



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

EMANUEL VIEIRA DOS SANTOS JUNIOR

Propriedades Magnéticas de Supercondutores de Duas Bandas no Estado Intertipo

Recife

2023

EMANUEL VIEIRA DOS SANTOS JUNIOR

Propriedades Magnéticas de Supercondutores de Duas Bandas no Estado Intertipo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós- Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

**Área de Concentração:** Física da Matéria Condensada e de Materiais

**Orientador (a):** Prof. Dr. José Albino Oliveira de Aguiar

Recife

2023

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Nataly Soares Leite Moro, CRB4-1722

S237p Santos Junior, Emanuel Vieira dos  
Propriedades magnéticas de supercondutores de duas bandas no estado  
intertipo / Emanuel Vieira dos Santos Junior. – 2023.  
94 f.: il.

Orientador: José Albino Oliveira de Aguiar.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN,  
Física, Recife, 2023.  
Inclui referências.

1. Física da matéria condensada e de materiais. 2. Regime intertipo. 3.  
Supercondutores multibandas. 4. Matéria exótica de vórtices. 5. Diagrama de  
fases. I. Aguiar, José Albino Oliveira de (orientador). II. Título.

530.41

CDD (23. ed.)

UFPE- CCEN 2023 - 110

**EMANUEL VIEIRA DOS SANTOS JUNIOR**

**PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE SUPERCONDUTORES DE  
DUAS BANDAS NO ESTADO INTERTIPO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 29/05/2023.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. José Albino Oliveira de Aguiar  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Dr. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Dr. Andrey Chaves  
Examinador Externo  
Universidade Federal do Ceará

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente a Deus por ter me dado saúde e determinação para superar as adversidades.

Agradeço ao meu orientador José Albino pelo estímulo, apoio e dedicação durante toda a minha trajetória do mestrado.

Agradeço ao meu colega Wilmer pela disponibilidade e ajuda na parte computacional da dissertação.

Agradeço a minha família, meus pais Emanuel Vieira dos Santos e Maria Suely Sampaio Ferreira, minhas irmãs Emanuelle Ferreira dos Santos e Thaianne Ferreira Corbacho, minha esposa Karina e minha filha Ana Liz que sempre estão do meu lado me apoiando e me incentivando ao longo da minha jornada.

## RESUMO

Convencionalmente, os materiais supercondutores são divididos em dois tipos: tipo I e tipo II. O tipo I apresenta diamagnetismo perfeito, enquanto o tipo II permite a penetração de fluxo magnético na forma de vórtices. Essa classificação é feita com base no parâmetro de Ginzburg-Landau (GL), chamado de  $\kappa$ , que é a relação entre as distâncias de penetração magnética ( $\lambda$ ) e de coerência ( $\xi$ ). Quando  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , o material é considerado tipo I, e quando  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ , é tipo II. Além desses dois tipos convencionais, existe um estado não convencional chamado de estado intertipo (IT). Nesse estado, ocorrem configurações magnéticas incomuns, onde a interação entre os vórtices pode ser atrativa ou repulsiva de forma não monotônica. Isso resulta na formação de estruturas peculiares, como agregados de vórtices, ilhas de vórtices coexistindo com domínios Meissner, tiras de vórtices e labirintos. O estado IT ocorre próximo ao ponto de Bogomol'nyi, onde  $\kappa_0 = 1/\sqrt{2}$ , e nesse ponto todas as configurações de vórtices têm a mesma energia, tornando o estado condensado auto-dual e infinitamente degenerado. Nesta dissertação, estudamos as configurações de vórtices em supercondutores compostos por dois condensados acoplados pelo efeito Josephson. Utilizamos o formalismo de GL de duas componentes e a representação de Eilenberger, que relaciona os parâmetros fenomenológicos com os parâmetros microscópicos. Alguns dos parâmetros microscópicos relevantes no modelo são a razão entre as velocidades de Fermi de cada banda ( $v_1/v_2$ ), a densidade de estados de cada banda e a matriz de acoplamento elétron-fônon. Por meio de diagramas de fases que relacionam a razão  $v_1/v_2$  com a temperatura  $T$ , capturamos a resposta volumétrica do sistema, evitando a influência das bordas. Esses diagramas de fases mostram diferentes transições típicas de supercondutores tipo II e tipo I e IT. Além disso, analisamos a energia de interação entre os vórtices em função da distância de separação e comparamos os resultados obtidos para o modelo de uma banda. Finalmente, realizamos uma análise espectral da indução magnética e calculamos o comportamento da distribuição da distância entre os vórtices na rede.

**Palavras-chave:** regime intertipo; supercondutores multibandas; matéria exótica de vórtices; diagrama de fases; potencial de interação.

## ABSTRACT

Conventionally, superconducting materials are divided into two types: type I and type II. Type I presents perfect diamagnetism, while type II allows the penetration of magnetic flux in the form of vortices. This classification is based on the Ginzburg-Landau (GL) parameter, called  $\kappa$ , which is the ratio between the magnetic penetration ( $\lambda$ ) and coherence ( $\xi$ ) distances. When  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , the material is considered type I, and when  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ , it is type II. In addition to these two conventional types, there is an unconventional state called the intertype state (IT). In this state, unusual magnetic configurations occur, where the interaction between the vortices can be attractive or repulsive in a non-monotonic way. This results in the formation of peculiar structures, such as vortex clusters, vortex islands coexisting with Meissner domains, vortex strips and labyrinths. The IT state occurs close to the Bogomol'nyi point, where  $\kappa_0 = 1/\sqrt{2}$ , and at that point all vortex configurations have the same energy, making the condensed state self-dual and infinitely degenerate. In this dissertation, we study the configurations of vortices in superconductors composed of two condensates coupled by the Josephson effect. We use the two-component GL formalism and the Eilenberger representation, which relates the phenomenological parameters with the microscopic parameters. Some of the relevant microscopic parameters in the model are the ratio between the Fermi velocities of each band ( $v_1/v_2$ ), the density of states of each band and the electron-phonon coupling matrix. By means of phase diagrams that relate the ratio  $v_1/v_2$  with the temperature  $T$ , we capture the volumetric response of the system, avoiding the influence of the edges. These phase diagrams show different transitions typical of Type II and Type I and IT superconductors. Furthermore, we analyzed the interaction energy between the vortices as a function of the separation distance and compared the results obtained for the one-band model. Finally, we perform a spectral analysis of the magnetic induction and calculate the behavior of the distribution of the distance between the vortices in the lattice.

**Keywords:** intertype state; multibands superconductors; exotic vortex matter; phases diagram; interaction potential.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Queda abrupta no valor da resistividade do mercúrio quando o material atinge temperatura da ordem de $4.2K$ . . . . .	16
Figura 2 – Comportamento do parâmetro de ordem para diferentes tipos de interfaces: interface SI no canto superior esquerdo, interface SN no canto superior direito, interface SF no canto inferior esquerdo e interface SS' no canto inferior direito. . . . .	22
Figura 3 – Atenuação do campo magnético no interior de um material supercondutor, conhecido como efeito Meissner. . . . .	24
Figura 4 – Comportamento da densidade de superelétrons $ \Psi ^2$ dentro do material supercondutor. . . . .	25
Figura 5 – Anel supercondutor na presença de um campo magnético. A trajetória fechada, que é representada em linha pontilhada, está no interior do anel, afastada das superfícies, de modo que a densidade de corrente seja nula nesta região. (b) Fluxo magnético aprisionado num anel de estanho. . . . .	26
Figura 6 – (a) Energia de superfície positiva para supercondutores de tipo I ( $\kappa > 1$ ) e (b) energia de superfície negativa para supercondutores de tipo II ( $\kappa < 1$ ). . . . .	29
Figura 7 – Arranjo de vórtices de Abrikosov. . . . .	30
Figura 8 – Diagrama de fase dos diferentes estados da matéria do vórtice em vanádio baseado em magnetometria e experimentos de nêutrons. . . . .	32
Figura 9 – Estrutura de um vórtice magnético em um supercondutor, onde o vórtice carrega exatamente um quantum de fluxo $\Phi_0$ e é circundado pelas supercorrentes $\vec{J}$ que blindam o supercondutor remanescente do fluxo magnético. . . . .	35
Figura 10 – Estruturas de estado intermediário consistindo em rede de vórtices coexistindo com domínios Meissner foram encontradas na vizinhança de $\kappa = 1/\sqrt{2}$ . . . . .	38
Figura 11 – Curvas de magnetização do $TaN$ exibindo o comportamento tipo-I para altas temperaturas e tipo-II para baixas temperaturas. Diagrama de fases $\kappa - T$ exibindo regiões onde o $TaN$ se comporta como tipo I, tipo II e um novo tipo, que foi chamado na época de tipo II/I. . . . .	39



