices más. Este proceso se observa en la región $\tau \in [40, 90]$ donde se suceden crecimientos y amesetamientos de la magnetización, que se relacionan con la entrada y redistribución de los vórtices respectivamente. Cuando la configuración de vórtices llega al mínimo empaquetamiento posible en la muestra (no necesariamente cuando entran todos los vórtices posibles), la magnetización se estabiliza en un valor constante M_∞ y por lo tanto consideramos que se alcanzó la configuración de equilibrio.

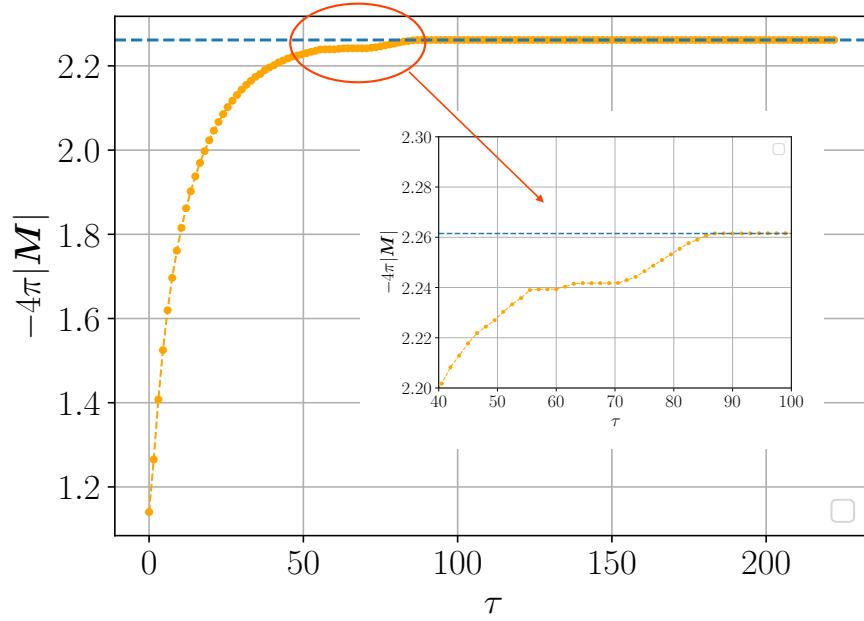


Figura 5.4: Magnetización en la muestra en función del tiempo para $h_0 = 0,57h_{c2}$ con $\sigma_1 = 15$. Alrededor de $\tau = 90$, observamos que se estaciona en un valor constante $M_\infty \cong 22,2$. En la región $\tau \in [40, 90]$ observamos una sucesión de crecimientos (relacionados con la entrada de vórtices al material) y amesetamientos (relacionados con el reacomodamiento de los vórtices en la región superconductora) de la magnetización hasta finalmente estabilizarse. En este ejemplo, consideramos que a partir de $\tau = 100$ esta simulación alcanzó el equilibrio.

Un dato notable es que el tiempo característico del proceso de entrada de vórtices, signado por el rápido aumento de la magnetización en el principio de la simulación, se reduce al aumentar el valor de κ y σ_1 . Aumentar κ implica el aumento de la fuerza de repulsión entre vórtices, por lo que la dinámica de movimiento de los vórtices dentro de la muestra es más rápida. Por otro lado, debido a que el campo interno llega más rápido al valor $0,28h_0$ en el interior de la muestra al aumentar σ_1 , los vórtices entran más rápido y con más momento a la muestra.

En la referencia [85] se realizan cálculos con TDGL utilizando un método de diferencias finitas y, entre otras cosas, calculan curvas de magnetización en función del campo aplicado en

muestras superconductoras de distintos tamaños y con interfases normal-superconductoras y superconductor-aislante. La geometría de las muestras estudiadas es comparable con la nuestra así como las consideraciones de simetría. En particular, comparamos nuestro cálculo de $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ para una muestra superconductora de tamaño $30\lambda_L \times 30\lambda_L$ y un parámetro de GL como $\kappa = 2$. Respecto de la longitud de coherencia, en [85] realizan simulaciones de TDGL a $T = 0,5T_c$ mientras que nuestro método asume $T = 0$. Un parámetro que podemos utilizar como referencia es longitud de coherencia cerca de T_c , que depende de la temperatura aproximadamente como [25]

$$\xi \propto (1 - T)^{-1/2}, \quad (5.28)$$

por lo que para $T = 0,5T_c$, encontramos que debemos elegir nuestra longitud de coherencia como $\xi = \sqrt{2} \times 0,04 = 0,056$

El resultado del cálculo de $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ se muestra en la Fig. 5.5. Cualitativamente, el resultado es consistente con lo observado en la referencia [85], para una muestra del mismo tamaño. Para tener una referencia con la que comparar, calculamos el campo h_{c1} para esta configuración. A partir de la definición del campo crítico $H_{c1} = \frac{4\pi\epsilon_1}{\phi_0}$ (Ec. 2.71) y de la relación 5.2, se puede calcular el campo crítico $h_{c1}/h_{c2} \cong 0,2$ para nuestro sistema (ver Apéndice C, Ec. C.11).

La curva de magnetización muestra una primera región consistente con el estado Meissner, donde la magnetización es lineal con el campo aplicado, hasta el valor $\frac{|\mathbf{h}_{ext}|}{h_{c2}} = 0,2 := \mathcal{H}_{c1}$ que identificamos como el campo crítico efectivo de entrada de primer vórtice, que coincide aproximadamente con nuestro cálculo. También se puede ver que la magnetización rápidamente decae a medida que entran vórtices en el material para campos externos $\frac{|\mathbf{h}_{ext}|}{h_{c2}} > \mathcal{H}_{c1}$.

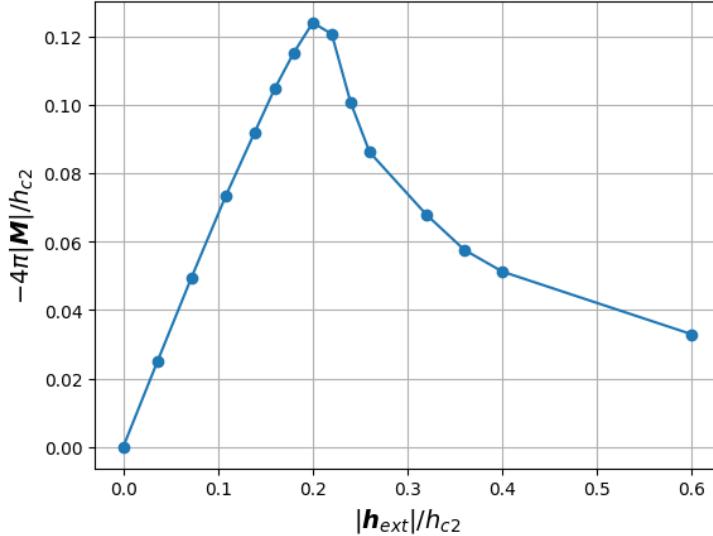


Figura 5.5: *Magnetización en una muestra superconductora con $\kappa = 2$ y $\xi = 0,056$ como función del campo externo, normalizado por el campo crítico h_{c2} . El máximo de esta curva se da para $h_{c1} \cong 0,2$, valor a partir del cual la magnetización decrece por el aumento de flujo de \mathbf{B} , que entra en cuántos de ϕ_0 .*

Configuración de equilibrio de vórtices

El estado de equilibrio obtenido se muestra en la Fig. 5.6, donde se grafica tanto $|\tilde{\psi}|^2$ como la inducción magnética $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{a}$ en el plano xy . Notamos que los vórtices apuntan sus campos magnéticos en dirección $-\hat{z}$ (es decir, hacia adentro del plano del papel) y las corrientes que circulan alrededor de ellos lo hacen en dirección horaria. Observando la configuración final, se pueden notar regiones en donde los vórtices se acomodan de forma triangular separadas por regiones de transición, donde se distorsiona la estructura. En las regiones triangulares cada vórtice tiene 6 vecinos, mientras que en las zonas de transición observamos que cada vórtice tiene 5 o 7 vecinos. En el lenguaje de defectos topológicos, cada sitio en donde localmente (en el entorno de un vórtice) se deforma la red constituye una *disclinación*, mientras que las *dislocaciones* se forman a partir de concatenar disclinaciones. En una red triangular, una dislocación siempre se forma a partir de un par de disclinaciones, con coordinaciones de 5 y 7 vecinos [86].

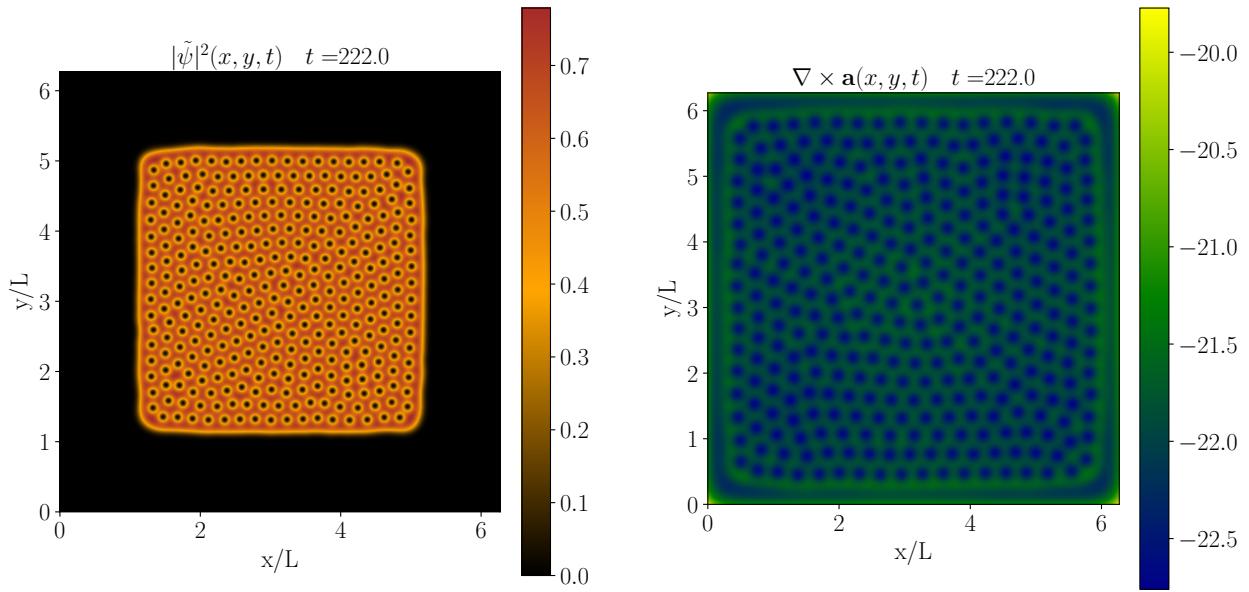


Figura 5.6: Gráficos de la densidad de portadores $|\tilde{\psi}|^2$ (izq.) y del campo magnético $\nabla \times \mathbf{a} = \mathbf{B}$ (der.) para $h_0 = 0,44h_{c2}$ y $\hat{\lambda}_1 = \hat{\lambda}_2 = 0$. La longitud de coherencia superconductora se fijó en $\xi = 0,056$ y el parámetro de GL en $\kappa = 5$.

Para entender mejor la geometría de la configuración, realizamos una triangulación de Delaunay sobre la misma, que se observa en la Fig. 5.7 junto con un histograma de primeros vecinos para cada vórtice. El histograma además nos permite contar fácilmente la cantidad de vórtices que entraron en la muestra, que en este caso son aproximadamente 250.

La triangulación de Delaunay se construye a partir de unir a cada vórtice con cada uno de sus vecinos y trazar segmentos entre ellos, cubriendo una región en el plano con triángulos. Para realizar el conteo, excluimos los vórtices que están lindantes a la interfaz normal-superconductor, que se muestran en color gris oscuro. En color azul se marcan los vórtices con 6 vecinos cada uno, que resultan mayoritarios en la red como se ve del histograma que acompaña a la triangulación. En amarillo y verde se graficaron los vórtices con 5 y 7 vecinos cada uno. Como es de esperar en una red triangular [86], las dislocaciones de la red aparecen como pares de disclinaciones.

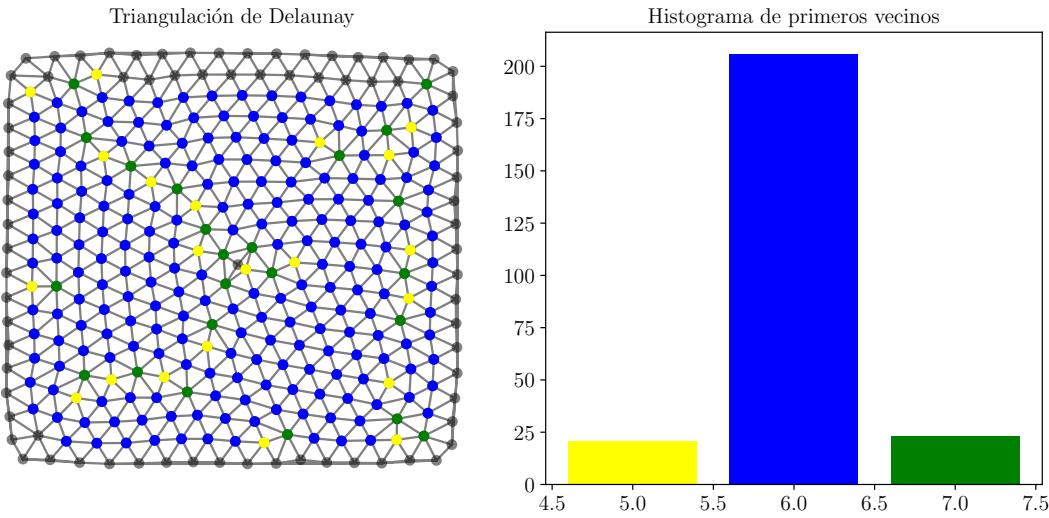


Figura 5.7: (izq.) *Triangulación de Delaunay obtenida a partir de la imagen de vórtices presentada en la Fig. 5.6.* En azul se ven los vórtices con 6 vecinos, en amarillo y verde los que tienen 5 y 7 vecinos respectivamente. Notamos que mayormente hay vórtices con 6 vecinos y que las disclinaciones se presentan en líneas, sucedidas una por la otra. (der.) *Histograma de la cantidad de vórtices con cada número de vecinos.*

Para determinar la regularidad de la red, calculamos los valores de los ángulos internos de los triángulos obtenidos con la triangulación de Delaunay y calculamos el valor medio de la distribución. Es esperable que mientras más triangular es la red, el valor medio del ángulo se encuentre distribuido alrededor de los 60° .