Figura 12 – Diagrama de fase de um supercondutor do tipo II/1, dividido entre o estado Meissner, estado misto intermediario, e o estado misto. . . . .	40
Figura 13 – O Diagrama de Fases $\kappa - T$ do regime intertipo apresenta a dicotomia clássica tipo I e tipo II em $T_c$ . Abaixo de $T_c$ , o ponto crítico em $\kappa_0$ se expande para o regime intertipo estendido, dividido em dois regimes distintos: vórtices únicos (IT/II) e configurações de vórtices múltiplos (IT/I). O tipo II/1 e o IMS são vagamente correspondentes à fase IT/II. . . . .	41
Figura 14 – Densidade local de pares de Cooper $ \Psi ^2$ em filmes finos de espessura $w$ . . . . .	42
Figura 15 – Os nós da malha para os campos $\Psi$ e $\phi$ no plano $(x, y)$ . . . . .	56
Figura 16 – Estrutura de um programa CUDA. As setas azuis e verdes indicam a execução de instruções, ou threads, na CPU e GPU, respectivamente. . . . .	61
Figura 17 – Ilustração do Processo de gerenciamento de memória em CUDA. . . . .	63
Figura 18 – Threads CUDA são organizados em blocos e os blocos são organizados em grids. Esses blocos e grids podem ser $1D$ , $2D$ ou $3D$ , e esta figura ilustra o caso $2D$ . Todos os threads em uma grade executam a mesma função do kernel, e o kernel é iniciado a partir do host. . . . .	66
Figura 19 – Diagrama de Árvore do Diretório do Projeto . . . . .	73
Figura 20 – Arquitetura do Pipeline de Processamento . . . . .	74
Figura 21 – Perfil Espacial da Banda 1, $ \Psi_1 ^2$ para $\alpha = 0.8$ exibindo o comportamento de um supercondutor do tipo II com uma rede de Abrikosov levemente distorcida. . . . .	77
Figura 22 – Perfil Espacial da Banda 1, $ \Psi_1 ^2$ para $\alpha = 0.7$ exibindo a transição de uma rede de abrikosov a altas temperaturas até a fragmentação da rede em clusters de vórtices. . . . .	78
Figura 23 – Perfil Espacial da Banda 1, $ \Psi_1 ^2$ para $\alpha = 0.6$ exibindo a transição de uma rede de abrikosov a altas temperaturas e a medida que a temperatura diminui para $T/T_c = 0.85$ a materia de vórtices muda formando labirintos coexistindo com regiões Meissner e se estabiliza em stripes para $T/T_c = 0.7$ . . . . .	78

Figura 24 – Perfil Espacial da Banda 1, $ \Psi_1 ^2$ para $\alpha = 0.5$ . Em altas temperaturas não apresenta rede de abrikosov e sim um estado líquido com inclusões Meissner contornadas pela matéria de vórtices. A medida em que a temperatura diminui a configuração se torna um labirinto em $T/T_c = 0.85$ e a medida que a temperatura diminui até $T/T_c = 0.7$ se forma uma longa cadeia líquida de vórtices. . . . .	79
Figura 25 – Potencial de Interação Vórtice-Vórtice mostrando a mudança da interação puramente repulsiva em $\alpha = 0.8$ , a interação não monotônica em $\alpha = 0.7$ até a interação puramente atrativa em $\alpha = 0.5$ . . . . .	81
Figura 26 – Diagrama de fases que separa as regiões de supercondutores convencionais do tipo II ou tipo I em regiões IT/I e IT/II. A linha tracejada indica a mudança de um estado sólido para um estado líquido. A numeração de 1-6 indica as configurações de vórtices observadas na Fig. 27. . . . .	83
Figura 27 – Comparação entre as Configurações de Vórtices no Estado Intertipo para o caso de Uma e Duas Bandas. A numeração de 1 – 6 indica em qual fase a configuração aparece no diagrama de fases da Fig. 26. . . . .	84
Figura 28 – Análise Espectral da Indução Magnética para $T/T_c = 0.9$ . Para $\alpha = 0.7$ o espectro de Fourier exhibe o comportamento da rede hexangular, para $\alpha = 0.6, 0.5$ acontece uma espécie de derretimento da rede e um colapso para um único pico centrado, respectivamente. A vorticidade se mantém uniforme enquanto que a distribuição da distância entre os vórtices se altera de monomodal para bimodal. . . . .	86
Figura 29 – Análise Espectral da Indução Magnética para $T/T_c = 0.8$ . Para $\alpha = 0.7$ , devido a fragmentação da rede em clusters, os picos no espectro se sobrepõem, a vorticidade se mantém uniforme e a distribuição de distância monomodal. em seguida para $\alpha = 0.6, 0.5$ por apresentarem um estado mais líquido e ser energeticamente favorável a formação de longas cadeias de vórtices, o espectro de Fourier se concentra em uma região mais alongada e mesmo com a vorticidade sendo uniforme, a distribuição da distância entre os vórtices apresenta o caráter multimodal com vários picos. . . . .	87

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	<b>16</b>
2.1	TEORIA DE GINZBURG-LANDAU	18
2.1.1	<b>Equações de Ginzburg-Landau</b>	<b>20</b>
2.1.2	<b>Comprimentos Característicos</b>	<b>23</b>
2.1.3	<b>Quantização de Fluxo Magnético</b>	<b>25</b>
2.1.4	<b>Classificação dos Supercondutores</b>	<b>27</b>
2.1.5	<b>Rede de Vórtices de Abrikosov</b>	<b>29</b>
2.2	PROPRIEDADES DA MATÉRIA DE VÓRTICES	31
2.2.1	<b>Estrutura de um Vórtice</b>	<b>33</b>
2.2.2	<b>Interações entre Vórtices</b>	<b>35</b>
2.2.3	<b>Padrões de Fluxo e Domínios Magnéticos</b>	<b>37</b>
2.2.4	<b>Regime Intertipo</b>	<b>40</b>
2.3	SUPERCONDUTORES MULTIBANDAS	42
2.3.1	<b>Formalismo de Ginzburg-Landau de Duas Bandas</b>	<b>44</b>
2.3.2	<b>Consistência com a Teoria Microscópica</b>	<b>46</b>
2.3.3	<b>Dependência Temporal e Unidades Reduzidas</b>	<b>47</b>
<b>3</b>	<b>MODELAGEM NUMÉRICA E COMPUTACIONAL</b>	<b>50</b>
3.1	MÉTODOS NUMÉRICOS	50
3.1.1	<b>Diferenças Finitas</b>	<b>50</b>
3.1.2	<b>Variáveis de Ligação</b>	<b>52</b>
3.1.3	<b>Método de Euler</b>	<b>54</b>
3.1.4	<b>Discretização do Modelo de Duas Bandas</b>	<b>55</b>
3.1.5	<b>Equações de Movimento</b>	<b>57</b>
3.1.6	<b>Condições de Contorno Periódicas</b>	<b>58</b>
3.2	NOÇÕES BÁSICAS SOBRE PROGRAMAÇÃO PARALELA EM CUDA	60
3.2.1	<b>Gerenciamento de Memória</b>	<b>62</b>
3.2.2	<b>Kernels</b>	<b>64</b>
3.2.3	<b>Hierarquia de Threads</b>	<b>65</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>69</b>

4.1	MOTIVAÇÃO . . . . .	69
4.2	ESTRUTURA DAS SIMULAÇÕES . . . . .	71
4.2.1	<b>Domínio e Parâmetros Computacionais . . . . .</b>	<b>72</b>
4.2.2	<b>Pipeline de Processamento em CUDA . . . . .</b>	<b>72</b>
4.3	PROPRIEDADES MAGNÉTICAS . . . . .	76
4.3.1	<b>Diagrama de Fases . . . . .</b>	<b>77</b>
4.3.2	<b>Potencial de Interação . . . . .</b>	<b>80</b>
4.3.3	<b>Comparação com o Modelo de Uma Banda . . . . .</b>	<b>82</b>
4.3.4	<b>Análise Espectral da Indução Magnética . . . . .</b>	<b>85</b>
5	<b>PERSPECTIVAS E TRABALHOS FUTUROS . . . . .</b>	<b>89</b>
6	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>91</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>92</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Os supercondutores são encontrados em uma vasta variedade de materiais com diferentes propriedades explicadas fenomenologicamente e microscopicamente. O mecanismo microscópico da supercondutividade é explicado através da teoria BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFER, 1957) e parte da premissa de que os elétrons próximos a superfície de Fermi formam pares de elétrons ligados, denominados pares de Cooper. Os pares de Cooper se condensam em um estado quântico macroscópico, o estado supercondutor. Independente da natureza microscópica, os supercondutores são convencionalmente caracterizados por sua resposta magnética.

Fenomenologicamente, através da muito bem-sucedida teoria de Ginzburg-Landau (GINZBURG; LANDAU, 1950a), a descrição macroscópica do estado supercondutor deriva da descrição proposta por Landau para as transições de fase de segunda ordem. O modelo de Landau se fundamenta na hipótese da existência de uma variável termodinâmica, denominado parâmetro de ordem, que caracteriza o estado ordenado de baixas temperaturas. O parâmetro de ordem supercondutor tende a zero continuamente quando a temperatura aumenta e se aproxima da temperatura crítica, onde o material volta ao estado normal. A teoria de GL prevê a existência de dois tipos de materiais supercondutores. Tipo I, com total expulsão de fluxo magnético conhecido com efeito Meissner, e tipo II onde ocorre a penetração de fluxo magnético na forma de vórtices, que são regiões onde a corrente elétrica circula em torno de um núcleo normal.