En la Fig. 5.8 presentamos un histograma con los ángulos internos de la red y uno de las distancias medias entre vórtices. Para tener en cuenta posibles sesgos en la distribución, realizamos un ajuste de sobre los histogramas utilizando la función gaussiana sesgada, definida como

$$f(x) = 2\phi(x)\Phi(\alpha x) \quad (5.29)$$

donde $\phi(x)$ es la distribución gaussiana usual y

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \phi(t)dt = \frac{1}{2} \left[1 + \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) \right] \quad (5.30)$$

con $\text{erf}(x)$ la función error. El parámetro α controla qué tan sesgada es la curva. Para $\alpha = 0$

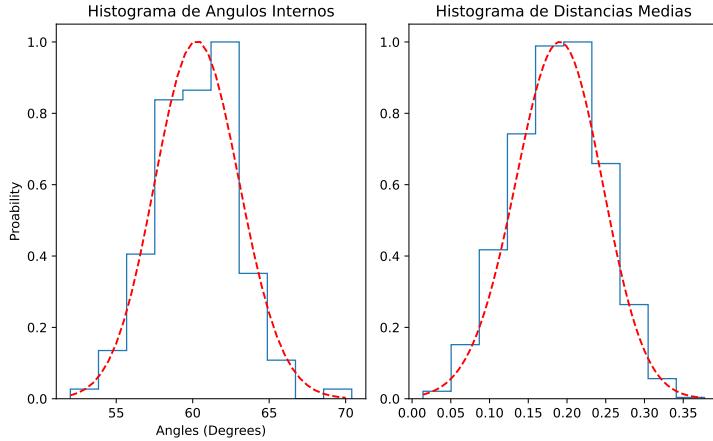


Figura 5.8: (izq.) Histograma del valor de los ángulos internos de la configuración de equilibrio junto con un ajuste según la función gaussiana sesgada (Eq. 5.29). (der.) Histograma de las distancias medias entre vecinos, normalizado igual que el histograma de ángulos. El valor medio de estos datos se obtiene a partir de un ajuste gaussiano.

se recupera la distribución gaussiana mientras que para $\alpha > 0 (\alpha < 0)$ se favorece un sesgo a izquierda (derecha).

En el caso de los ángulos internos, obtenemos que el valor medio es $\langle \alpha_{int} \rangle = 60,3^\circ \pm 2,7^\circ$ con $\alpha = 0,65$ mientras que para las distancias entre los vórtices obtenemos que $\langle d \rangle = 0,19 \pm 0,06 \cong 3,5\xi \pm \xi$ y $\alpha = -0,85$. Este resultado es consistente con mediciones experimentales a campo externo aplicado de $H = 0,05H_{c2}$ [87]. La aproximación de la ecuación 5.25 en términos de nuestros parámetros es $a_t = 0,23 \cong 4\xi$, una diferencia de aproximadamente 20 % con lo obtenido en las simulaciones.

5.3. Red de vórtices en presencia de nematicidad

En la sección anterior realizamos un estudio de la red de Abrikosov en el contexto de nuestro modelo TDGL. Los resultados obtenidos nos permitieron poner a punto tanto la trampa de potencial como la aplicación de campos externos para el estudio de redes. Es de

esperar que ante la introducción de una anisotropía en la red, a través de la deformación de los vórtices con nematicidad, de como resultado redes de vórtices con una simetría distinta a la triangular, como por ejemplo en el caso del FeSe, comprobado tanto experimental [87,88] como numéricamente [89] (utilizando un parámetro de orden superconductor multibanda).

En esta sección veremos cómo cambian los resultados obtenidos en la sección anterior al incluir nematicidad en el contexto de nuestro método espectral. Daremos valores no nulos al parámetro $\hat{\lambda}_1$, relacionado con el acople trilineal entre superconductividad, nematicidad y campo magnético y estudiaremos las configuraciones de vórtices resultantes. Como ya hemos descripto, este parámetro tiene el efecto de elongar los vórtices y cambiar su simetría de cilíndrica a elíptica, con la orientación determinada por el signo del acople. La deformación del vórtice implica que la interacción vórtice-vórtice cambiará, como hemos descripto en el capítulo 3, por lo que la configuración final de equilibrio no va ser triangular a priori debido a la anisotropía del vórtice.

Realizamos una simulación con un campo externo aplicado de amplitud $h_0 = 0,1h_{c2}$, un parámetro de GL de $\kappa = 10$, un acople con la nematicidad de $\hat{\lambda}_1 = 0,5$ y $\hat{\lambda}_2 = 0,3$. La amplitud de la trampa es la misma que para la red sin nematicidad. La longitud de coherencia superconductora se fijó en $\xi = 0,04$. El tamaño de la muestra también se mantuvo respecto de la sección anterior. El proceso transitorio de formación de la red muestra una dinámica similar al caso sin nematicidad, como se ve graficando el parámetro de orden $|\tilde{\psi}|^2$ para distintos tiempos (Fig. 5.9)

La curva de magnetización en función del tiempo calculada para la red con nematicidad se muestra en la Fig. 5.10. En este caso, no observamos mesetas en el proceso de crecimiento de la magnetización. La dinámica muestra que los vórtices entran prácticamente todos juntos y el proceso de acomodamiento solo permite la entrada de un vórtice, que no afecta

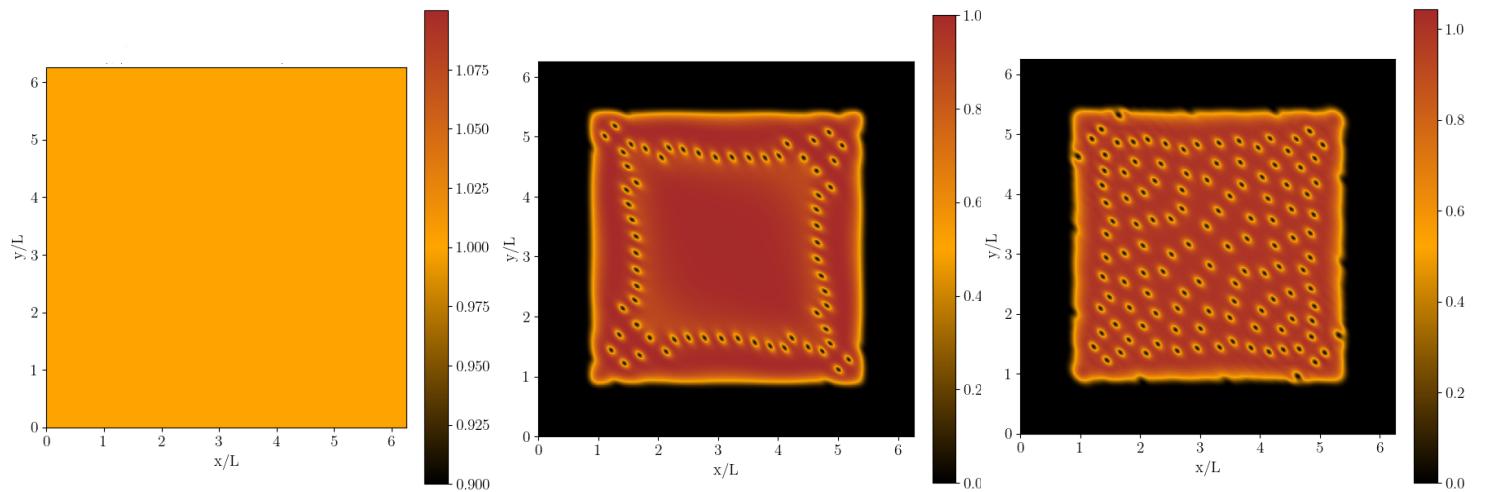


Figura 5.9: *Estado transitorio de entrada de vórtices nemáticos en la región superconductora para un campo aplicado de $0,1h_{c2}$, con el tiempo creciendo de izquierda a derecha.*

apreciablemente la magnetización.

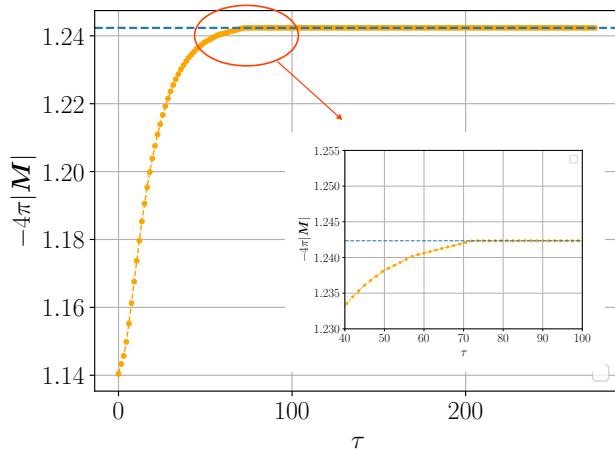


Figura 5.10: *Magnetización en función del tiempo para la red de vórtices con nematicidad. A diferencia del caso sin nematicidad, no vemos mesetas en el crecimiento de la magnetización hacia su valor de equilibrio $M_\infty \approx 1,24$.*

El estado de equilibrio al que llega el sistema se observa graficando nuevamente el parámetro de orden $|\tilde{\psi}|$ como se muestra en la Fig. 5.11. A simple vista se puede notar que

existen tres regiones bien marcadas: una región central orientada a aproximadamente 45° respecto de los ejes y dos dominios por encima y por debajo de ella, respectivamente.

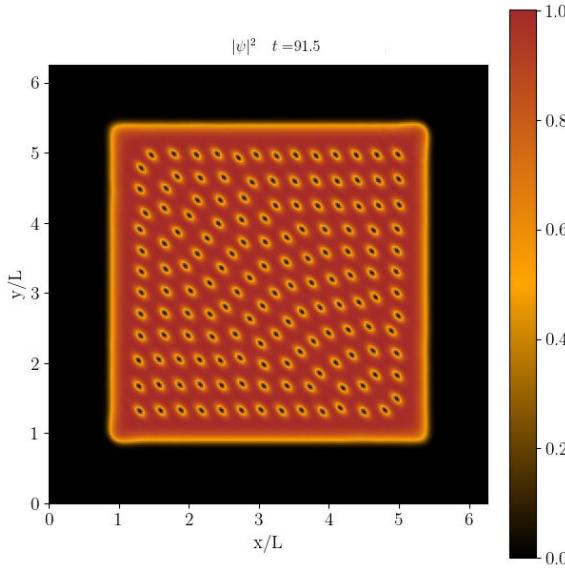


Figura 5.11: *Estado de equilibrio de la red de vórtices nemáticos, con $\hat{\lambda}_1 = 0,5$. Los vórtices se ven claramente elípticos y la red que se forma no tiene geometría triangular, como en el caso anterior, sino que se ve una geometría cuadrada.*

Los rectángulos en estas zonas presentan distintas orientaciones, relativas a los ejes x/L e y/L . En la región central se observan disclinaciones en las interfaces entre dominios.

Para cuantificar la geometría de la red de vórtices, nuevamente realizamos una triangulación de Delaunay y un cálculo de los ángulos internos y las distancias en la configuración final. En el caso de una red triangular perfecta, los triángulos que se forman por el teselado de Delaunay tienen todos sus ángulos internos exactamente iguales a 60° . Mientras menos triangular sea la red, más se desviará el valor medio de los ángulos de este valor. Por otro lado, una red rectangular se caracteriza por la presencia de triángulos rectángulos escalenos, que se tornan isósceles si la red es perfecta. Cada uno de los triángulos tiene dos ángulos internos de 45° y uno de 90° . En la Fig. 5.13 presentamos el histograma de ángulos

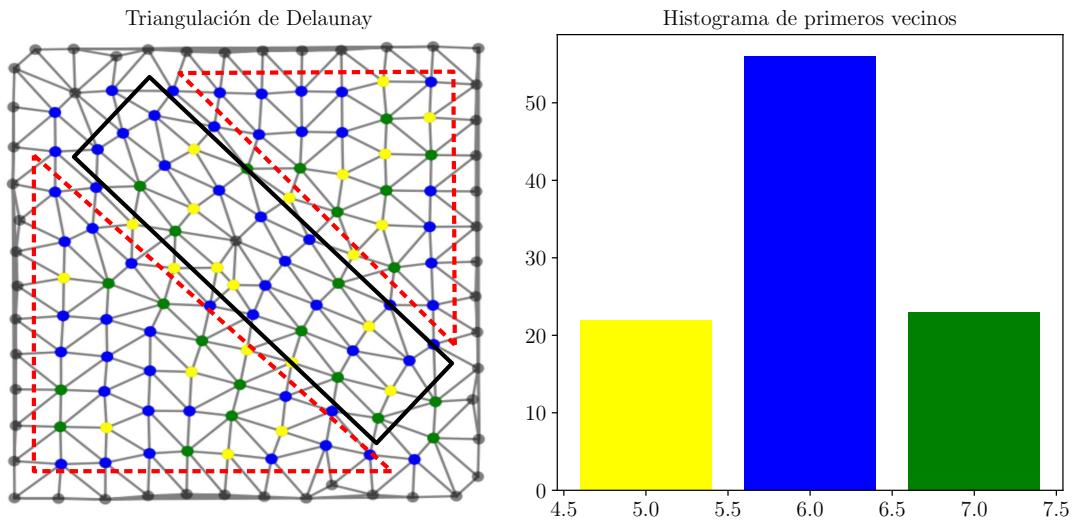


Figura 5.12: *Triangulación de Delaunay e histograma de primeros vecinos para la configuración de vórtices con nematicidad presentada en la Fig. 5.11. Se pueden observar tres regiones: una región central donde hay una estructura cuasi-rectangular muy desordenada, rodeada de dos regiones más ordenadas.*

internos y el de distancias medias.

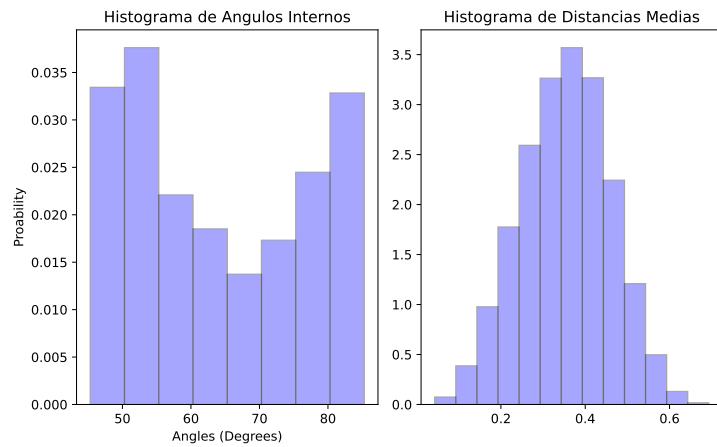


Figura 5.13: *Histograma de ángulos (izq.) y distancias (der.) en la red de vórtices con nematicidad. Notamos que en los ángulos se despuebla alrededor de 60° y aparecen más conteos en la zona entre $40^\circ - 50^\circ$ y entre $80^\circ - 85^\circ$. Esto se debe a que a medida que la red se hace más rectangular, los ángulos internos se aproximan a 45° y 90° .*

En el caso triangular que analizamos en la sección anterior, observamos una distribución de los mismos en torno a los 60° , consistente con una red triangular, y las dispersiones respecto de este valor las asociamos a las disclinaciones de la red. En el caso nemático aparecen como más probables los ángulos en torno a los 45° y los 90° , consistente con una transición a una red rectangular. Debido a la cantidad de disclinaciones de la red, hay una densidad alta de ángulos *de transición* entre los dos límites esperados.

5.4. Transiciones estructurales de la red con nematicidad ($\hat{\lambda}_1$) y campo magnético (h_0)

En las secciones precedentes mostramos que en ausencia de nematicidad la red de vórtices que se forma tiene carácter triangular, que se vuelve rectangular en el caso de agregar la nematicidad. Una pregunta interesante que surge es si existe una transición de la red con la elipticidad de los vórtices, un proxy directo de nematicidad. Por otro lado, la competencia entre la interacción repulsiva entre vórtices anisotrópicos, que la nematicidad favorece, y la fuerza de las corrientes en los bordes que empujan los vórtices hacia dentro del superconductor puede generar efectos interesantes en las estructuras obtenidas.

En la referencia [87] se realiza un estudio experimental y teórico de la red de vórtices en FeSe al variar el campo externo aplicado. A campos bajos, se observa que la red es hexagonal y difiere de la anisotropía del vórtice (que es elíptico, con $\hat{\lambda}_1 = 0,3$ estimado de la medición de STM y usando la Ec. 4.27). La estructura exhibe un *crossover* hacia una red cuadrada distorsionada a campos altos, mayores a $1,5T$. Se propone una explicación de estos resultados en términos de una teoría de GL, con un parámetro de orden superconductor multibanda (con simetría s y d) como es común en FeSe [90–92].

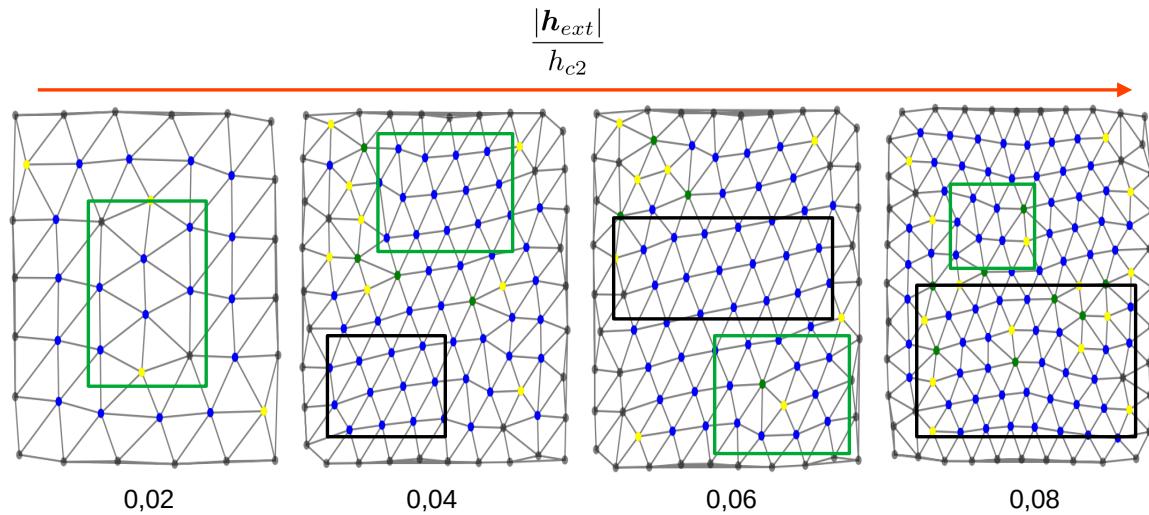


Figura 5.14: *Triangulaciones de Delaunay de redes de vórtices nemáticos con $\hat{\lambda}_1 = 0,3$ para distintos campos aplicados. Los valores aumentan de izquierda a derecha y se encuentran debajo de cada imagen. Los recuadros negros y verdes representan zonas con dominios rectangulares y triangulares, respectivamente. A medida que aumenta el campo, se establece un dominio rectangular más grande, mientras que en los dominios triangulares aparecen disclinaciones y distorsiones en los hexágonos.*

Si bien en nuestra teoría la simetría del parámetro de orden es tipo s , mostraremos que al acoplarlo con la nematicidad electrónica podemos capturar la física necesaria para reproducir los resultados experimentales.

En la Fig. 5.14 mostramos las triangulaciones de Delaunay para estas simulaciones. Notamos que a campos bajos se establece en la zona central, lejos de los bordes, una región donde la geometría de la configuración es triangular. A medida que aumenta el campo, la fuerza de las corrientes en los bordes de la interfaz normal-superconductora que empuja los vórtices hacia el superconductor aumenta, achicando las distancias entre ellos y por lo tanto aumentando interacción repulsiva entre ellos. La anisotropía en las interacciones vórtice-vórtice debido a que éstos son elípticos provoca la aparición de dominios rectangulares, que aumentan su tamaño conforme crece el campo externo. En los dominios triangulares, observamos disclinaciones que deforman la geometría. La fenomenología es consistente con

lo medido en [87], donde encuentran que la red a campos bajos es triangular y transciona a una red cuadrada con campo creciente.

Estudiamos ahora cómo la variación de la elipticidad de los vórtices cambia la geometría de la red de vórtices. Realizamos simulaciones a campo fijo $h_0 = 0,1h_{c2}$ y variando el parámetro $\hat{\lambda}_1$, con la longitud de coherencia fijada en $\xi = 0,04$ y $\kappa = 10$. Sabemos que para $\hat{\lambda}_1 = 0$, los vórtices tienen simetría cilíndrica y forman una red triangular (a menos de disclinaciones inducidas por efectos de tamaño finito) y vimos también que para $\hat{\lambda}_1 = 0,5$, la geometría de la red tiende a ser rectangular de a dominios. Veremos que a mayor elipticidad del vórtice, mayor es el carácter rectangular de la red. En particular, realizamos un barrido en $\hat{\lambda}_1$ desde 0,0 hasta 0,4 para entender como se produce la transición de la red triangular a la rectangular.

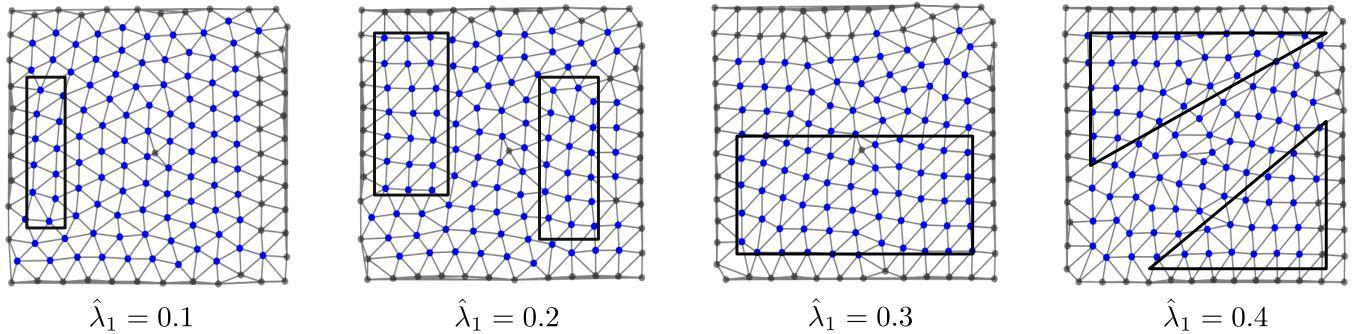


Figura 5.15: *Triangulaciones de Delaunay para una red de vórtices, en función del valor del acople trilineal $\hat{\lambda}_1$ (los valores se informan en cada triangulación). Hemos omitido los colores que identifican las disclinaciones para mayor claridad. Para $\hat{\lambda}_1 = 0,1$, notamos una geometría principalmente triangular, con hexágonos bien visibles y ángulos internos de casi 60° . A medida que aumenta el acople trilineal, se distorsiona la red y comienzan a aparecer zonas rectangulares y cuadradas. Es notable que además de observar una transición en la geometría de la red completa, también aumenta el desorden de la red.*

La triangulación de Delaunay para los distintos valores se muestra en la Fig. 5.15. Los rectángulos negros en la figura sirven como guía al ojo para destacar la geometría local de

la red en esa región. Para $\hat{\lambda}_1 = 0,1$ la geometría de la red de vórtices es principalmente triangular, con la aparición de regiones con geometría rectangular. Al aumentar el parámetro de acople, observamos que los dominios donde la geometría es rectangular aumentan en cantidad, con regiones de transición donde observamos disclinaciones de la red como entre medio de las regiones marcadas en el segundo panel de la figura 5.15. Para $\hat{\lambda}_1 = 0,3$ (el valor que se obtiene estimando las mediciones en FeSe de [87] usando la ecuación 4.27) notamos que los dominios rectangulares son más grandes y la región de transición también aumenta de tamaño. Las regiones donde la geometría es triangular son pocas y chicas. Para $\hat{\lambda}_1 = 0,4$ observamos la coexistencia de dominios triangulares con dominios rectangulares, signo de una transición de fase de la red. En el centro de la muestra destaca una región amplia de transición separando dominios de geometría rectangular. Esta línea media que separa los dominios rectangulares por encima y por debajo de ella es desordenada y coexisten tanto rectángulos como triángulos. Ya vimos que para $\hat{\lambda}_1 = 0,5$ se termina de conformar un dominio central de geometría rectangular, con rectángulos orientados a 45° respecto de los ejes de la caja de simulación (ver Fig. 5.11).

En resumen, podemos decir que la red de vórtices tiene una transición de triangular a rectangular con el aumento de la nematicidad, signado por la elipticidad de los vórtices. Además de la aparición explícita de dominios rectangulares y triangulares en coexistencia, cuantitativamente podemos ver cómo a medida que aumenta la nematicidad los ángulos internos de la red se deforman, de los 60° a 45° y 90° . Este resultado es consistente con lo reportado en [87].

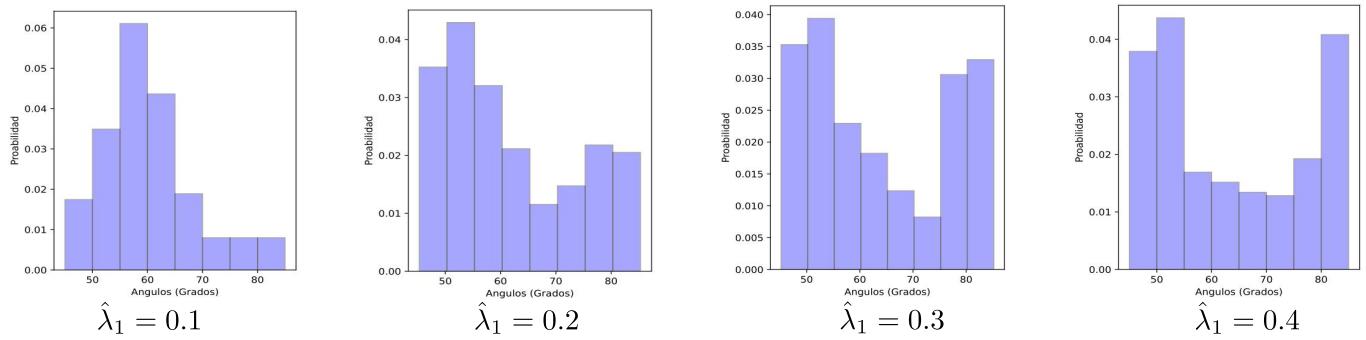


Figura 5.16: *Histograma de ángulos internos para las simulaciones presentadas en 5.15, donde se identifica el valor del acople $\hat{\lambda}_1$ debajo de cada histograma. Para $\hat{\lambda}_1 = 0.1$, notamos que la distribución de ángulos tiene un máximo en torno a los 60° , consistente con la geometría quasi-triangular observada en la triangulación de Delaunay. A medida que aumenta el valor del acople trilineal, se despuebla la zona de 60° y aumenta la población en ángulos en torno a los 45° y 90° , consistente con una transición hacia una red rectangular.*

5.5. Redes de vórtices y paredes de dominio

En varios FeSC se ha observado que las paredes de dominio nemáticas interactúan con los vórtices de diferente manera, según el compuesto. Por ejemplo, se ha evidenciado que en FeSe la interacción entre vórtice y pared es atractiva, funcionando las paredes como centros de anclaje vórtices [93–95]. Por otro lado, en compuestos de BaFeCoAs la interacción es repulsiva [79–81] y no hay anclaje de vórtices. Recientemente, se ha encontrado a través de mediciones experimentales y simulaciones numéricas que las posibles configuraciones de vórtices nemáticos en presencia de paredes de dominio dependen de la distancia entre las paredes [88].

En la interacción entre paredes de dominio y vórtices es fundamental el rol del acople biquadrático $\hat{\lambda}_2$, ya que su signo determinará si la interacción es atractiva ($\hat{\lambda}_2 < 0$) o repulsiva ($\hat{\lambda}_2 > 0$). En el caso atractivo, la competencia entre la repulsión de los vórtices, tanto los que estén anclados en la pared como aquellos en su entorno, y la atracción de las paredes tendrá efectos no triviales sobre las configuraciones de equilibrio que obtengamos.

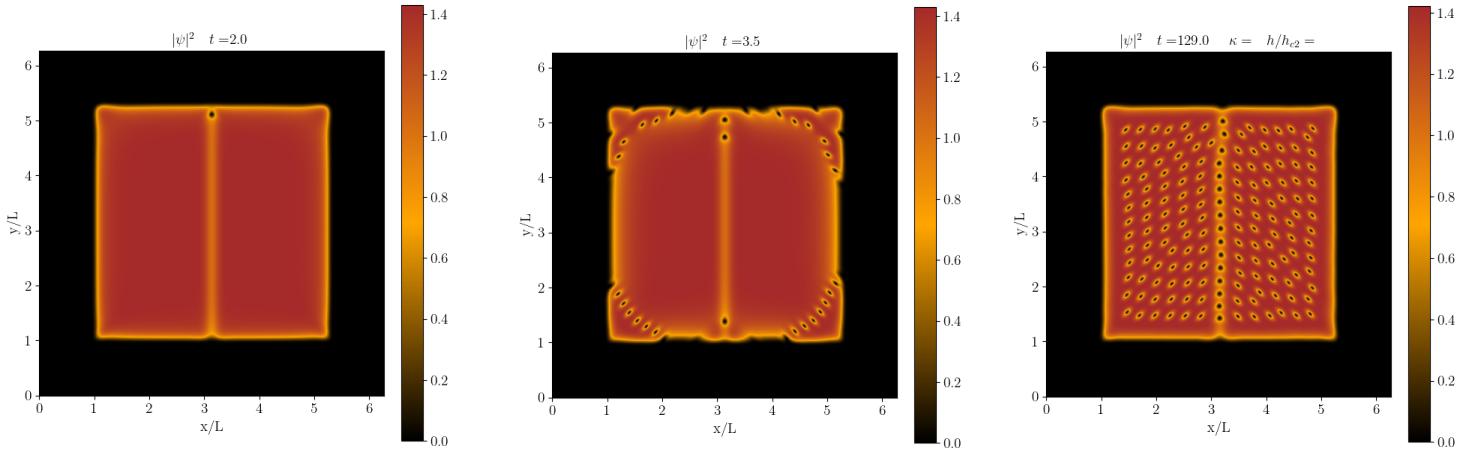


Figura 5.17: (a) A diferencia de los casos anteriores, los vórtices ingresan antes por las paredes de dominio. En este caso, un vórtice ya entró por la parte inferior y hay otro entrando en la parte superior. Por los bordes de la interfaz no entran vórtices todavía. (b) Entran los vórtices de forma simétrica por las interfaz. (c) Configuración de equilibrio obtenida al estabilizarse la magnetización en la muestra. La red por fuera de la pared de dominio muestra una geometría rectangular, debido a la elipticidad de los vórtices.