As propriedades magnéticas de um supercondutor são fortemente ligadas às interações entre os vórtices. Os vórtices formam um conjunto diversificado de estados da matéria, podendo ocorrer fases líquidas e vítreas, entre outras que compõem a matéria de vórtices (HÜBNER, 2001). O estado da matéria de vórtices mais conhecido é a rede de vórtices de Abrikosov (ABRIKOSOV, 1957a). Os vórtices se alinham ao longo do campo magnético externo aplicado e se organizam numa rede triangular ou hexagonal de acordo com a estrutura cristalina do material. Defeitos de rede e impurezas na estrutura cristalina provocam desordem no material supercondutor e podem levar a formação de estados amorfos (TOFT-PETERSEN et al., 2018).

Existe uma quebra na classificação padrão dos supercondutores. Essa quebra acontece no ponto crítico de Bogomolnyi (VAGOV et al., 2016; WOLF et al., 2017) e é amplamente referenciada como Supercondutividade Intertipo. No ponto de Bogomolnyi o estado condensado é auto dual e infinitamente degenerado levando a qualquer configuração de vórtice ser energeticamente favorável. Juntamente com a interação não monotônica e efeitos de muitos corpos

---

levam a existência de padrões exóticos de fluxo magnético, tais como, vórtices multi-quânticos, Stripes, clusters de vórtices, labirintos de vórtices coexistindo com regiões Meissner, entre outros.

Na presença de múltiplas superfícies de Fermi, adentramos ao caso dos supercondutores multibandas. Em especial, a descoberta do diboreto de magnésio ( $\text{MgB}_2$ ) provocou grande revolução na comunidade científica e ainda hoje existem grandes debates acerca da quantidade de bandas (MURANAKA et al., 2001). A descoberta de supercondutores multibandas trouxe novas perspectivas na dimensão de pesquisa dos materiais supercondutores, e a descrição de propriedades não convencionais se mostram intrigantes e em aberto na comunidade científica. Dentre essas propriedades temos a oscilação coletiva do número de pares de Cooper entre diferentes bandas, conhecido como modo de Leggett (LEGGETT, 1966). Supercondutores multibanda com acoplamento Josephson interbanda permitem a torção de fase ou excitação de soliton de fase devido aos mínimos de energia degenerados no acoplamento Josephson. Outras propriedades são o aparecimento de vórtices fracionários onde o núcleo do vórtice pode se dividir entre componentes específicos de bandas múltiplas do condensado supercondutor (BABAEV, 2003) e em geral, o vórtice em diferentes condensados no estado fundamental é limitado e seus núcleos normais são travados juntos para formar um vórtice composto.

Resultados de simulação computacional (SILVA et al., 2014) de configurações de vórtices fracionados mostram que eles deixam impressões digitais distintas nas medições estáticas da magnetização, bem como em medições da variação da susceptibilidade magnética ao longo do tempo, ambos podem ser prontamente usados para a detecção desses fascinantes estados de vórtice em vários supercondutores multibanda existentes. Os vórtices fracionários também podem ser estabilizados em um supercondutor mesoscópico de duas bandas (CHIBOTARU; DAO; CEULEMANS, 2007). Em uma análise detalhada da dissociação de vórtices e da influência da corrente aplicada para uma fita supercondutora de duas bandas (POLO et al., 2017) é mostrado a influência de texturas de fase na dissipação causada pelos movimentos dos vórtices e que a introdução de defeitos no material através de uma barreira linear de pinning paralela ao movimento do vórtice facilita a sua dissociação.

Em fitas supercondutores multibandas também pode ocorrer a existência de uma resposta paramagnética gigante (SILVA et al., 2015). Essa resposta magnética não é descrita nos livros didáticos, e é uma região de cruzamento entre os tipos convencionais de materiais supercondutores. Tal descoberta abre uma nova classe de materiais desejáveis que podem ser utilizados num forte aumento de campo magnético aplicado ou na sua completa remoção com baixa po-

tência de consumo. Até o momento, a compreensão das interações de vórtices concorrentes em supercondutores multibanda não foi conclusivamente estabelecida. Em supercondutores com múltiplos condensados a interação entre vórtices apresenta algumas características interessantes. Assim como acontece no ponto de Bogolmony, pode ocorrer interação não monotônica onde os vórtices se atraem a grandes distâncias e se repelem a curtas distâncias levando a existência de estados exóticos de vórtices. Essa interação entre os vórtices é fortemente ligada aos parâmetros microscópicos do material, tais como densidade de estados, acoplamento elétron-fônon e velocidade de Fermi de cada banda.

Diante do exposto, estruturamos a dissertação com a seguinte distribuição dos capítulos:

2. Fundamentação Teórica: Breve revisão da literatura, onde apresentamos a teoria de Ginzburg-Landau para um único condensado, alguns conceitos chaves sobre interação entre os vórtices, estado misto intermediário e a região intertipo. Em seguida, mostramos como podemos utilizar o modelo de Ginzburg-Landau de duas componentes e sua relação funcional com os parâmetros microscópicos.

3. Métodos Numéricos e Computacionais: Descrição do método utilizado para discretizar e implementar as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo para o modelo de duas bandas em função dos parâmetros microscópicos e em unidades “adimensionais”. Em contraste ao método comumente utilizado  $U - \Psi$  que se utiliza variáveis de ligação complexas, aplicamos o método  $\Phi - \Psi$  que consiste de variáveis de ligações reais e tornam o esquema explícito mais simples para discretização espacial com convergência de segunda ordem no espaço. Abordamos noções da linguagem de programação paralela CUDA C/C++ e de como aplicar o algoritmo.

4. Resultados: Exposição de diagrama de fases inéditos que decorrem da aplicação do procedimento de resfriamento e aquecimento com campo magnético aplicado. No resfriamento com campo, mostramos diversas transições exóticas de vórtices que são não convencionais e que estão relacionadas com a natureza intertipo multibandas. No aquecimento com campo, mostramos que as estruturas de vórtices obtidas tendem a se “colar” a medida em que a temperatura aumenta. Mostramos também o comportamento da energia de interação entre os vórtices, que revela o comportamento não monotônico entre os vórtices relacionando a razão entre as velocidade de Fermi de cada banda com a temperatura aplicada. Comparamos os nossos resultados com os resultados obtidos no modelo de uma banda. Por fim, fazemos uma análise espectral da indução magnética a fim de reforçar a transparência dos resultados.

5. Conclusão: Descrevemos que neste estudo analisamos as configurações de vórtices em

sistemas supercondutores de uma e duas bandas, com foco na transição para o domínio IT. Os cálculos indicaram que a interação vórtice-vórtice se torna atrativa próximo à linha do meio no diagrama de fase, mas grandes clusters de vórtices ainda existem. Foi observado que em sistemas de duas bandas, a rede de vórtices se quebra em clusters à medida que a temperatura diminui. Além disso, o modelo de dois bandas pode ser utilizado para obter uma descrição qualitativamente correta do domínio IT que é observado nos supercondutores de uma única banda.

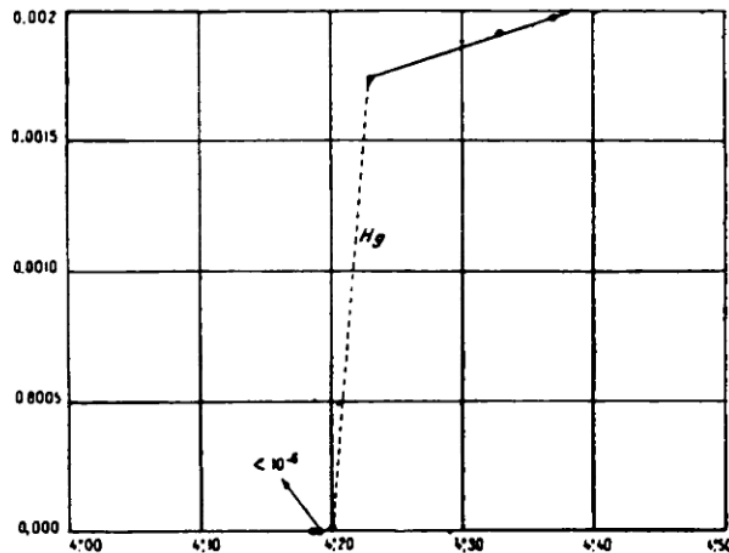
6. Perspectivas/Trabalhos Futuros: Abordamos que o estudo das configurações de vórtices em sistemas supercondutores de duas bandas no domínio IT apresenta um grande potencial para o desenvolvimento de novos materiais e aplicações tecnológicas. O texto apresenta três tópicos para pesquisas futuras: análise do transporte de corrente, efeitos de gradiente de temperatura e investigação das transições de fase em supercondutores de duas bandas com diferentes geometrias. Essas pesquisas podem gerar avanços na compreensão da supercondutividade e suas propriedades, resultando em descobertas significativas com impactos na ciência e tecnologia.



## 2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

O fascinante fenômeno da supercondutividade foi descoberto por Kamerlingh Onnes em 1911 (ONNES, 1911), quando o mercúrio foi resfriado a cerca de 4,2 K. Onnes descobriu que a resistividade  $\rho(T)$  desapareceu em uma determinada temperatura, denominada temperatura crítica  $T_c$  em que o material passa do estado metálico normal para o estado supercondutor como pode ser observada na Fig. 1. A condutividade elétrica  $\sigma$  é o inverso de  $\rho$ . Quando  $\rho$  vai

Figura 1 – Queda abrupta no valor da resistividade do mercúrio quando o material atinge temperatura da ordem de 4,2K.