Realizamos simulaciones partiendo de un estado superconductor $|\tilde{\psi}|^2 = \tilde{\psi}_v$ y en estado Meissner. En esta tesis solo exploraremos el caso de interacción atractiva ya que el parámetro de acople será en todos los casos $\hat{\lambda}_2 = -0,5$. Fijamos el parámetro trilineal en $\hat{\lambda}_1 = 0,5$.

El caso más sencillo para comenzar a estudiar es el de una única pared de dominio nemática, centrada en $x = \pi/2$. La longitud de coherencia nemática, relacionada directamente con el ancho de la pared de dominio, se estableció en $l_\eta = 2\xi$ de forma tal que el vórtice cupiera dentro de la pared y no hubiera efectos de repulsión por la anisotropía del vórtice anclado. La dinámica temporal de los primeros pasos junto con el estado final de equilibrio se observa en la Fig. 5.17.

La simulación muestra que los vórtices entran dentro de la muestra superconductora por la pared de dominio, a diferencia de los casos anteriores donde entraban por los bordes de la región superconductora. Como la superconductividad en esa zona se encuentra deprimida

y los vórtices tienen un centro normal, es energéticamente más favorable entrar por esa zona. Este fenómeno es conocido en el contexto de la dinámica de vórtices en presencia de maclas estructurales, donde se observan casos de depresión de la superconductividad en ellas [96]. Al avanzar el tiempo, se observa que también entran vórtices por los bordes de la región superconductora, como en los casos anteriores.

Debido a la dinámica del parámetro nemático y a las interacciones entre los distintos objetos, observamos que la pared de dominio se dobla ante el anclado de los vórtices. Este efecto ya había sido observado en la interacción pared-vórtice en el capítulo anterior.

En cuanto a la estructura formada, notamos que los vórtices se trasladan en dirección \hat{y} (es decir, paralelos a la pared) cuando están anclados en la misma. Los efectos de repulsión entre vórtices ($\kappa > 1/\sqrt{2}$) provocan que algunos de los vórtices anclados sean expelidos de la pared y pasen a formar parte de la red que se forma por fuera de la macla (ver Fig. 5.18). Este fenómeno se da principalmente en los bordes de la caja y por donde entran los vórtices. En la zona media de la pared se conjuga sobre los vórtices anclados allí por un lado la repulsión de los vórtices a ambos lados (que tienden a equilibrarse) y la atracción del propio vórtice a la pared de dominio. Esto hace que esa región sea una donde la pared se dobla poco y los vórtices no son expelidos de allí.

Por último, analizamos la estructura formada haciendo una triangulación de Delaunay, que se observa en la Fig. 5.19. Sobre la pared observamos una cadena unidimensional de vórtices mientras que por fuera de la misma se observa la formación de estructuras cuadradas o rectangulares. Las distancias medias entre vórtices anclados son menores que las distancias entre los vórtices anclados y los demás vórtices y que entre los vórtices fuera de la macla. No presenta otros aspectos notables respecto de los ya mencionados.

Para terminar con esta sección, analizamos lo que sucede al incluir dos paredes de

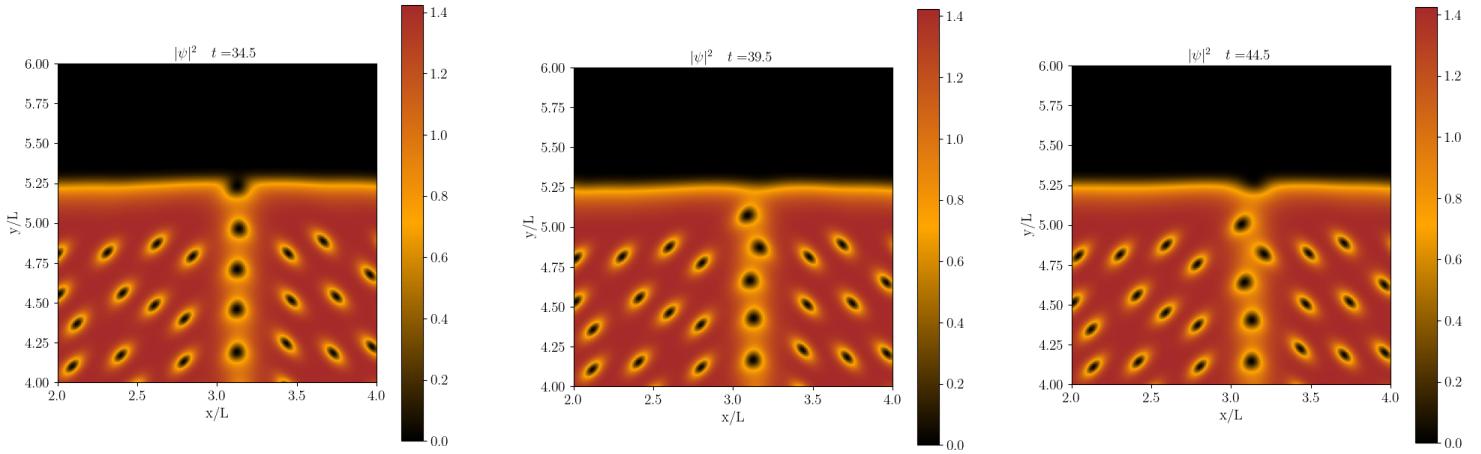


Figura 5.18: Gráficos de la densidad $|\tilde{\psi}|^2$, con el tiempo aumentando de izquierda a derecha, en presencia de una pared de dominio nemática ($\hat{\lambda}_2 = -0,5$, $l_\eta = 2\xi$) y con un campo externo $h_0 = 0,12h_{c2}$. En las imágenes se muestra cómo un vórtice es expelido de la pared debido a la fuerza que le ejerce otro vórtice ingresando por la pared.

dominio nemáticas en la muestra, en el caso en que la interacción pared-vórtice es atractiva (en particular, $\hat{\lambda}_2 = -0,5$). El balance de fuerzas de interacción entre vórtices y paredes de dominio va a quedar determinada por la distancia interpared, que variará la amplitud de las fuerzas involucradas. Recordemos que la fuerza de interacción vórtice-pared es máxima en el entorno de la pared.

Comenzamos mostrando los resultados para una dinámica completa TDGL en la Fig. 5.20, con dos paredes separadas $\cong 17\xi$ (con $\xi = 0,06$) y parámetros de acople $\hat{\lambda}_1 = 0,5$, $\hat{\lambda}_2 = -0,5$. El parámetro de GL se fijó en $\kappa = 5$. La dinámica del parámetro de orden nemático provoca que la pared se doble al anclar nuevos vórtices o cuando los vórtices son expelidos de la misma por efecto de otros vórtices entrantes, como observamos en el caso de una única pared. Debido a las cargas topológicas opuestas de las paredes, este proceso de doblado se ve favorecido también debido a una interacción atractiva entre las propias paredes. Este fenómeno lleva a que eventualmente las paredes se aniquilen mutuamente y

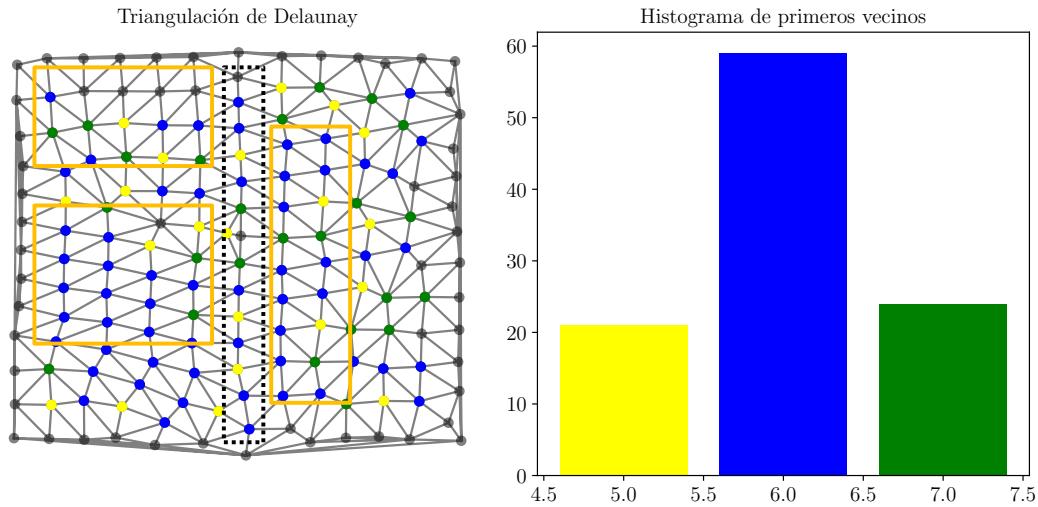


Figura 5.19: (izq.) *Triangulación de Delaunay de la red obtenida con una única pared de dominio, que se encuentra señalada con línea punteada negra. Sobre la pared, se observa una cadena unidimensional de vórtices alineados, mientras que por fuera de la misma encontramos zonas con una geometría rectangular (señaladas con rectángulos amarillos). La orientación de las zonas rectangulares (respecto de los ejes de la muestra) varía en el espacio.* (der.) *Histograma de primeros vecinos*

el estado de equilibrio que se obtiene es el de una red rectangular (sin paredes de dominio), como ya obtuvimos anteriormente. Es por esto que necesitamos aislar este efecto de los demás efectos relevantes en el sistema a fin de facilitar el análisis de los resultados.

Como hemos discutido en la introducción del Capítulo 4, es común encontrar en la literatura que los grados de libertad elásticos de la estructura cristalina se acoplan fuertemente a los grados de libertad electrónicos. Como las maclas estructurales son rígidas y si consideramos que la nematicidad se acopla a ellas, entonces las paredes de dominio nemáticas deben tener la misma rigidez. Es por eso que para reproducir este efecto realizamos simulaciones sin dinámica del parámetro de orden nemático ($\partial_t \tilde{\eta} = 0$). De esta manera, podemos variar las distancias entre paredes y analizar distintas configuraciones de equilibrio sin que

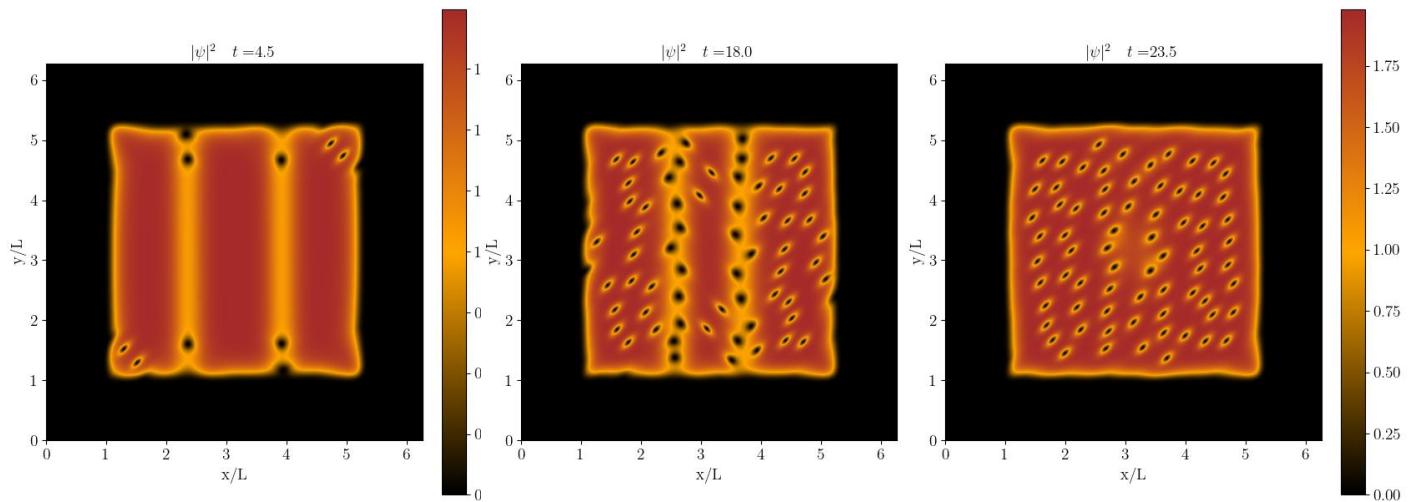


Figura 5.20: *Simulación con dos paredes de dominio separadas entre ellas aproximadamente 17ξ (con $\xi = 0,06$) con dinámica completa de todas las variables dinámicas. Debido al proceso de doblado de la pared al anclarse (o expulsarse) un vórtice, junto con el proceso de atracción entre pared-antipared, terminan en la aniquilación mutua de las paredes y la obtención de una red rectangular, como se vio anteriormente.*

las paredes se aniquilen entre ellas.

En la referencia [88] se observan distintas configuraciones de las redes de vórtices en FeSe en presencia de sucesivas paredes de dominio nemáticas, con la distancia interpared como parámetro relevante que las distingue. Mostraremos que nuestro modelo captura la fenomenología allí expuesta y la física relevante en el proceso. En particular, tomamos dos distancias características entre paredes donde observamos diferencias cualitativas relevantes: 25ξ y $\cong 35\xi$.

Comenzamos con el análisis del primer caso, resultados que se observan en la Fig. 5.21. Notamos que entre las paredes de dominio, el arreglo es distinto del que se observa por fuera de las mismas. En el intersticio entre paredes observamos que se forma una cadena unidimensional de vórtices. Por fuera, observamos nuevamente un arreglo rectangular. Al

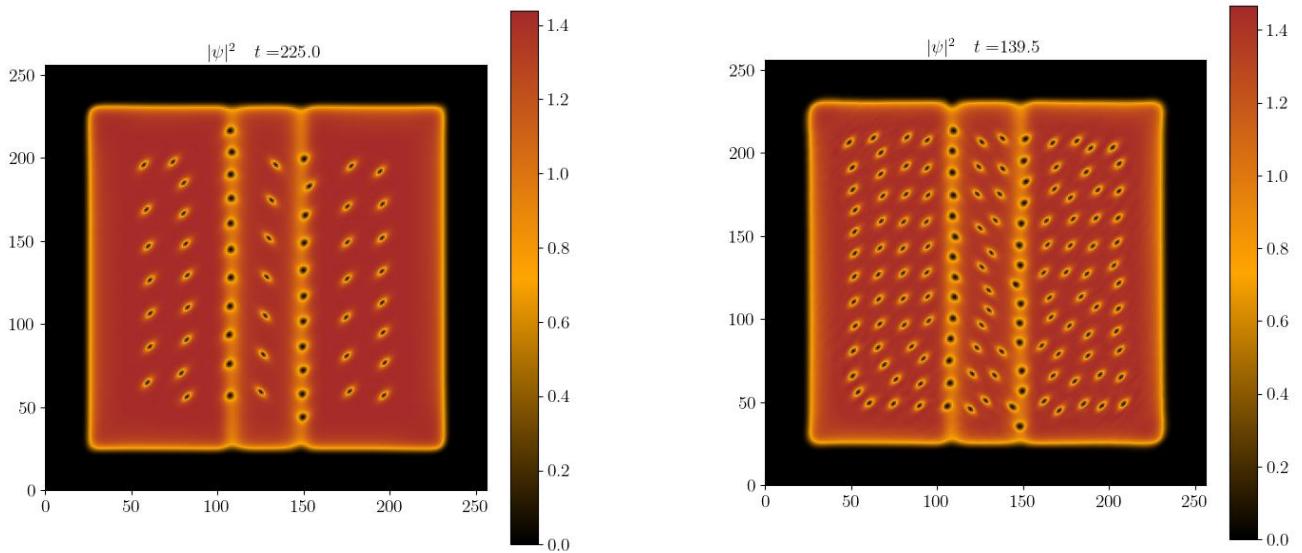


Figura 5.21: *Densidad del parámetro de orden superconductor en el plano para dos valores de campo (izq.) $h_0 = 0,01h_{c2}$ y (der.) $h_0 = 0,02h_{c2}$. Notamos que para un campo bajo aparece un arreglo unidimensional de vórtices, que se rompe rápidamente al aumentar el campo debido a los vórtices que pueblan completamente la pared de dominio y se puebla la región intermedia. Entre las paredes, el arreglo es proto-rectangular.*

aumentar el campo magnético, dejando fijos los demás parámetros, observamos que los vórtices no se arreglan en forma de línea sino que se intercalan unos a otros, como se ve en el panel derecho de la Fig. 5.21.

Seguimos con el caso en que la distancia entre paredes es de 35ξ , resultados que mostramos en la Fig. 5.22. Ahora, debido a la mayor extensión del intersticio entre paredes, los vórtices se acomodan directamente en un arreglo bidimensional entre las paredes, tal como lo hacen por fuera de las mismas. Aumentando el campo magnético externo solo observamos un mayor número de vórtices en la muestra pero no cambia la estructura de la red de vórtices.

Estos resultados fueron comparados con los obtenidos en la referencia [88], mostrando un gran acuerdo cualitativo entre nuestras simulaciones y los resultados experimentales

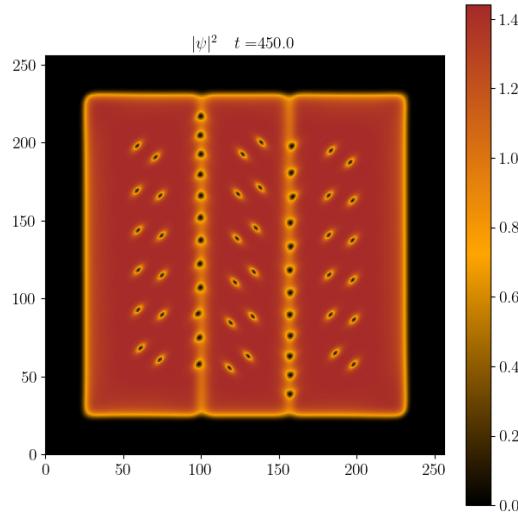


Figura 5.22: *Densidad del parámetro de orden superconductor $|\tilde{\psi}|^2$ en el caso de dos paredes de dominio separadas 35ξ . Notamos que incluso a campos bajos aparece una configuración bidimensional de vórtices, intercalados entre ellos. Las estructuras fuera de las paredes y entre ellas muestran una gran similitud.*

allí presentados. Una figura comparativa entre nuestros resultados y las mediciones y simulaciones presentadas en [88] se muestran en la Fig. 5.23. El modelo completo de GL permite explicar las distintas geometrías observadas como función del confinamiento de los vórtices entre paredes de dominio nemáticas.

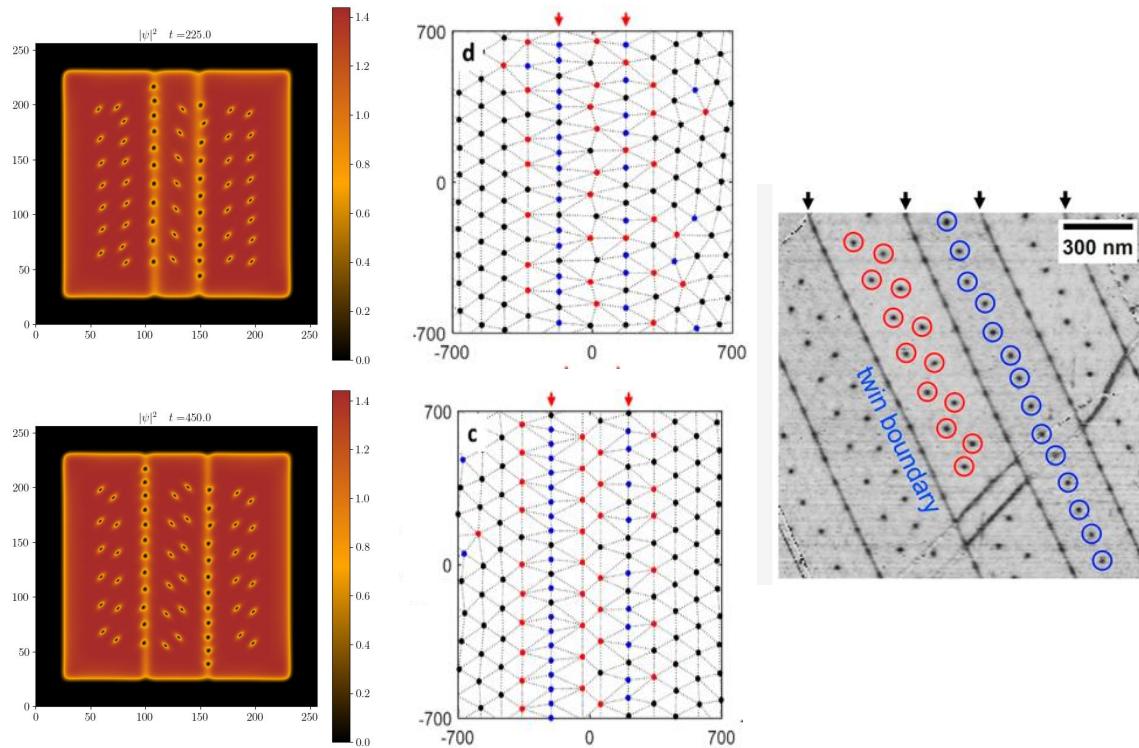


Figura 5.23: Comparación de nuestras simulaciones con los experimentos y simulaciones tipo dinámica molecular, realizadas por Song et al. [88] en FeSe. La cadena unidimensional de vórtices se forma para una distancia entre paredes de 338 nm mientras que la configuración bidimensional se forma para 413 nm. A la derecha, una medición por STM de una muestra de FeSe, donde se observan las maclas y las distintas configuraciones de vórtices entre ellas.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectiva futura

En esta tesis hemos realizado un estudio de aspectos básicos de la interacción entre nematicidad y superconductividad, en fase superconductora. Por un lado, propusimos una teoría fenomenológica como marco teórico: apoyándonos en un modelo tipo Ginzburg-Landau, asociamos las variables dinámicas del problema con parámetros de orden (complejo para la superconductividad y real tipo Ising para la nematicidad) acoplados entre ellos, de dos formas distintas. Por un lado, un acople biquadrático (no necesariamente nemático) entre nematicidad y superconductividad y por otro lado un acople trilineal, con superconductividad y campo magnético, explícitamente nemático, que favorece un eje cristalino por sobre el otro.

La teoría de campos nos da el marco teórico desde el cual deducir ecuaciones para estos parámetros que serán parte de un modelo dinámico puramente disipativo. Las ecuaciones obtenidas fueron resueltas utilizando un esquema numérico de vanguardia para la temática: un método pseudoespectral, adaptado de la dinámica de fluidos cuánticos, que brinda precisión y velocidad de forma conjunta. Este esquema nos permitió realizar simulaciones complejas en tiempos cortos, incluso para resoluciones espaciales altas. La flexibilidad del programa nos permitió realizar estudios cualitativos y cuantitativos para explorar la inter-

acción entre nematicidad y superconductividad en distintas facetas.

La interacción atractiva o repulsiva entre vórtices es lo que separa la superconductividad de tipo I y tipo II, atractiva en el primer caso y repulsiva en el segundo. En el capítulo 3 de esta tesis mostramos que la presencia de la nematicidad electrónica afecta la interacción vórtice-vórtice de dos formas distintas. El acople biquadrático entre nematicidad y superconductividad induce una interacción atractiva y tiene un efecto de competición/cooperación con la superconductividad según el signo del parámetro de acople (positivo/negativo, respectivamente). El acople trilineal tiene dos efectos distintos: por un lado, cambia la geometría de los vórtices de cilíndrica a elíptica (favoreciendo uno u otro eje cristalino, según el signo del acople) y por el otro induce una interacción repulsiva entre vórtices, efecto que se refleja en la disminución del valor crítico del parámetro de GL κ_c .

En el capítulo 4 de esta tesis abordamos la interacción entre paredes de dominio nemáticas y vórtices. Según el signo del acople biquadrático, asociado a la competencia/cooperación entre nematicidad y superconductividad, las paredes de dominio actúan como centros de anclaje ($\hat{\lambda}_2 < 0$) o como repulsores ($\hat{\lambda}_2 > 0$) [18]. Un aspecto interesante de este estudio es que las trayectorias de los vórtices que interactúan con la pared, ya sea de forma atractiva o repulsiva, desvían sus trayectorias (que uno esperaría sean perpendiculares a la pared) debido al acople trilineal, es decir, debido a la geometría elíptica del vórtice. A pesar de la simpleza del modelo, hemos encontrado que describe correctamente el comportamiento cualitativo observado experimentalmente, como muestra el vórtice tipo corazón observado en films cristalinos de FeSe (fig. 4.7) [18, 77].

Los instrumentos numéricos desarrollados en esta tesis nos permitieron culminar en el capítulo 5 con la caracterización de redes de vórtices en presencia de nematicidad. En primer lugar, fuimos capaces de modificar el esquema numérico para confinar una muestra

superconductora a una región del espacio, con una interfaz normal-superconductora. Esto fue logrado a partir de la inclusión de trampas de potencial, con un alto grado de maleabilidad en su forma y tamaño. Utilizamos el campo externo para generar una corriente en el borde normal de la muestra que estableciera un campo uniforme en la muestra superconductora. De esta forma, pudimos lograr la penetración de vórtices en el material y caracterizar las estructuras resultantes.

En nuestras simulaciones, mostramos que en la red de vórtices formada hay coexistencia de dominios con geometría triangular y con geometría rectangular. Esto fue estudiado a partir de triangulación de Delaunay y un análisis de los ángulos internos del patrón formado. Una determinación más precisa del verdadero carácter de la transición requiere un análisis más detallado de efectos de tamaño finito y posibles geometrías.

Además, mostramos que la inclusión de paredes de dominio en este contexto tiene dos efectos interesantes. Por un lado, cuando la interacción entre nematicidad y superconductividad es cooperativa, la entrada de los vórtices es más fácil por las paredes de dominio, ya que la superconductividad ya se encuentra deprimida en ellas. Esto crea un canal para que los vórtices entren en la muestra, ya que energéticamente es conveniente.

Por otro lado, la distancia entre las paredes de dominio cambia la geometría de la red de vórtices que se forma entre ellas. Podemos encontrar cadenas unidimensionales o configuraciones bidimensionales en función de la distancia entre paredes. Estos resultados fueron comparados con resultados experimentales y simulaciones realizadas con otras técnicas [88], mostrando un gran acuerdo cualitativo con lo observado.

El trabajo que se realizó en esta tesis, tanto desde lo técnico como desde lo teórico, deja las puertas abiertas al estudio de una multiplicidad de problemas. En el desarrollo de este trabajo se puso a punto un método altamente eficiente, escalable y muy maleable para

el estudio de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. En particular, en el contexto de la superconductividad, permite el acceso a soluciones completas de las ecuaciones de movimiento, sin necesidad de recurrir a aproximaciones o *ansatz* para las soluciones.

La inclusión directa de la temperatura como parte de la dinámica de los parámetros de orden es un aspecto a estudiar en el futuro. Esto nos permitirá estudiar procesos fuera del equilibrio y parámetros físicos altamente dependientes de la temperatura y fundamentales en la caracterización de la superconductividad. Para mencionar algunos ejemplos, nos referimos al estudio de los campos críticos en función de temperatura, nematicidad y tamaños de muestras.

En cuanto a las redes de vórtices, hemos logrado sentar las bases para realizar un estudio sistemático del problema. Si bien hemos avanzado en la descripción de resultados conocidos y constatados experimentalmente, quedan hacia adelante interrogantes interesantes. Por ejemplo, es sabido que los grados elásticos de la red juegan un papel fundamental en la descripción de las maclas en FeSC. No es entendido al día de hoy cuál es su relación con la nematicidad, por lo que agregar un parámetro de orden escalar que mida la tensión en la red y que se acople a la superconductividad y nematicidad será de sumo interés. Otro aspecto interesante a explorar es variar los tamaños de muestras superconductoras estudiadas, lo que requiere mayores dominios numéricos y por lo tanto mayor poder de computo. Este estudio será interesante si además relajamos la condición de simetría de traslación en \hat{z} , permitiendo que los vórtices se deformen también elásticamente.

Un aspecto que se desprende directamente de la inclusión del campo externo en la energía libre y en el esquema numérico, y que ya se encuentra en desarrollo, es el estudio de las propiedades de transporte en fase superconductora y en presencia de nematicidad. Siguiendo una línea similar a la de esta tesis, hemos realizado estudios básicos de movimiento de

vórtices bajo la acción de corrientes de transporte, encontrando que al vórtice le es más difícil moverse en la dirección del eje corto. También, podemos estimar el coeficiente de viscosidad en un modelo tipo Bardeen-Stephen. Estos resultados forman parte de un nuevo trabajo en preparación [97]

En cuanto al estudio de redes de vórtices, las corrientes de transporte y las trampas de potencial permiten estudiar parámetros de interés experimental como corrientes críticas de desanclaje de vórtices y como éstas se ven modificadas por la presencia de la nematicidad en sus distintas facetas.