Fonte: (ONNES, 1911)

para zero, a condutividade vai para o infinito e o metal se torna um supercondutor.

Embora o fato da resistência ser zero seja espetacular, foi preciso um novo experimento e novos conceitos derivados desse experimento para fornecer o próximo avanço na compreensão da supercondutividade. Em 1933, Meissner e Ochsenfeld (MEISSNER; OCHSENFELD, 1933) descobriram que os supercondutores não apenas exibiam resistência zero, mas também expeliam espontaneamente todo o fluxo magnético quando resfriados através da transição supercondutora, isto é, eles também são diamagnetos perfeitos. Esse comportamento ficou conhecido como efeito Meissner. O diamagnetismo perfeito é uma propriedade independente dos supercondutores e mostra que a supercondutividade envolve uma mudança de estado termodinâmico, não apenas uma mudança na resistência elétrica. Os experimentos que comprovaram o efeito Meissner foram realizados de duas formas:

1. Primeiro resfria-se a amostra até o estado supercondutor. Em seguida, aplica-se o campo magnético. A imposição de um campo magnético em qualquer condutor gera correntes induzidas. Conforme a lei de Lenz, as correntes atuam para gerar um campo magnético que se opõe ao imposto de fora. Em um condutor perfeito, essas correntes existirão para sempre e explicam o diamagnetismo perfeito. Ao fazer o experimento dessa maneira, não é óbvio que a exclusão do fluxo magnético seja uma característica do estado, ou apenas um resultado da supercondutividade para que as correntes parasitas nunca se extingam. Esse procedimento é conhecido como resfriamento a campo zero do inglês zero field cooling (ZFC).
2. Primeiro aplica-se o campo magnético externo enquanto a amostra está no estado normal a uma temperatura acima da temperatura crítica  $T_c$ . As correntes geradas pelo campo variável no tempo decairão para zero devido a perdas resistivas. Em seguida, o campo magnético penetra em toda a amostra. Em seguida o material é resfriado. Verifica-se que o fluxo magnético é excluído de qualquer maneira. Esse procedimento é conhecido com resfriamento com campo do inglês field cooling (FC).

Em 1935, os irmãos Fritz e Heinz London (LONDON; LONDON, 1935) propuseram uma teoria fenomenológica na tentativa de explicar as propriedades dos supercondutores. Utilizando o modelo de Drude para elétrons em um metal, eles derivaram uma equação, que agora é conhecida como equação de London, que descreve o campo eletromagnético em um volume supercondutor relacionando a corrente e o campo magnético através das equações de Maxwell. A teoria de London prevê a existência de uma escala de comprimento, conhecido como comprimento de penetração de London sobre o qual o campo magnético pode penetrar em um supercondutor através de um decaimento exponencial. Pippard posteriormente desenvolveu a generalização não local da eletrodinâmica de London e introduziu o conceito de comprimento de coerência sobre o qual a supercorrente pode variar (PIPPARD, 1953). No entanto, as teorias de London e Pippard, foram incapazes de descrever várias propriedades fundamentais dos supercondutores. Em particular, elas não abordam a distribuição espacial dos portadores de elétrons supercondutores. Nos anos seguintes F. London articulou a idéia mais profunda de que a teoria de alguma forma decorreu do fato de que os elétrons supercondutores estavam em um estado quântico macroscópico. No entanto, foi somente quando Ginzburg e Landau introduziram sua famosa teoria fenomenológica da supercondutividade em 1950 (GINZBURG; LANDAU, 1950b) que essa ideia foi incorporada em uma teoria formal. Ginzburg e Landau

postularam a existência de uma função de onda macroscópica (ou parâmetro de ordem) para descrever o comportamento dos elétrons supercondutores. Como constataremos a teoria de London e o comprimento de penetração seguem diretamente deste postulado.

## 2.1 TEORIA DE GINZBURG-LANDAU

A quantidade fundamental na teoria de Ginzburg-Landau é o parâmetro de ordem complexo  $\Psi(\vec{r})$ , que pode ser interpretado como uma função de onda supercondutora. A ideia é que, abaixo de  $T_c$ , o valor médio da função de onda é não nulo, ou seja,  $\langle \Psi \rangle \neq 0$  e o material está no estado supercondutor, enquanto acima de  $T_c$ , o valor médio permanece nulo e o material se encontra no estado de condução normal. Seja  $F[\Psi(\vec{r})]$  o funcional que representa a diferença de energia livre entre o estado supercondutor e o estado normal. Segue que o valor de equilíbrio de  $F$  deve ser positivo acima de  $T_c$  tal que a energia livre do estado normal seja menor que a energia livre no estado supercondutor e que  $F$  deve ser negativo abaixo de  $T_c$ . Portanto,  $F(T_c) = 0$ . Na vizinha de  $T_c$ , podemos expandir a energia livre em potência de  $\Psi$ . Os argumentos de simetria impõem que os únicos termos possíveis na expansão são aqueles envolvendo potências pares de  $\Psi$ . Assim, no caso onde  $\Psi(\vec{r})$  não depende da posição  $\vec{r}$ , obtemos simplesmente:

$$F(\Psi) = \int dV \left( \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 \right) \quad (2.1)$$

Essa é conhecida como a expansão de Landau da energia livre. O coeficiente  $\beta$  deve ser positivo, caso contrário, a energia livre não seria limitada no espaço. Para entender o significado do coeficiente  $\alpha$ , minimizamos o funcional de energia livre tomando sua derivada com respeito a  $\Psi^*$ , pois sabemos que no equilíbrio a energia livre deve assumir seu valor mínimo:

$$\frac{\partial F}{\partial \Psi^*} = \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad (\alpha + \beta |\Psi|^2) \Psi = 0, \quad (2.2)$$

portanto, as soluções possíveis são:

$$|\Psi| = 0, \quad \text{ou} \quad |\Psi| = |\Psi_\infty| = \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}} \quad (2.3)$$

que respectivamente correspondem ao estado normal  $\Psi = 0$  e ao estado supercondutor  $\Psi \neq 0$  e a notação  $|\Psi_\infty|$  representa o valor absoluta do parâmetro de ordem no estado de equilíbrio. Dessa forma, as soluções possíveis para a energia livre são  $F = 0$  ou  $F = -\alpha^2/2\beta$ , e se a solução supercondutora existe, ela fornece um mínimo global da energia livre.

Por  $\beta$  ser positivo, essa solução só pode ter significado físico quando  $\alpha$  é negativo. Consequentemente, o estado normal é um mínimo global e  $\Psi = 0$  para  $\alpha > 0$ , enquanto o estado supercondutor é um mínimo global e  $\Psi \neq 0$  para  $\alpha < 0$ . Essa análise nos permite concluir que  $\alpha$  deve se anular e mudar o sinal em  $T_c$ :

$$\alpha = \alpha_0(T - T_c). \quad (2.4)$$

Substituindo essa forma de  $\alpha$ , concluímos que o parâmetro de ordem  $\Psi$  deve escalar com temperatura na forma:

$$|\Psi| \propto \tau, \quad (2.5)$$

onde  $\tau = \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}$ . Portanto, o parâmetro de ordem supercondutor se anula a medida que o sistema se aproxima da temperatura crítica por baixo com uma dependência de raiz quadrada.

Vamos agora considerar o caso geral onde o parâmetro de ordem  $\Psi(\vec{r})$  não é constante. Neste caso, precisamos incorporar termos do tipo  $|\nabla\Psi|^2$  na expansão de energia livre. O coeficiente desse termo necessariamente deve ser positivo, dado que o sistema paga energia se a função de onda não é uniforme. O campo magnético pode ser acoplado simplesmente trocando gradiente pelo gradiente gauge invariante  $\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\vec{A}$ , onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor. Dessa forma, o funcional de energia livre proposto por Ginzburg-Landau pode ser expresso por:

$$F[\Psi, \vec{A}] = \int dV \left( (\alpha + \frac{\beta}{2})|\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left| \left( \frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\vec{A} \right) \Psi \right|^2 + \frac{B^2}{8\pi} \right) \quad (2.6)$$

o penúltimo termo corresponde a energia cinética e o último termo a energia magnética, onde  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  é a indução magnética e  $H$  o campo magnético externo aplicado.

A teoria de Ginzburg-Landau prevê a existência de um campo magnético crítico como função da temperatura  $H_c(T)$  capaz de destruir o estado supercondutor, ou seja, acima de  $H_c(T)$  o material passa do estado supercondutor para o estado normal. Em um campo magnético aplicado constante  $H$  (ou seja, o campo devido a fontes de corrente externas), a energia livre de Gibbs é mais apropriada, e é obtida pela transformação de Legendre:

$$G = F - \frac{\vec{B} \cdot \vec{H}}{4\pi}. \quad (2.7)$$

Vejamos como determinar o campo  $H_c(T)$ . No estado normal, a indução magnética coincide com o campo externo aplicado,  $\vec{B} = \vec{H}$  e portanto:

$$g_n = -\frac{\mu_0}{2} H^2 \quad (2.8)$$

enquanto que no estado supercondutor  $\vec{B} = 0$  e  $|\Psi| = \psi_\infty = \sqrt{-\alpha/\beta}$  tal que

$$g_s = \left(\alpha + \frac{\beta}{2}\psi_\infty^2\right)\psi_\infty^2 = -\frac{\alpha^2}{2\beta} \quad (2.9)$$

quando  $g_s < g_n$ , ou seja,

$$H < H_c = \frac{\alpha^2}{\beta}, \quad \text{campo crítico termodinâmico} \quad (2.10)$$

o estado supercondutor é termodinamicamente estável e a densidade de energia livre do supercondutor se relaciona com o campo crítico termodinâmico da forma

$$g_s = -\frac{\alpha^2}{2\beta} = -\frac{\mu_0}{2}H_c^2. \quad (2.11)$$

Para campos acima de  $H_c$ , o sistema se torna normal. Isso seria decepcionante, já que para supercondutores típicos esse campo crítico seria apenas algumas centenas de gauss mesmo em baixas temperaturas. Felizmente, o comportamento na presença de um campo magnético aplicado é mais complicado do que isso, e em alguns materiais a supercondutividade persiste até campos muito mais altos, um resultado vital para as aplicações tecnológicas comuns hoje como veremos mais na frente, com os chamados supercondutores do tipo-II.

### 2.1.1 Equações de Ginzburg-Landau

As equações de Ginzburg-Landau são um conjunto acoplado de equações diferenciais não lineares usadas para descrever as propriedades macroscópicas de um supercondutor. A primeira equação descreve variações em um parâmetro de ordem contínuo  $\Psi$ , enquanto a segunda equação descreve variações em um potencial vetorial real  $\vec{A}$ . Como as equações são derivadas da expansão do funcional de energia livre, elas só permanecem válidas na proximidade da temperatura de transição  $T_c$ .

Para derivar as equações de equilíbrio, notamos que precisamos minimizar a energia livre com respeito ao parâmetro de ordem  $\Psi$  e ao potencial vetor  $\vec{A}$ . Para simplificar os cálculos é conveniente escrevermos o termo que envolve o módulo quadrado do gradiente gauge invariante

de forma explícita  $|-i\nabla - \vec{A}\Psi|^2$

$$\begin{aligned} \frac{1}{4m} \left| \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{2e}{c} \vec{A} \right) \Psi \right|^2 &= \frac{1}{2m^*} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi + \frac{e^*}{c} \vec{A} \Psi \right) \cdot \left( \frac{-\hbar}{i} \nabla \Psi^* + \frac{e^*}{c} \vec{A} \Psi^* \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4m} (\nabla \Psi) \cdot (\nabla \Psi^*) - \frac{i\hbar e}{mc} \Im(\Psi^* \nabla \Psi) \cdot \vec{A} + \frac{e^2 A^2}{mc^2} |\Psi|^2 \quad (2.12) \\ &= \sum_i \frac{\hbar^2}{4m} \partial_i \Psi \partial_i \Psi^* - \sum_i \frac{\hbar e}{mc} \Im(\Psi^* \partial_i \Psi) + \sum_i \frac{e^2 A_i^2}{mc^2} |\Psi|^2 \end{aligned}$$

onde, na última linha, expressamos a equação na notação de índices para facilitar a manipulação algébrica. A minimização do funcional  $G[\Psi, \vec{A}]$  com respeito a  $\Psi^*$  fornece a equação de movimento do tipo Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \Psi^*} - \sum_j \partial_j \frac{\partial G}{\partial (\partial_j \Psi^*)} &= 0 \\ \Rightarrow (\alpha + \beta |\Psi|^2) \Psi + \frac{e^2 A^2}{mc^2} \Psi - \sum_i \frac{i\hbar e}{2mc} (\partial_i \Psi) A_i - \sum_j \partial_j \left[ \frac{\hbar^2}{4m} \partial_j \Psi + \frac{i\hbar e}{2mc} \Psi A_j \right] &= 0 \quad (2.13) \\ \therefore (\alpha + \beta |\Psi|^2) \Psi + \frac{1}{4m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{2e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi &= 0. \end{aligned}$$

Essa é conhecida como a primeira equação de Ginzburg-Landau, que também pode ser derivada por variações no próprio funcional, da mesma forma que derivamos em cursos de mecânica clássica as equações de Euler-Lagrange a partir da ação do sistema. Ao realizar o procedimento variacional, deve-se impor condições de contorno. Uma escolha possível, que garante que nenhuma supercorrente flua através da fronteira, é:

$$\hat{n} \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \Psi = 0, \quad (2.14)$$

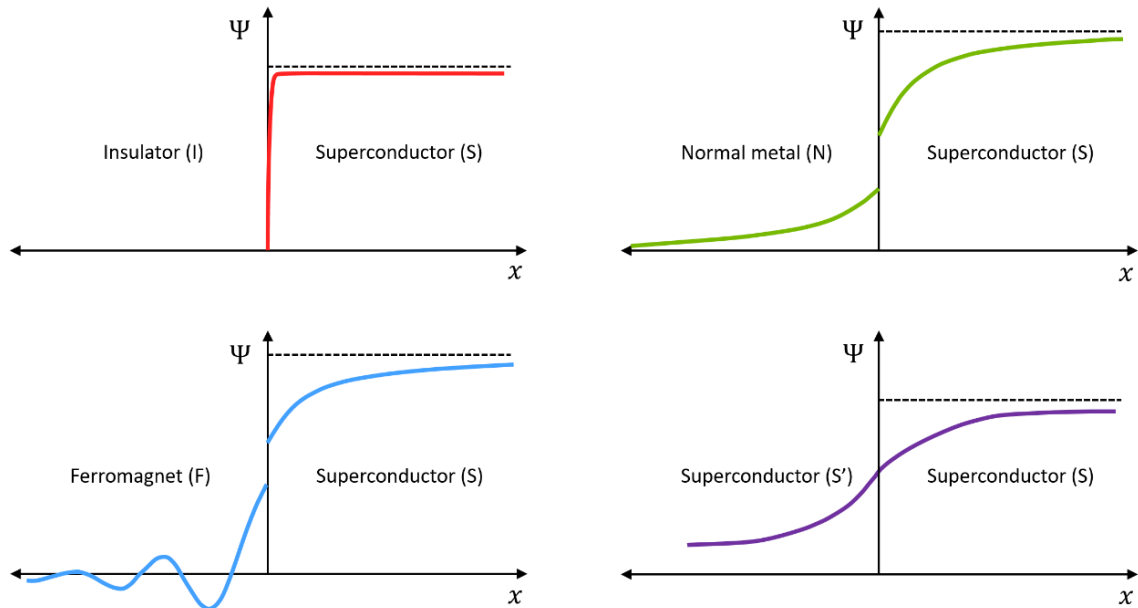
onde  $\vec{n}$  é o vetor normal unitário a superfície supercondutora.

Seguindo a suposição de que o parâmetro de ordem mantém a inclinação de decaimento além do supercondutor como em sua superfície, as condições de contorno podem ser generalizadas para outras fronteiras (TINKHAM, 1996):

$$\hat{n} \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \Psi = \frac{i}{b} \Psi \quad (2.15)$$

onde  $b$  é o comprimento de extrapolação que mede a distância de fora da fronteira (no metal normal) onde o parâmetro de ordem cai para zero, originalmente conhecido como parâmetro de de Gennes. O comprimento de extrapolação pode ser usado para modelar quatro tipos diferentes de fronteiras, conforme mostrado na Fig. 2. Geralmente, para fronteiras do tipo

Figura 2 – Comportamento do parâmetro de ordem para diferentes tipos de interfaces: interface SI no canto superior esquerdo, interface SN no canto superior direito, interface SF no canto inferior esquerdo e interface SS' no canto inferior direito.



Fonte: (STOSIC, 2018)

vácuo/isolante (SV e SI), o parâmetro de ordem cai abruptamente para zero e  $b$  tende para o infinito. Na fronteira com metais normais (SN),  $b$  assume valores positivos e é finito. Finalmente, um valor negativo e finito de  $b$  é usado para a fronteira entre dois supercondutores com diferentes parâmetros de material (SS).

**Segunda equação de Ginzburg-Landau:** para derivar a minimização do funcional de energia livre com respeito ao potencial vetor  $\vec{A}$ , é conveniente reescrevermos a contribuição magnética na forma:

$$\frac{B^2}{8\pi} = \frac{1}{8\pi} |\nabla \times \vec{A}|^2 = \frac{1}{8\pi} \sum_{i,j,k,l,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} \partial_j A_k \partial_l A_m \quad (2.16)$$

onde,  $\varepsilon_{ijk}$  é o símbolo antissimétrico de Levi-Civita que vale 1 para uma permutação cíclica dos índices  $(i, j, k)$ ,  $-1$  para uma permutação anti-cíclica, e 0 para quaisquer dois índices

repetidos. A equação de movimento para  $\vec{A}$  é então escrita como:

$$\frac{\partial G}{\partial A_p} - \sum_q \partial_q \frac{\partial G}{\partial (\partial_q A_p)} = 0$$

$$\frac{\hbar e}{mc} \Im(\Psi^* \partial_p \Psi) + \frac{2e^2 A_p}{mc^2} |\Psi|^2 - \frac{1}{4\pi} \sum_{i,q,l,m} \varepsilon_{iqp} \varepsilon_{ilm} \partial_q \partial_l A_m = 0 \quad (2.17)$$

$$\therefore \frac{\hbar e}{mc} \Im(\Psi^* \nabla \Psi) + \frac{2e^2 \vec{A}}{mc^2} |\Psi|^2 + \frac{1}{4\pi} \nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = 0$$