Apéndice A

Ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo

La energía libre de Helmholtz para un superconductor es

$$F_S = \int_V \left[\frac{\beta_{GL}}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m} |\mathcal{D}\psi|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{8\pi} \right] \quad (\text{A.1})$$

Usando que $\mathcal{D} = -i\nabla - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}$ Desarrollando el término de la derivada covariante en la energía:

$$F_S = \int dV \alpha_{GL} |\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + \frac{ie\hbar}{2mc} \mathbf{A}(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) \quad (\text{A.2})$$

$$+ \frac{e^2}{2mc^2} |\psi|^2 |\mathbf{A}|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} \quad (\text{A.3})$$

Las ecuaciones de Euler-Lagrange para el parámetro de orden superconductor y el potencial vector se obtienen a partir de

$$\frac{\delta F_S}{\delta \psi^*} = \frac{\partial F_S}{\partial \psi^*} - \nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial F_S}{\partial \mathbf{A}} - \nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial (\nabla \mathbf{A})} \right) \quad (\text{A.5})$$

El primer término del lado derecho de la ecuación A.4 es

$$\frac{\partial F_S}{\partial \psi^*} = \alpha_{GL}\psi + \beta_{GL}\psi|\psi|^2 + \frac{ie\hbar}{2mc}\mathbf{A} \cdot \nabla \psi \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial F_S}{\partial \mathbf{A}} = \frac{ie\hbar}{2mc}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{e^2}{mc^2}|\psi|^2\mathbf{A} \quad (\text{A.7})$$

Sin embargo, el segundo término es algo más complicado. Una forma sencilla de atacarlo es pensar en notación indicial:

$$\nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial(\nabla \mathbf{A})} \right) = \partial_q \left(\frac{\partial F_S}{\partial(\partial_q A_r)} \right) \quad (\text{A.8})$$

y escribir al término cuadrático en el rotor de \mathbf{A} de la misma manera:

$$(\nabla \times \mathbf{A})^2 = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k \epsilon_{nlm}\partial_l A_m \quad (\text{A.9})$$

La primera derivada parcial resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_S}{\partial(\partial_q A_r)} &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{nlm}(\delta_{qj}\delta_{rk}\partial_l A_m + \delta_{ql}\delta_{mr}\partial_j A_k) \\ &= \epsilon_{iqr}\epsilon_{nlm}\partial_l A_m + \epsilon_{ijk}\epsilon_{nqr}\partial_j A_k \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

En el segundo término, j y k están contraídos (el ϵ y las derivadas de A). Entonces:

$$\epsilon_{iqr}(\epsilon_{nlm}\partial_l A_m + \epsilon_{nqr}\partial_q A_r) = 2\epsilon_{iqr}\epsilon_{nlm}\partial_l A_m = 2\epsilon_{iqr}(\epsilon_{nlm}\partial_l A_m) \quad (\text{A.11})$$

Tomando el gradiente:

$$\partial_q(2\epsilon_{iqr}\epsilon_{nlm}\partial_l A_m) = 2\epsilon_{iqr}\epsilon_{nlm}\partial_q\partial_l A_m = 2\epsilon_{iqr}\partial_q(\epsilon_{nlm}\partial_l A_m) = 2(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_r \quad (\text{A.12})$$

Por lo tanto:

$$\nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial(\nabla \mathbf{A})} \right) = \frac{1}{4\pi}(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}) \quad (\text{A.13})$$

Entonces, la corriente superconductora va a ser:

$$\frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{A}} = \frac{ie\hbar}{2mc}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^2}{mc^2}|\psi|^2\mathbf{A} - \frac{1}{4\pi}(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (\text{A.14})$$

De aquí en más, omitiré la dependencia explícita con la posición en los campos, a menos que sea necesario para el contexto. Las ecuaciones de Euler-Lagrange para el potencial vector \mathbf{A} se escriben como:

$$\frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial F_S}{\partial \mathbf{A}} - \nabla \left(\frac{\partial F_S}{\partial (\nabla \mathbf{A})} \right) = 0 \quad (\text{A.15})$$

Ahora, de las ecuaciones de Maxwell, se tiene:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} \quad (\text{A.16})$$

de donde se deduce que

$$\vec{J} = \frac{ie\hbar}{m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^2}{mc}|\psi|^2\mathbf{A} \quad (\text{A.17})$$

Pasamos ahora a variar respecto del parámetro de orden superconductor. En este caso, cada uno de los términos son:

$$\frac{\partial F_s}{\partial \psi^*} = \alpha_{GL}\psi + \beta_{GL}|\psi|^2\psi + \frac{i\hbar e}{2mc}\nabla\psi \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2mc^2}|\mathbf{A}|^2\psi. \quad (\text{A.18})$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial F_{SC}}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\psi \cdot \mathbf{A} + \psi\nabla \cdot \mathbf{A}) \quad (\text{A.19})$$

de donde se obtiene la ecuación

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \alpha_{GL}\psi + \beta_{GL}|\psi|^2\psi + \frac{i\hbar e}{2mc}\psi\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{i\hbar e}{mc}\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi \quad (\text{A.20})$$

Como se mencionó en el texto principal, se puede pensar un modelo dependiente del tiempo siguiendo la lógica originalmente propuesta por Schmid [56]. La dinámica del parámetro de orden superconductor y el potencial vector se prescriben según

$$(a) \quad \frac{\hbar^2}{2mD}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\delta F_{SC}}{\delta\psi^*} \quad (b) \quad \frac{\sigma}{c^2}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{\delta F_{SC}}{\delta\mathbf{A}} \quad (\text{A.21})$$

De esta manera, utilizando las cuentas mostradas anteriormente, se tiene que la ecuación para el parámetro de orden superconductor es

$$\frac{\hbar^2}{2mD}\partial_t\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \alpha_{GL}\psi - \beta_{GL}\psi|\psi|^2 - \frac{e^2}{2mc^2}\psi|\mathbf{A}|^2 - \frac{ie\hbar}{mc}\nabla\psi.\mathbf{A} - \frac{ie\hbar}{2mc}\psi\nabla.\mathbf{A} \quad (\text{A.22})$$

mientras que para el potencial vector se tiene

$$\partial_t\mathbf{A} = \frac{ie\hbar c}{2m\sigma}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^2}{m\sigma}|\psi|^2\mathbf{A} - \frac{c^2}{4\pi\sigma}(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}) \quad (\text{A.23})$$

Apéndice B

Parámetros físicos en términos de parámetros de GHOST

En este apéndice haremos una relación entre los parámetros físicos y los parámetros que se utilizan como input del código GHOST. Este incluye como parte del conjunto de resolutores de ecuaciones diferenciales uno relacionado con la ecuación de Ginzburg-Landau, conocido como ARGL (por *Advective Real Ginzburg-Landau*). A partir de esta ecuación es que podremos relacionar nuestras variables con las variables numéricas

B.1. Ecuaciones de GL y parámetros

En particular, la ecuación que se resuelve es

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = \Omega Z - \beta Z|Z|^2 + \alpha \nabla^2 Z - i\mathbf{v} \cdot \nabla Z - \frac{|v|^2 Z}{4\alpha} \quad (\text{B.1})$$

donde $Z = Z_{re} + iZ_{im}$ es el parámetro de orden escalar y \mathbf{v} es el campo de velocidades que realiza la advección del parámetro de orden. En la versión base de GHOST, este campo \mathbf{v} es un campo sin dinámica, que se utiliza para simular condiciones de flujos experimentales.

En el Apéndice A mostramos que la ecuación para el parámetro de orden superconductor

es

$$\frac{\hbar^2}{2mD}\partial_t\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \alpha_{GL}\psi - \beta_{GL}\psi|\psi|^2 - \frac{e^2}{2mc^2}\psi|\mathbf{A}|^2 - \frac{ie\hbar}{mc}\nabla\psi.\mathbf{A} - \frac{ie\hbar}{2mc}\psi\nabla.\mathbf{A} \quad (\text{B.2})$$

La primera comparación entre ecuaciones nos permite ver trivialmente que $Z \longleftrightarrow \psi$. Para encontrar una relación entre el campo de velocidades \mathbf{v} y el potencial vector electromagnético, notemos que los términos $-i\mathbf{v}.\nabla Z$ y $-\frac{ie\hbar}{2mc}\psi\nabla.\mathbf{A}$ son similares. Si dividimos a ambos lados de la ecuación B.2 por \hbar , se tiene que estos términos son

$$i\mathbf{v}\nabla Z = \frac{ie}{mc}\nabla\psi.\mathbf{A} \implies \boxed{\mathbf{v} = \frac{e}{mc}\mathbf{A}} \quad (\text{B.3})$$

Es fácil chequear que la combinación del lado derecho tiene efectivamente unidades de velocidad. También, a partir de esta definición se tiene que

$$[B_G] = [\nabla \times \mathbf{v}] = \frac{1}{T} \quad (\text{B.4})$$

con T una unidad de tiempo.

Ahora, comparamos los términos de derivadas temporales. El lado izquierdo de la ecuación B.1 está multiplicado por 1. Esta equivalencia nos servirá para dar un valor al parámetro de difusión D . En efecto, se tiene que

$$\frac{\hbar}{2mD} = 1 \implies D = \frac{\hbar}{2m} \quad (\text{B.5})$$

El valor de la constante de difusión solo tendrá efecto en la parte transitoria de la dinámica, que es un problema que se encuentra por fuera de los objetivos de este trabajo. Este valor puede ser modificado sin ningún cambio cualitativo en los resultados estacionarios.

$$\partial_t\psi = \frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi - \frac{\alpha_{GL}}{\hbar}\psi - \frac{\beta_{GL}}{\hbar}\psi|\psi|^2 - \frac{m}{2\hbar}\psi|\mathbf{v}|^2 - i\nabla\psi.\mathbf{v} - \frac{i}{2}\psi\nabla.\mathbf{v} \quad (\text{B.6})$$

Comparando las ecuaciones B.1 y B.6 se tienen las siguientes equivalencias

$$|\alpha_{GL}| = \hbar\Omega \quad \beta = \frac{\beta_{GL}}{\hbar} \quad \alpha = \frac{\hbar}{2m} \quad (\text{B.7})$$

De esta forma, la ecuación para el parámetro de orden queda como

$$\partial_t \psi = \alpha \nabla^2 \psi + \Omega \psi - \beta \psi |\psi|^2 - \frac{\psi |\mathbf{v}|^2}{4\alpha} - i \mathbf{v} \cdot \nabla \psi - \frac{i}{2} \psi \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (\text{B.8})$$

Ahora, veamos como queda la ecuación para el potencial vector. Primero, notemos que:

$$\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* = 2i \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) \quad (\text{B.9})$$

Usando además la relación entre \mathbf{A} y \mathbf{v} , se tiene que

$$\partial_t \mathbf{v} = -\frac{e^2 \hbar}{m^2 \sigma} \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) + \frac{e^2}{m \sigma} |\psi|^2 \mathbf{v} - \frac{c^2}{4\pi \sigma} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{v}) \quad (\text{B.10})$$

Recordando que la longitud de penetración de London es $\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0}$, se tiene:

$$\frac{e^2 \hbar}{m^2 \sigma} = \frac{c^2}{4\pi \lambda_L^2 \rho_0} \frac{\hbar}{m \sigma} = \frac{2\alpha}{\sigma_1 \lambda_L^2 \rho_0} \quad (\text{B.11})$$

donde $\alpha = \frac{\hbar}{2m}$ y definimos $\sigma_1 = \frac{4\pi \sigma}{c^2}$. Por otro lado,

$$\frac{e^2}{m \sigma} = \frac{c^2}{4\pi \sigma \lambda_L^2 \rho_0} = \frac{1}{\sigma_1 \lambda_L^2 \rho_0} \quad (\text{B.12})$$

. Así, la ecuación para el potencial vector que se resuelve en GHOST es:

$$\partial_t \mathbf{v} = \frac{2\alpha}{\sigma_1 \lambda_L^2 \rho_0} \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) - \frac{1}{\sigma_1 \lambda_L^2 \rho_0} |\psi|^2 \mathbf{v} - \frac{1}{\sigma_1} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{v}) \quad (\text{B.13})$$

B.2. Adimensionalización de la teoría

Veamos que podemos pasar de esta formulación a la formulación adimensional propuesta en el cuerpo principal de la tesis. Sabemos de la teoría de GL que la longitud de coherencia superconductora se define como:

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|} \quad (\text{B.14})$$

Notemos entonces que:

$$\frac{\alpha}{\Omega} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\hbar}{|\alpha_{GL}|} = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|} = \xi^2. \quad (\text{B.15})$$

Otra relación a tener en cuenta es que la diferencia entre el campo \mathbf{a} y el campo \mathbf{v} usado en GHOST es

$$\mathbf{v} = \Omega \mathbf{a} \quad (\text{B.16})$$

Por otro lado, el valor estacionario del parámetro de orden esta definido como:

$$\psi_\infty = \rho_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\beta_{GL}} = \frac{\hbar\Omega}{\hbar\beta} = \frac{\Omega}{\beta} \quad (\text{B.17})$$

Así, se tiene una forma de relacionar parámetros relevantes fisicamente en terminos de los parámetros del programa.