Utilizando a equação de Maxwell,  $\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}$ , obtemos uma equação para a densidade de supercorrente:

$$\vec{J}_S = \frac{e\hbar}{m} \Im(\Psi^* \nabla \Psi) - \frac{2e^2 \vec{A}}{mc} |\Psi|^2 \quad (2.18)$$

Apesar de não haver condições de contorno explícitas para a segunda equação de GL, a condição de contorno para o potencial vetor  $\vec{A}$  é aquela em que o campo magnético local muito distante da interface supercondutor/vácuo é igual ao campo magnético aplicado:

$$(\nabla \times \vec{A}) \times \hat{n} = \vec{H}_a \times \hat{n}. \quad (2.19)$$

### 2.1.2 Comprimentos Característicos

A teoria de Ginzburg-Landau prevê duas escalas de comprimento características: o comprimento de coerência  $\xi(T)$  e a profundidade de penetração  $\lambda(T)$ . O comprimento de coerência descreve a escala de comprimento sobre a qual o parâmetro de ordem recupera seu valor de equilíbrio após ser perturbado localmente, enquanto o comprimento de penetração descreve o comprimento que um campo magnético externo penetra em um supercondutor. Ambos os comprimentos característicos quantificam as propriedades fundamentais dos supercondutores e podem ser derivados das equações de Ginzburg-Landau.

**Comprimento de Penetração:** O comprimento de penetração é derivado da segunda equação de Ginzburg-Landau, considerando um campo magnético fraco e um parâmetro de ordem que é constante  $\Psi = \Psi_0$  de forma que a Eq. (2.17) assume a forma

$$\frac{1}{4\pi} \nabla \times \vec{B} = \frac{e^2}{mc} |\Psi_0|^2 \vec{A}, \quad (2.20)$$



onde  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  segue da definição de potencial vetor. Aplicando o operador rotacional em ambos os lados da Eq. (2.20) obtemos

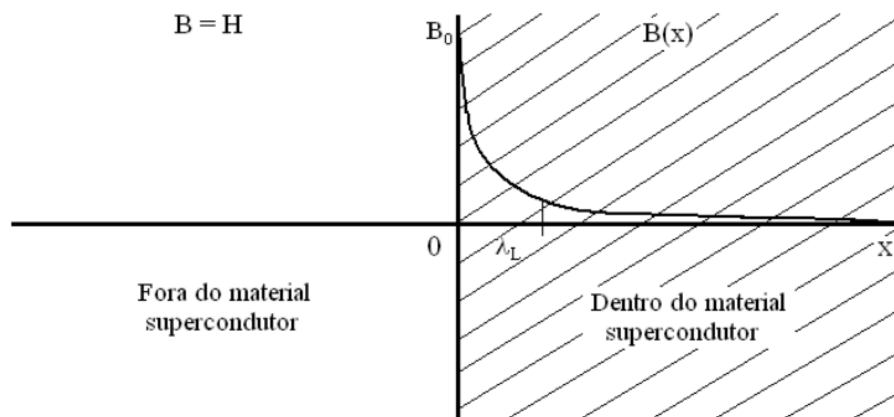
$$\nabla \times \nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi e^2}{mc} |\Psi_0|^2 \vec{B}. \quad (2.21)$$

Sem perda de generalidade, ao analisarmos o problema em uma dimensão, assumindo as condições de contorno  $\vec{B}(0) = \vec{B}_0$ , e  $\vec{B}(x \rightarrow \infty) = 0$  em um supercondutor no semi-espaço positivo  $x > 0$  com uma interface normal em  $x = 0$ , a solução da Eq. (2.21) tem a forma  $\vec{B} = \vec{B}_0 e^{-x/\lambda}$  onde,

$$\lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi |\Psi_0|^2 e}}, \quad (2.22)$$

é conhecido como comprimento de penetração. Essa solução mostra que o campo magnético é atenuado no interior do material supercondutor, e o comprimento característico dessa atenuação é representado pelo parâmetro  $\lambda$ . Sendo assim, um campo magnético externo de amplitude  $B_0$  decai exponencialmente à medida que penetra na amostra supercondutora. Isto explica de maneira satisfatória a exclusão das linhas de campo magnético no interior do material supercondutor, o efeito Meissner. Podemos visualizar esse comportamento através da Fig. 3 Como o comprimento de penetração depende de  $\Psi_0$  e conseqüentemente de  $\alpha$ , ele também

Figura 3 – Atenuação do campo magnético no interior de um material supercondutor, conhecido como efeito Meissner.



Fonte: (PEREIRA1, 2013)

possui dependência com a temperatura da forma  $\lambda(T) \propto (1 - T/T_c)^{-1/2}$  e é descontínuo em  $T = T_c$ .

**Comprimento de Coerência:** Outra quantidade tem a propriedade de caracterizar o estado supercondutor mesmo na ausência de campo magnético externo, e esta quantidade é conhecida como comprimento de coerência. Da primeira equação de Ginzburg-Landau (2.13),

considerando o caso onde o campo magnético aplicado é nulo e o parâmetro de ordem  $\Psi$  varia apenas em uma dimensão, segue que:

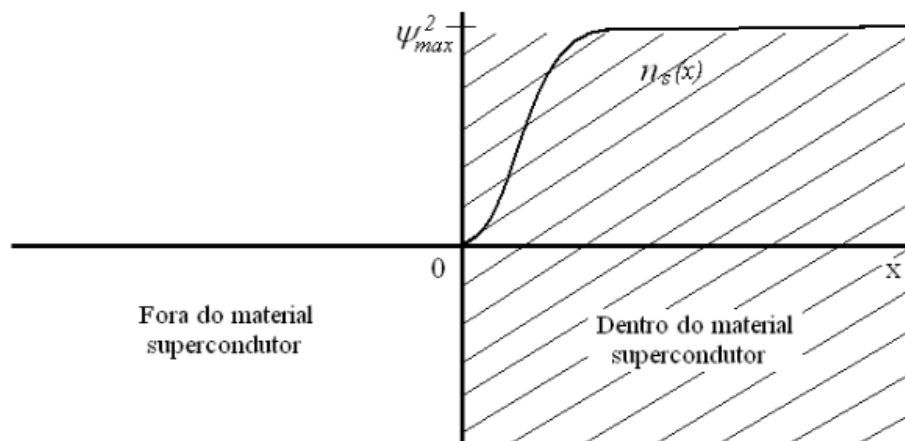
$$-f + f^3 - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2 f}{dx^2} = 0, \quad (2.23)$$

onde,  $f(x) = \Psi(x)/\Psi_0$  é o parâmetro de ordem normalizado para seu estado de energia livre mais baixo (equilíbrio)  $\Psi_0 = \sqrt{-\alpha/\beta}$ . Assumindo as condições de contorno  $f(0) = 0$  e  $f(x \rightarrow \infty) = 1$  em um supercondutor morando no semi-eixo positivo  $x > 0$  com uma fronteira normal em  $x = 0$ , a solução da Eq. (2.23) é dada por

$$f(x) = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) \quad (2.24)$$

que se anula em  $x = 0$  e tende a 1 quando  $x$  é suficientemente grande, como impomos nas condições de contorno, já que a supercondutividade deve se anular na parede do material e ter um valor máximo (normalizado) no seu interior.  $\xi$  é conhecido como comprimento de coerência. Isso significa que o parâmetro de ordem muda ao longo de uma distância característica da ordem do comprimento de coerência  $\xi$  como pode ser observado na Fig. 4: Como o

Figura 4 – Comportamento da densidade de superelétrons  $|\Psi|^2$  dentro do material supercondutor.



Fonte: (PEREIRA1, 2013)

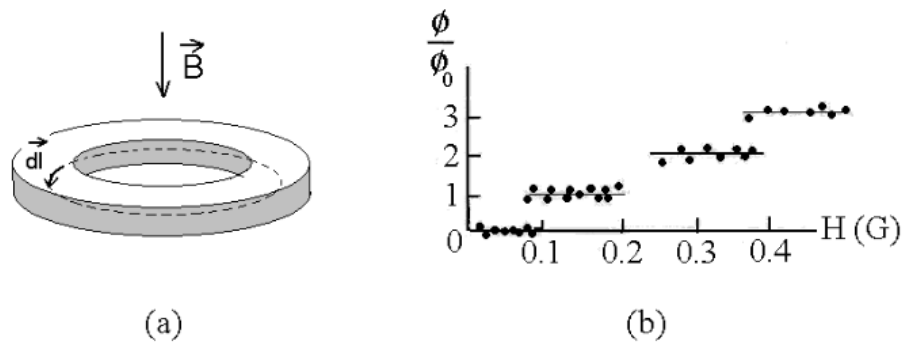
comprimento de coerência depende de  $\alpha$ , ele também depende da temperatura da forma  $\xi(T) \propto (1 - T/T_c)^{-1/2}$  e é descontínuo em  $T = T_c$ .

### 2.1.3 Quantização de Fluxo Magnético

Como exemplo de aplicação das equações de GL, escolhemos um caso simples onde a amplitude do parâmetro de ordem não varia com a posição na amostra. Esta aplicação mostra

que o fluxo magnético através de um supercondutor multiplamente conexo deve ser quantizado. Consideremos uma amostra na forma de um anel submetida a um campo magnético, tal como representa a Fig. 5. Tracemos, então, uma trajetória fechada imaginária no interior do anel que esteja suficientemente afastada da superfície, de modo que não fluam correntes nesta região. Assumindo que o parâmetro de ordem tem a forma  $\Psi = |\Psi|e^{i\theta}$ , onde  $|\Psi|$  representa a

Figura 5 – Anel supercondutor na presença de um campo magnético. A trajetória fechada, que é representada em linha pontilhada, está no interior do anel, afastada das superfícies, de modo que a densidade de corrente seja nula nesta região. (b) Fluxo magnético aprisionado num anel de estanho.



Fonte: (PUREUR, 2012)

magnitude e  $\theta$  a fase do parâmetro de ordem, a Eq. (2.18) pode ser reescrita como:

$$\vec{J}_S = \frac{e\hbar}{m}|\Psi|^2\nabla\theta - \frac{2e^2}{mc}\vec{A}|\Psi|^2, \quad (2.25)$$

explicitando o potencial vetor, temos que:

$$\vec{A} = \frac{c\hbar}{2e}\nabla\theta - \frac{mc}{2e^2|\Psi|^2}\vec{J}_S \quad (2.26)$$

Integrando a equação acima em um caminho fechado  $C$ , o qual limita a superfície  $S$ , notando que  $\oint_C \vec{J}_S \cdot d\vec{l} = 0$ ,

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{-\hbar c}{2e} \oint_C \nabla\theta \cdot d\vec{l} \quad (2.27)$$

aplicando o teorema de Stokes, que mostra que a integral de linha do potencial vetor ao longo da trajetória fechada é igual ao fluxo magnético  $\Phi$  através da área delimitada pelo anel, ou seja

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{S} = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi. \quad (2.28)$$

Como a fase  $\theta$  pode assumir apenas valores múltiplos de  $2\pi$  do ponto inicial ao ponto final do caminho, obtemos

$$\Phi = \frac{\hbar c}{2e}n = \Phi_0 n \quad (2.29)$$

onde  $n$  é um inteiro arbitrário. Portanto, o fluxo magnético em uma região normal dentro de um supercondutor deve ser um múltiplo do *quantum* de fluxo,  $\Phi_0 \approx 2.07 \times 10^{-15} T.m^2$ , e esse *quantum* de fluxo recebe o nome de vórtice. Portanto, vórtices em supercondutores podem ser visualizados como tubos de fluxo magnético, ou equivalentemente, circuitos de corrente cilíndricos, que penetram em uma amostra de material.

A observação experimental da quantização do fluxo magnético num anel supercondutor, tal como está representada na Fig. 5 (b) constitui-se numa evidência direta e contundente da natureza quântica-macroscópica do estado supercondutor. Ademais, o valor do *quantum* de fluxo demonstra que a carga da quasipartícula é efetivamente igual a duas vezes a carga do elétron.

#### 2.1.4 Classificação dos Supercondutores

Quando o campo externo  $H = H_c$ , a densidade de energia livre do estado normal e do supercondutor coincidem tal que duas fases podem coexistir. A fronteira entre o supercondutor degenerado e a fase normal recebe o nome especial de parede de domínio, onde a energia livre de Gibbs por unidade de área define a energia de superfície  $\sigma_{sn} = \Delta G/A$ , onde  $A$  é a área da fronteira. Na fronteira, o parâmetro de ordem supercondutor e o campo magnético decaem para zero em escalas de comprimento da ordem do comprimento de coerência  $\xi$  e comprimento de penetração  $\lambda$ , respectivamente. A energia de superfície superficial  $\sigma_{sn}$  da parede de domínio entre o supercondutor e a fase normal tem uma profunda influência no comportamento macroscópico do supercondutor, e o parâmetro especial que controla a energia de superfície é a razão entre o comprimento de penetração e o comprimento de coerência sendo conhecido como parâmetro de Ginzburg-Landau

$$\kappa = \lambda/\xi. \quad (2.30)$$

O parâmetro  $\kappa$  pode ser interpretado da seguinte forma: considere que  $A_{sn}$  denota a área da fronteira supercondutor/normal. Então, um volume  $A_{sn}\lambda$  na parede do domínio é penetrado pelo campo magnético, preservando uma energia diamagnética de:

$$G_m = -\frac{A_{sn}\lambda}{2\mu_0} H_c^2 \quad (2.31)$$

Ao mesmo tempo, o estado supercondutor é suprimido dentro de um volume de cerca de  $A_{sn}\xi$ , levando a uma supressão da energia do condensado:

$$G_c = \frac{A_{N/S}\xi}{2\mu_0} H_c^2 \quad (2.32)$$

Portanto, a densidade de energia superficial na fronteira  $\sigma_{N/S}$  definida como a variação de energia por unidade de área da *interface*:

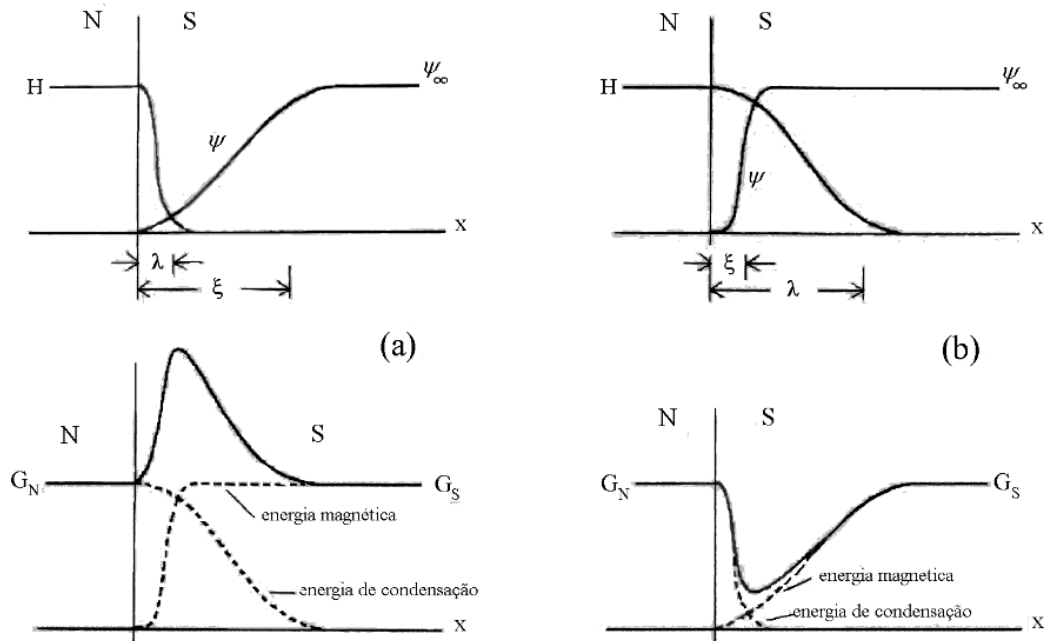
$$\sigma_{sn} = \frac{G_c - G_m}{A_{sn}} = \frac{H_c^2}{2\mu_0} \delta. \quad (2.33)$$

onde  $\delta = \xi - \lambda$ , representa a espessura da *interface*.

Em supercondutores do tipo I ( $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ ), com uma energia de parede domínio positiva ( $\sigma_{sn} > 0$ ), campos magnéticos são vigorosamente excluídos do material por uma fina camada superficial de correntes de blindagem e quando  $H = H_c$  ocorre uma transição de fase de primeira ordem para o estado normal.

Nos supercondutores do tipo II, que possuem uma energia de interface negativa ( $\sigma_{sn} < 0$ ), a camada superficial das correntes de blindagem é espalhada na escala do comprimento de coerência e o campo magnético penetra muito mais no supercondutor. Existem agora dois campos críticos, um campo crítico superior  $H_{c2} > H_c$  e um campo crítico inferior  $H_{c1} < H_c$ . Entre esses dois campos,  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , o campo magnético penetra no volume, formando vórtices em que a alta energia do núcleo normal é compensada pela energia de superfície negativa da camada de correntes de blindagem. A Fig. 6 exibe a energia de interface normal-supercondutor. Em outras palavras, em supercondutores do tipo I, o comprimento de coerência é muito grande de modo que a energia do condensado é descompensada pela energia magnética, gerando uma energia superficial positiva. Em contraste, nos supercondutores do tipo II, o comprimento de penetração é muito grande e a energia magnética não compensa a energia do condensado, levando a uma energia superficial negativa. O ponto  $\kappa = \kappa_0 = 1/\sqrt{2}$  é a linha divisória entre as duas classes de supercondutores, e é conhecido como ponto de Bogolmonyi. Em  $\kappa_0$  a energia de interface se anula e os vórtices não contribuem com energia para o sistema tal que qualquer configuração de vórtice é energeticamente igual, o que leva ao estado condensado ser infinitamente degenerado e é um dos pontos de partida para entender o regime intertipo.

Figura 6 – (a) Energia de superfície positiva para supercondutores de tipo I ( $\kappa > 1$ ) e (b) energia de superfície negativa para supercondutores de tipo II ( $\kappa < 1$ ).