Veamos como queda la energía libre. Utilizando las definiciones antes dadas y reemplazando en la energía libre (recordemos que $|\alpha_{GL}| = -\alpha_{GL}$ en el estado superconductor):

$$F_S = \hbar \int_V -\Omega |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \alpha |\mathbf{D}\psi|^2 + \frac{m^2 c^2}{8\pi\hbar e^2} (\nabla \times \mathbf{v})^2 \quad (\text{B.18})$$

El ultimo coeficiente se puede reescribir usando la definicion de la longitud de penetración de London:

$$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0} \Rightarrow \frac{m^2 c^2}{8\pi\hbar e^2} = \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha} \quad (\text{B.19})$$

Por lo tanto:

$$F_S = \hbar \int_V -\Omega |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \alpha |\mathbf{D}\psi|^2 + \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha} (\nabla \times \mathbf{v})^2 \quad (\text{B.20})$$

Desarrollando la derivada covariante

$$\mathbf{D} = -i\nabla - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} = -i\nabla - \frac{e}{\hbar c} \frac{mc}{e} \mathbf{v} = -i\nabla - \frac{\mathbf{v}}{2\alpha} \quad (\text{B.21})$$

En términos de los parámetros del programa:

$$F_S = \hbar \int_V \Omega - |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \alpha |\nabla \psi|^2 - \mathbf{v} \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) + \frac{|\psi|^2 |\mathbf{v}|^2}{4\alpha} + \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha} (\nabla \times \mathbf{v})^2 \quad (\text{B.22})$$

Ahora, adimensionalizamos el parámetro de orden superconductor utilizando ρ_0 :

$$\psi = \sqrt{\rho_0} \tilde{\psi} \quad (\text{B.23})$$

Y sacando factor común Ω , se tiene:

$$F_S = \hbar\rho_0\Omega \int_V -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{\beta\rho_0}{2\Omega}|\tilde{\psi}|^4 + \frac{\alpha}{\Omega}|\nabla\tilde{\psi}|^2 - \frac{\mathbf{v}}{\Omega}\text{Im}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi}) + \frac{|\tilde{\psi}|^2|\mathbf{v}|^2}{4\alpha\Omega} + \frac{\lambda_L^2\rho_0}{4\alpha\Omega}(\nabla \times \mathbf{v})^2 \quad (\text{B.24})$$

Usando la relación entre \mathbf{A} y \mathbf{a} , se tiene

$$F_S = |\alpha_{GL}|\rho_0 \int_V -|\tilde{\psi}|^2 + \frac{1}{2}|\tilde{\psi}|^4 + \xi^2|\nabla\tilde{\psi}|^2 - \mathbf{a}\text{Im}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi}) + \frac{|\tilde{\psi}|^2|\mathbf{a}|^2}{4\xi^2} + \frac{\kappa^2}{4}(\nabla \times \mathbf{a})^2 \quad (\text{B.25})$$

Completando cuadrados:

$$F_S = |\alpha_{GL}|\rho_0 \int_V \frac{1}{2}(|\tilde{\psi}|^2 - 1)^2 + \xi^2|\nabla\tilde{\psi}|^2 - \mathbf{a}\text{Im}(\tilde{\psi}^*\nabla\tilde{\psi}) + \frac{|\tilde{\psi}|^2|\mathbf{a}|^2}{4\xi^2} + \frac{\kappa^2}{4}(\nabla \times \mathbf{a})^2 \quad (\text{B.26})$$

B.3. Incorporación del campo magnético externo en GHOST

Veamos ahora como se incorpora el campo externo en el programa GHOST. Si agregamos un campo \mathbf{H} , la energía ahora se escribe (tras haber sacado \hbar factor común y usado las relaciones entre los parámetros físicos y los del programa):

$$F_S = \hbar \int_v -\Omega|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \alpha|\nabla\psi|^2 + \frac{\alpha ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{\alpha e^2}{\hbar^2 mc^2}|\mathbf{A}|^2|\psi|^2 + \frac{1}{8\pi\hbar}|\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}|^2 \quad (\text{B.27})$$

Usando que $\mathbf{A} = \frac{mc}{e}\mathbf{v}$

$$F_S = \hbar \int_v -\Omega|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \alpha|\nabla\psi|^2 + -\mathbf{v}\text{Im}(\psi^*\nabla\psi) + \frac{1}{4\alpha}|\mathbf{v}|^2|\psi|^2 + \frac{m^2c^2}{8\pi\hbar e^2}|\nabla \times \mathbf{v} - \frac{e}{mc}\mathbf{H}|^2 \quad (\text{B.28})$$

Ya vimos que:

$$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0} \implies \frac{m^2 c^2}{8\pi \hbar e^2} = \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha} \quad (\text{B.29})$$

Entonces:

$$F_S = \hbar \int_v -\Omega|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \alpha|\nabla\psi|^2 + -\mathbf{v}\text{Im}(\psi^*\nabla\psi) + \frac{1}{4\alpha}|\mathbf{v}|^2|\psi|^2 + \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha}|\nabla \times \mathbf{v} - \frac{e}{mc}\mathbf{H}|^2 \quad (\text{B.30})$$

Defino el campo externo en el programa como

$$\mathbf{h}_G = \frac{e}{mc} \mathbf{H}, \quad (\text{B.31})$$

que tiene unidades de

$$[\mathbf{h}_G] = \frac{[e][\mathbf{H}]}{[mc]} = \frac{QT}{ML} \cdot \frac{ML}{QT^2} = \frac{1}{T} \quad (\text{B.32})$$

al igual que el campo magnético en ghost $B_G = \nabla \times \mathbf{v}$. En definitiva:

$$F_S = \hbar \int_v \frac{\beta}{2} \left(|\psi|^2 + \frac{\Omega}{\beta} \right)^2 + \alpha |\nabla \psi|^2 - \mathbf{v} \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) + \frac{1}{4\alpha} |\mathbf{v}|^2 |\psi|^2 + \frac{\lambda_L^2 \rho_0}{4\alpha} |\nabla \times \mathbf{v} - \mathbf{h}_G|^2 \quad (\text{B.33})$$

La ecuación dinámica para el potencial vector es:

$$\frac{\sigma}{c^2} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = - \frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{A}} \quad (\text{B.34})$$

Haciendo el reemplazo de $\mathbf{A} = \frac{mc}{e} \mathbf{v}$, se tiene:

$$\partial_t \mathbf{v} = - \frac{e^2 c^2}{mc^2 \sigma} \frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{v}} = - \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \frac{c^2}{m\sigma} \frac{\delta F_S}{\delta \mathbf{v}} \quad (\text{B.35})$$

La cantidad entre paréntesis se puede relacionar con la longitud de London:

$$\frac{e^2}{mc^2} = \frac{1}{4\pi \lambda_L^2 \rho_0} \quad (\text{B.36})$$

Además, reutilizando la definición de $\sigma_1 = \frac{4\pi\sigma}{c^2}$, y multiplicando y diviendo por \hbar se termina teniendo que:

$$\partial_t \mathbf{v} = - \frac{2\alpha}{\lambda_L^2 \sigma_1 \rho_0} \frac{\delta(F_S/\hbar)}{\delta \mathbf{v}} \quad (\text{B.37})$$

En definitiva, la ecuación para el potencial vector solo se modifica mediante la introducción de un término que tiene en cuenta las corrientes externas que genera el campo:

$$\partial_t \mathbf{v} = \frac{2\alpha}{\lambda_L^2 \rho_0 \sigma_1} \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi) - \frac{1}{\lambda_L^2 \rho_0 \sigma_1} \mathbf{v} |\psi|^2 - \frac{1}{\sigma_1} [(\nabla \times \nabla \times \mathbf{v}) - \nabla \times \mathbf{h}_G] \quad (\text{B.38})$$

B.4. Calculo del cuanto de flujo magnético

El cuanto de flujo esta definido en términos de constantes fundamentales como:

$$\Phi_0 = \frac{hc}{e} \quad (\text{B.39})$$

Notemos que a partir de la definición de la longitud de penetración de London se puede expresar e como:

$$\lambda_L^2 \implies e = \frac{c}{2\lambda_L} \sqrt{\frac{m}{\pi\rho_0}} \quad (\text{B.40})$$

Por otro lado, de la definición de la longitud de coherencia superconductora en la teoría de GL:

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|} \implies m = \frac{\hbar^2}{2\xi^2|\alpha_{GL}|} \quad (\text{B.41})$$

Reemplazando en la definición del cuanto y usando que $2\pi\hbar = h$ se tiene:

$$\Phi_0 = 4\pi\kappa\xi^2\sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} \quad (\text{B.42})$$

Lo expreso ahora en términos de los parámetros de GHOST. El flujo magnético es por definición:

$$\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\vec{S} \quad (\text{B.43})$$

Por otro lado, en GHOST está redefinido el potencial vector, por lo que:

$$\int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\vec{S} = \frac{mc}{e} \int_S (\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r})) \cdot d\vec{S} = \frac{\hbar\kappa}{|\alpha_{GL}|} \sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} \int_S (\nabla \times \mathbf{v}) \cdot d\vec{S} = \frac{\hbar\kappa}{|\alpha_{GL}|} \sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} \Phi^G \quad (\text{B.44})$$

donde $\Phi^G = \int_S (\nabla \times \mathbf{v}) \cdot d\mathbf{S}$ es el flujo que se calcula en GHOST y tiene unidades de:

$$[\Phi^G] = \left[\int_S (\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r})) \cdot d\vec{S} \right] = \frac{L}{T} \frac{1}{L} L^2 = \frac{L^2}{T} \quad (\text{B.45})$$

. Si hay un único vórtice, estas cantidades coinciden:

$$4\pi\kappa\xi^2\sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} = \frac{\hbar\kappa}{|\alpha_{GL}|} \sqrt{2\pi\rho_0|\alpha_{GL}|} \Phi_0^G \implies \Phi_0^G = \frac{4\pi\xi^2|\alpha_{GL}|}{\hbar} = 4\pi\alpha \quad (\text{B.46})$$

Apéndice C

Campos Magnéticos Críticos

En este apéndice encontraremos expresiones cerradas para los campos críticos termodinámico (H_c), de penetración del primer vórtice (H_{c1}) y de destrucción de la superconductividad (H_{c2}) en términos de los parámetros de la teoría de Ginzburg-Landau.

El más sencillo de definir es el campo crítico termodinámico H_c , como se hizo en la ecuación 2.68. Este se expresa como

$$H_c^2 = 4\pi \frac{|\alpha_{GL}|^2}{\beta_{GL}} \quad (\text{C.1})$$

Usando que $\rho_0 = \frac{|\alpha_{GL}|}{\beta_{GL}}$, se tiene

$$H_c^2 = 4\pi\rho_0|\alpha_{GL}| \quad (\text{C.2})$$

El campo externo está definido en la ecuación 5.10 como

$$\mathbf{H} = \frac{mc|\alpha_{GL}|}{\hbar e} \mathbf{h} \quad (\text{C.3})$$

Igualando, se tiene

$$H_c^2 = \frac{m^2 c^2 |\alpha_{GL}|^2}{\hbar^2 e^2} h_c^2 = 4\pi\rho_0|\alpha_{GL}| \quad (\text{C.4})$$

y despejando para el campo crítico adimensional, obtenemos

$$h_c^2 = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{m^2 c^2 |\alpha_{GL}|} \quad (\text{C.5})$$

Recordamos que la definición de la longitud de penetración de London y de la longitud de coherencia superconductora se relacionan con los parámetros de la teoría según

$$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_0} \quad ; \quad \xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha_{GL}|} \quad (\text{C.6})$$

Utilizando las ecuaciones en C.6, se tiene que el campo crítico termodinámico es

$$h_c = \frac{\sqrt{2}}{\kappa} \quad (\text{C.7})$$

con $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}$ el parámetro usual de GL.

Por otro lado, el campo crítico H_{c1} a partir del cual entra el primer vórtice en el material superconductor se puede calcular a partir de igualar las energías libres de Gibbs (evaluadas en H_{c1}) cuando hay un vórtice y cuando no lo hay (ver [25] Ec. 5.1). La expresión resultante es

$$H_{c1} = \frac{4\pi\epsilon_1}{\Phi_0} \quad (\text{C.8})$$

con ϵ_1 la energía por unidad de longitud del vórtice y ϕ_0 el cuarto de flujo. Utilizando la relación 5.2, podemos obtener que el campo crítico será

$$h_{c1} = \frac{16\pi^2\epsilon_1}{\phi_0^2} \quad (\text{C.9})$$

Calculamos la energía por unidad de longitud de un único vórtice, utilizando los métodos del capítulo 1 (con $\kappa = 2$ para comparar con el resultado del capítulo 5). Como mostramos en la ecuación B.46, $\phi_0 = 4\pi\alpha = 4\pi\xi^2\Omega$. De esta forma, el campo crítico resulta

$$h_{c1} = \frac{\epsilon_1}{\xi^4\Omega^2} \quad (\text{C.10})$$

Utilizando que $\Omega \cong 35,35$, $\xi = 0,056$ y $\epsilon_1 = 0,78$, obtenemos que

$$h_{c1} = 0,39 \quad (\text{C.11})$$

Para el campo crítico H_{c2} a partir del cual deja de haber superconductividad, la expresión se puede obtener analíticamente a partir de la teoría BCS ([25] eq. 4.62):

$$H_{c,2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} = \sqrt{2}\kappa H_c \quad (\text{C.12})$$

Es fácil mostrar que

$$h_{c2} = \sqrt{2}\kappa h_c = 2 \quad (\text{C.13})$$

Con este valor, resulta $h_{c1}/h_{c2} = 0,195$. Por último, la relación entre \mathbf{h} y \mathbf{h}_G es $\mathbf{h}_G = \Omega\mathbf{h}$.

Bibliografía

- [1] V. L. Ginzburg and L. D. Landau. On the theory of superconductivity. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 20, 1950.
- [2] A. A. Abrikosov. The magnetic properties of superconducting alloys. *J. Phys. Chem. Solids*, 32:199, 1957.
- [3] S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery. Electronic liquid-crystal phases phases of a doped Mott insulator. *Nature*, 393:550, 1998.
- [4] E. Fradkin and S. A. Kivelson. Liquid crystal phases of quantum Hall systems. *Phys. Rev. B*, 59:8065, 1999.
- [5] Y. Ando, K. Segawa, S. Komiya, and A. N. Lavrov. Electrical resistivity anisotropy from self-organized one dimensionality in high-temperature superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 88:137005, 2002.
- [6] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauqué, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin, and B. Keimer. Electronic liquid crystal state in the high temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.45}$. *Science*, 319:264, 2008.

- [7] R. Daou, J. Chang, D. LeBoeuf, O. Cyr-Choinière, F. Lalibertè, N. Doiron-Leyraud, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and L. Taillefer. Broken rotational symmetry in the pseudogap phase of a high T_c superconductor. *Nature*, 463:519, 2010.
- [8] R. Comin, R. Sutarto, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, R. Liang, W. N. Hardy, D.A. Bonn, F. He, G. A. Swatzky, and A. Damascelli. Broken translational and rotational symmetry via charge stripe order in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$. *Science*, 347:1335, 2015.
- [9] X. Lu, J. T. Park, R. Zhang, H. Luo, A. H. Nevidomskyy, Q. Si, and P. Dai. Nematic spin correlations in the tetragonal state of uniaxial-strained $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Science*, 345:657, 2014.
- [10] J. H. Chu, J. G. Analytis, K. D. Greeve, P. L. McMahon, Z. Islam, Y. Yamamoto, and I. R. Fisher. In plane resistivity anisotropy in an underdoped iron arsenide superconductor. *Science*, 329:824, 2010.
- [11] 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. *Phys. Rev. B*, 81:184508, 2010.
- [12] M. A. Tanatar, A. E. Bohmer, E. I. Timmons, M. Schutt, G. Drachuck, V. Tafour, K. Kothapalli, A. Kreyssig, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, R. M. Fernandes, and R. Prozorov. Origin of resistive anisotropy in the nematic phase of FeSe. *Phys. Rev. Lett.*, 117:127001, 2016.

- [13] E. Fradkin, S. A. Kivelson, M. J. Lawler, J. P. Eisenstein, and A. P. Mackenzie. Nematic fermi fluids in condensed matter physics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 1(1):153–178, 2010.
- [14] T. M. Chuang, M. P. Allan, J. Lee, Y. Xie, N. Ni, S. L. Bud’ko, G. S. Boebinger, P. C. Canfield, and J. C. Davis. Nematic electronic structure in the parent compound state of the iron-based superconductor $\text{Ca}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)\text{As}_2$. *Science*, 327:181, 2010.
- [15] E. Fradkin and S. A. Kivelson J. M. Tranquada. Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 87(457), 2015.
- [16] A. A. Abrikosov. Type ii superconductors and the vortex lattice. *Nobel Lecture*, 2003.
- [17] R. S. Severino, P. D. Mininni, V. Bekeris E. Fradkin, G. Pasquini, and G. S. Lozano. Vortices in a ginzburg-landau theory of superconductors with nematic order. *Phys. Rev. B*, 106:094512, 2022.
- [18] R. S. Severino, P. D. Mininni, V. Bekeris E. Fradkin, G. Pasquini, and G. S. Lozano. *Ginzburg – Landau* approach to the vortex–domain wall interaction in superconductors with nematic order. *Phys. Rev. B*, 109:094513, 2024.
- [19] D. O. Gomez, P. D. Mininni, and P. Dmitruk. *Phys. Scripta T116*, 123, 2005.
- [20] 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*, 37:316, 2011.
- [21] J. Amette Estrada, M. E. Brachet, and P. D. Mininni. Turbulence in rotating Bose-Einsteincondensates. *Phys.Rev.A*, 105 : 063321, 2022.

- [22] L. D. Landau. Zur theorie der phasenumwandlungen ii. *Phys. Z. Sowjetunion*, 87, 1937.
- [23] L. P. Gor'kov. Microscopic derivation of the ginzburg-landau equations in the theory of superconductivity. *Soviet Physics JETP*, 36, 1959.
- [24] N. W. Aschroft and N. D. Mermin. *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford University Press, 1993.
- [25] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity (2nd Ed.)*. McGraw-Hill, 1996.
- [26] W. A. Little and R. D. Parks. Observation of quantum periodicity in the transition temperature of a superconducting cylinder. *Phys. Rev. Lett.*, 9:9, 1962.
- [27] R. Fernandes, A. Chubukov, and J. Schmalian. What drives nematic order in iron-based superconductors? *Nat. Phys.*, 10:97–104, 2014.
- [28] T. Misawa and M. Imada. Superconductivity and its mechanisms in an ab initio model for electron-doped LaFeASO. *Nature Communications*, 5:5738, 2014.
- [29] H. Yamase and H. Kohno. Instability toward formation of quasi one-dimentional fermi surface in two-dimensional t-j model. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69:2151, 2000.
- [30] II. Pomeranchuk. On the stability of a Fermi liquid. *Sov. Phys. JETP*, 8:361, 1958.
- [31] V. Oganesyan, S. A. Kivelson, and E. Fradkin. Quantum theory of a nematic fermi fluid. *Phys. Rev. B*, 64:195109, 2001.
- [32] D. R. Nelson and J. Toner. Bond-orientational order, dislocation loops, and melting of solids and smectic-A liquid crystals. *Phys. Rev. B*, 24:363, 1981.
- [33] J. Zaanen, Z. Nussinov, and S. I. Mukhin. Duality in 2+1 D quantum elasticity: superconductivity and nematic order. *Annals of Physics*, 310:181–260, 2004.

- [34] C. Wexler and A. T. Dorsey. Disclination unbinding transition in quantum hall liquid crystals. *Phys. Rev. B*, 64:115312, 2001.
- [35] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono. Iron-based layered superconductor $lao_{1-x}fxfeas$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $t_c = 26$ k. *J. Am. Chem. Soc.*, 130:3296–3297, 2008.
- [36] I. Mazin, D. Singh, M. Johannes, and M. Du. Unconventional superconductivity with a sign reversal in the order parameter of $lafeaso_{1-x}fx$. *Phys. Rev. Lett.*, 101:057003, 2008.
- [37] K. Kuroki, H. Usui, S. Onari, R. Arita, and H. Aoki. Pnictogen height as a possible switch between high- t_c nodeless and low- t_c nodal pairings in the iron based superconductors. *Phys. Rev. B*, 79:224511, 2009.
- [38] P. Hirschfield, M. Korshunov, and I. Mazin. Gap symmetry and structure of fe-based superconductors. *Rep. Prog. Phys.*, 74:124508, 2011.
- [39] A. Chubukov. Pairing mechanism in fe-based superconductors. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 3:57–92, 2012.
- [40] F. Wang and D. Lee. The electron pairing mechanism of iron based superconductors. *Science*, 332:200–204, 2011.
- [41] I. Mazin. Superconductivity gets an iron boost. *Nature*, 464:183–186, 2010.
- [42] J. Paglione and R. L. Greene. High-temperature superconductivity in iron-based materials. *Nat. Phys.*, 6:645–658, 2010.
- [43] H. Hosono, A. Yamamoto, H. Hiramatsu, and Y. Ma. Recent advances in iron-based superconductors towards applications. *Materials Today*, 3:278–302, 2018.

- [44] G. Biswal and K. L. Mohanta. A recent review on iron-based superconductor. *Materials Today: Proceedings*, 35:207–215, 2021.
- [45] M. A. Tanatar et al. Direct imaging of the structural domains in the iron pnictides $afe_2as_2(a = ca, sr, ba)$. *Phys. Rev. B*, 79:1–4, 2009.
- [46] J. Chu et al. In-plane resistivity anisotropy in an underdoped iron arsenide superconductor. *Science*, 329:824–826, 2010.
- [47] C. Mirri et al. Origin of the resistive anisotropy in the electronic nematic phase of $bafe_2as_2$ revealed by optical spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 115:107001, 2015.
- [48] T. M. Chuang et al. Nematic electronic structure in the parent state of the iron-based superconductor $ca(fe_{1-x}co_x)_2as_2$. *Science*, 327:181–184, 2010.
- [49] M. Yi, Y. Zhang, Z. Shen, and D. Lu. Role of the orbital degree of freedom in iron based superconductors. *npj Quantum Matter*, 2:57, 2017.
- [50] X. Lu et al. Nematic spin correlations in the tetragonal state of uniaxial-strained $bafe_{2-x}ni_xas$. *Science*, 345:657–600, 2014.
- [51] A. E. Böhmer et al. Nematic susceptibility of hole-doped and electron-doped $bafe_2as_2$ iron-based superconductors from shear modulus measurements. *Phys. Rev. Lett.*, 112:047001, 2014.
- [52] J. H. Chu, H. Kuo, J. G. Analytis, and I. R. Fisher. Divergent nematic susceptibility in an iron arsenide superconductor. *Science*, 337:710–712, 2012.
- [53] Y. Gallais et al. Observation of incipient charge nematicity in $ba(fe_{1-x}co_x)_2as_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 111:267001, 2013.

- [54] H. B. Nielsen and P. Olesen. Vortex-line models for dual strings. *Nuclear Physics B*, 61:45, 1973.
- [55] L. Kramer. Thermodynamic behavior of type-ii superconductors with small κ near the lower critical field. *Phys. Rev. B*, 3:3821, 1971.
- [56] A. Schmid. A time dependent ginzburg-landau equation and its application to the problem of resistivity in the mixed state. *Phys. Kondens Materie*, 5:302, 1966.
- [57] P. D. Mininni, A. Alexakis, and A. Pouquet. Nonlocal interactions in hydrodynamic turbulence at high reynolds numbers: The slow emergence of scaling laws. *Phys. Rev. E*, 77:036306, 2008.
- [58] P. D. Mininni and A. Pouquet. Energy spectra stemming from interactions of alfvén waves and turbulent eddies. *Phys. Rev. Lett.*, 99:254502, 2007.
- [59] P. D. Mininni, D. O. Gomez, and S. M. Mahajan. Direct simulations of helical hall-mhd turbulence and dynamo action. *Astrophys. J.*, 619:1019, 2005.
- [60] J. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods* (2nd ed.). Dover, 2013.
- [61] P. Clark di Leoni, P. D. Mininni, and M. E. Brachet. Spatiotemporal detection of kelvin waves in quantum turbulence simulations. *Phys. Rev. A*, 92:063632, 2015.
- [62] S. A. Orszag. On the elimination of aliasing in finite-differences schemes by filtering high-wavenumber components. *Journal of The Atmospheric Sciences*, 28:1074, 1971.
- [63] C. Nore, M. Abid, and M. E. Brachet. Decaying kolmogorov turbulence in a model of superflow. *Physics of Fluids*, 9:2644, 1997.

- [64] G. I. Taylor and A. E. Green. Mechanism of the production of small eddies from large ones. *Proc. R. Soc. Lon. A*, 158:499–521, 2021.
- [65] L. Jacobs and C. Rebbi. Interaction energy of superconducting vortices. *Phys. Rev. B*, 19:4486, 1979.
- [66] E. B. Bogomolny. The stability of classical solutions. *Sov. J. Nucl. Phys*, 24:449, 1976.
- [67] J. Carlstrom, E. Babaev, and M. Speight. Type-1.5 superconductivity in multiband systems: Effects of interband couplings. *Phys. Rev. B*, 83:174509, 2011.
- [68] L. Perivolaropoulos. Asymptotic of Nielsen-Olesen vortices. *Phys. Rev. D*, 48:5961, 1993.
- [69] 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, 2009.
- [70] B. Kalisky, J. R. Kirtley, J. G. Analytis, Jiun-Haw Chu, A. Vailionis, I. R. Fisher, and K. A. Moler. Stripes of increased diamagnetic susceptibility in underdoped superconducting $ba(fe_{1-x}co_x)_2as_2$ single crystals: Evidence for an enhanced superfluid density at twin boundaries. *Phys. Rev. B*, 81:184513, 2010.
- [71] J. J. Sanchez, P. Malinowski, J. Mutch, J. Liu, J. W. Kim, P. J. Ryan, and J. Chu. The transport–structural correspondence across the nematic phase transition probed by elasto x-ray diffraction. *Nat. Mater.*, 20:1519, 2021.
- [72] 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.

- [73] M. Marzali Bermúdez, G. Pasquini, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield. Correlated vortex pinning in slightly orthorhombic twinned $ba(fe_{1-x}co_x)_2as_2$ single crystals: Possible shift of the vortex-glass/liquid transition. *Phys. Rev. B*, 87:054515, 2013.
- [74] J. Schmidt, V. Bekeris, G. S. Lozano, M. V. Bortule, M. Marzali Bermudez, 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, 2019.
- [75] C. L. Song, Y. L. Wang, P. Cheng, Y. P. Jiang, W. Li, T. Zhang, Z. Li, K. He, L. Wang, and J. F. Jia et al. Direct observation of nodes and twofold symmetry in fese superconductor. *Science*, 332:1410, 2011.
- [76] Can-Li Song et al. Suppression of superconductivity by twin boundaries in FeSe. *Phys.Rev.Lett.*, 109:137004, 2012.
- [77] T. Watashige, Y. Tsutsumi, T. Hanaguri, Y. Kohsaka, S. Kasahara, A. Furusaki, M. Sigrist, C. Meingast, T. Wolf, H. v. Löhneysen, T. Shibauchi, and Y. Matsuda. Evidence for time-reversal symmetry breaking of the superconducting state near twin-boundary interfaces in *fese* revealed by scanning tunneling spectroscopy. *Phys. Rev. X*, 5:031022, 2015.
- [78] Irene P. Zhang et al. Imaging anisotropic vortex dynamics in FeSe. *Phys.Rev.*, 100:024514, 2019.
- [79] Yi Yin et al. Scanning tunneling spectroscopy and vortex imaging in the iron pnictide superconductor Ba $Fe_{1.8}Co_{0.2}As_2$. *Phys.Rev.Lett.*, 102 : 097002, 2009.
- [80] B. Kalisky, J. R. Kirtley, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, and K. A. Moler. Behavior of vortices near twin boundaries in underdoped $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$. *Phys. Rev. B*, 83:064511, 2011.

- [81] A. Yagil, Y. Lamhot, A. Almoalem, S. Kasahara, T. Watashige, T. Shibauchi, Y. Matsuda, and O. M. Auslaender. Diamagnetic vortex barrier stripes in underdoped $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$. *Phys. Rev. B*, 94:064510, 2016.
- [82] Y. M. Shnir. *Topological and non-topological solitons in scalar field theories*. Cambridge University Press, 2018.
- [83] W. H. Kleiner, L. M. Roth, and S. H. Autler. Bulk solution of Ginzburg-Landau equations for type 2 superconductors-upper critical field region. *Phys. Rev. A*, A1226, 1964.
- [84] Comunicación privada con J. Amette Estrada.
- [85] A. D. Hernández and D. Domínguez. The surface barrier in mesoscopic type I and type II superconductors. *Phys. Rev. B*, 65:144529, 2002.
- [86] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [87] A. V. Putilov, C. Di Giorgio, V. L. Vadinov, D. J. Trainer, E. M. Lechner, and J. L. Curtis et al. Vortex core properties and vortex-lattice transformations in FeSe. *Phys. Rev. B*, 99:144514, 2019.
- [88] S. Y. Song et al. Numinously templated vortex lattices in superconducting FeSe. *Nano Lett.*, 23:2822–2830, 2023.
- [89] D. Lu, Y. Lv, J. Li, B. Zhu, Q. Wang, H. Wang, and P. Wu. Elliptical vortex and oblique vortex lattice in the FeSe superconductor based on the nematicity and mixed superconductor order. *npj Quantum Materials*, 3, 2018.

- [90] J. Maletz, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, and S. Thirupathaiah et al. Unusual band renormalization in the simplest iron based superconductor FeSe_{1-x} . *Phys. Rev. B*, 89:220506(R), 2014.
- [91] M. D. Watson, T. K. Kim, A. A. Haghishirad, and N. R. Davies et al. Emergence of the nematic state in FeSe. *Phys. Rev. B*, 91:155106, 2015.
- [92] M. D. Watson, T. K. Kim, A. A. Haghishirad, and S. F. Blake et al. Suppression of orbital ordering by chemical pressure in $\text{FeSe}_{1-x}\text{Se}_x$. *Phys. Rev. B*, 92:121108(R), 2015.
- [93] Y. Sun, S. Pyon, T. Tamegai, R. Kobayashi, T. Watashige, S. Kasahara, Y. Matsuda, and T. Shibauchi. Critical current density, vortex dynamics, and phase diagram of single-crystal FeSe. *Phys. Rev. B*, 92:144509, 2015.
- [94] Y. Sun, S. Pyon, T. Tamegai, R. Kobayashi, T. Watashige, S. Kasahara, Y. Matsuda, and H. Kitamura. Enhancement of critical current density and mechanism of vortex pinning in H+-irradiated FeSe single crystal. *Appl. Phys. Express*, 8:113102, 2014.
- [95] A. Leo, G. Grimaldi, A. Guarino, F. Avitabile, A. Nigro, A. Galluzzi, D. Mancusi, M. Polichetti, S. Pace, and K. Buchkov. Vortex pinning properties in Fe-chalcogenides. *Supercond. Sci. Technol.*, 28:125001, 2015.
- [96] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I Larkin, and V. M. Vinokur. Vortices in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 66:1125, 1994.
- [97] F. Castillo Menegoto, R. S. Severino, P. D. Mininni, E. Fradkin, V. Bekeris, G. Pasquini, and G. S. Lozano. Manuscrito en preparación. 2025.