Fonte: (PUREUR, 2012)

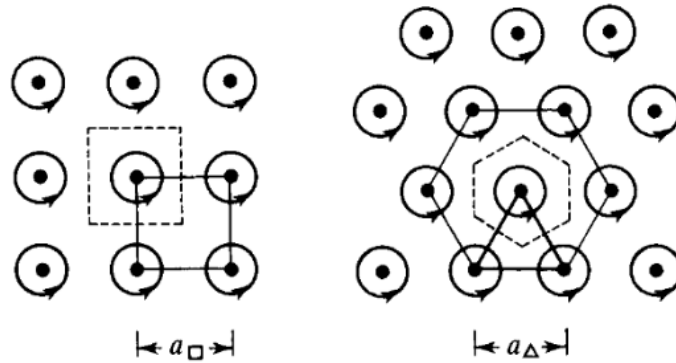
### 2.1.5 Rede de Vórtices de Abrikosov

A energia de superfície negativa em supercondutores do tipo II, leva a formação do estado de vórtices ou estado misto. Os vórtices no estado normal são conhecidos como "linhas de vórtices de Abrikosov", dado que correntes supercondutoras circulam na região supercondutora ao redor desses vórtices. O estado de vórtice é estável entre  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  porque a penetração do campo aplicado no supercondutor faz com que a energia de superfície seja negativa. No supercondutor, as linhas de vórtice podem formar uma rede quadrada ou uma rede triangular regular quando vistas ao longo da direção do campo magnético aplicado. A rede triangular ou hexagonal é energeticamente mais favorável pois a distância entre os vórtices vizinhos mais próximos é maior do que na rede quadrada o que faz sentido considerando que os vórtices se repelem mutuamente e conseqüentemente é razoável suportar que a estrutura com maior separação entre mais próximos seja favorecida energeticamente. A distância entre os vizinhos é da forma:

$$a_{\Delta} = 1.075 \left( \frac{\Phi_0}{B} \right)^{1/2}, \quad a_{\square} = \left( \frac{\Phi_0}{B} \right)^{1/2} \quad (2.34)$$

Na Fig. 7 abaixo podemos observar um diagrama esquemático de arranjos de vórtices quadrados e triangulares. As linhas tracejadas descrevem a célula unitária básica. Em geral, ex-

Figura 7 – Arranjo de vórtices de Abrikosov.



Fonte: (TINKHAM, 1996)

perimentos confirmam o arranjo hexagonal, contudo, em alguns materiais, as simetrias da estrutura cristalina subjacente parecem dominar a pequena diferença teórica de energia para um meio sem estrutura, levando à observação de matrizes quadradas ou mesmo retangulares. Além disso, defeitos no material podem introduzir heterogeneidade suficiente para destruir completamente a matriz regular, levando à observação de uma matriz de vórtices vítreos em vez de cristalinos.

Para discussão do campo de nucleação de um supercondutor em uma amostra volumétrica na presença de campos  $\vec{H}$  ao longo do eixo  $\hat{z}$ , demonstrado por Abrikosov em 1957 motivado por medições de curvas de magnetização em filmes finos (ABRIKOSOV, 1957b), consideramos a equação de GL na forma:

$$\left( -i\nabla - \frac{2\pi}{\Phi_0} \vec{A} \right)^2 \Psi = \frac{1}{\xi^2} \Psi. \quad (2.35)$$

que é válida apenas quando o parâmetro de ordem  $\Psi$  se torna muito menor que seu valor no interior do volume  $\Psi_\infty$  na presença de campos magnéticos.

No caso de um filme supercondutor no plano  $(x, y)$ , ou seja, um problema bi-dimensional, a escolha do calibre  $\vec{A} = xH\vec{y}$  transforma a equação para o parâmetro de ordem na forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial}{\partial y} - \frac{2\pi i B x}{\Phi_0} \right)^2 \right] \Psi = \frac{1}{\xi^2} \Psi \quad (2.36)$$

que é uma equação do tipo oscilador harmônico que pode ser solucionada de forma análoga aos níveis quantizados de uma partícula carregada em um campo magnético que leva as soluções de Landau (TINKHAM, 1996). Portanto, o mínimo de energia é conhecido e fornece o valor máximo de campo magnético:

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} = \sqrt{2\kappa} H_c. \quad (2.37)$$

onde,  $H_{c2}$  é denotado com o campo de nucleação da fase de vórtices. Essa relação com o campo termodinâmico  $H_c$  deixa claro que no ponto de Bogomolny  $\kappa_0$  separa os supercondutores do tipo II para os quais  $H_{c2} > H_c$  dos supercondutores do tipo I onde  $H_{c2} < H_c$ .

As autofunções que descrevem a rede de vórtices são compostas pela combinação linear das soluções obtidas na direção  $x$  e  $y$ :

$$\Psi(x, y) = \sum_{-\infty}^{\infty} C_n e^{ik_n y} e^{-\frac{1}{\xi^2} \left(x - \frac{k_n \xi^2}{H/H_{c2}}\right)^2}, \quad (2.38)$$

onde os coeficientes de expansão  $C_n$  e os números de onda  $k_n$  são definidos conforme a simetria da rede vórtices.

## 2.2 PROPRIEDADES DA MATÉRIA DE VÓRTICES

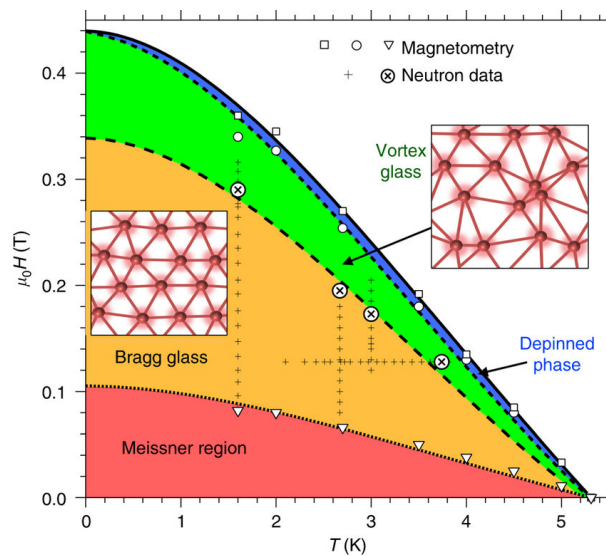
Os vórtices são defeitos topológicos no estado supercondutor, o que lhes confere estabilidade e propriedades de partículas. Diferentemente de átomos e moléculas, os vórtices são objetos alongados, como cordas, com propriedades elásticas. Eles estão sujeitos a uma variedade de interações, que afetam a rede de vórtice que formam. Vórtices imprimem uma variação do parâmetro de ordem, campo magnético e supercorrente para o estado supercondutor, que resulta em uma interação entre vórtices. Além disso, os vórtices interagem com impurezas dos materiais e defeitos na rede cristalina, onde o supercondutor é perturbado. Devido às suas propriedades magnéticas, os vórtices também são afetados por correntes elétricas por meio da força de Lorenz. A estreita relação dos vórtices com o campo magnético externo também os torna suscetíveis aos efeitos de desmagnetização. Além disso, eles são afetados por flutuações térmicas. As diferentes interações de vórtice são de magnitude e intervalo semelhantes e frequentemente mudam significativamente durante a fase supercondutora.

O estado da matéria de vórtice mais conhecido é a rede de vórtice de Abrikosov que foi descrito na seção anterior. Os vórtices se alinham ao longo de um campo externo e se organizam em uma rede bidimensional, devido à sua interação repulsiva. Dependendo da simetria do parâmetro de ordem e da estrutura cristalina do material, a rede comumente tem uma estrutura hexagonal. Na presença de desordem, principalmente devido a defeitos de rede ou impurezas no material supercondutor, os vórtices formam um estado amorfo ou vítreo (TOFT-PETERSEN et al., 2018; MüHLBAUER et al., 2009). Perto da transição para o estado normal, as escalas de comprimento  $\lambda$  e  $\xi$  divergem, o que aumenta o tamanho do vórtice e a faixa de interação. Além disso, aumentam as flutuações térmicas. Nessas condições, a fusão da matéria sólida de vórtice



em um estado líquido é possível (CUBITT et al., 1993). Em contraste com os estados sólidos, os vórtices são tipicamente emaranhados em um líquido. O estado intermediário misto é uma forma especial de matéria de vórtice, onde apenas parte do supercondutor contém vórtices. Regiões de estado Meissner livres de fluxo e regiões da rede de vórtices formam uma estrutura de domínio. As propriedades especiais do estado misto intermediário (IMS) são causadas por uma interação de vórtice não monotônica (KRAGELOH, 1969; AUER; ULLMAIER, 1973; VAGOV et al., 2016). A Fig. 8 mostra um diagrama de fase do vanádio supercondutor, onde três estados distintos da matéria de vórtice são encontrados: o vidro de Bragg, o vidro de vórtice verdadeiro e um estado líquido.

Figura 8 – Diagrama de fase dos diferentes estados da matéria do vórtice em vanádio baseado em magnetometria e experimentos de nêutrons.



Fonte: (TOFT-PETERSEN et al., 2018)

Geralmente, a matéria de vórtice em supercondutores também está interagindo com o material subjacente, especialmente a correlação próxima da rede cristalina e a superfície de Fermi eletrônica com a simetria do parâmetro de ordem supercondutor e o *gap*. Os efeitos desta interação podem ser observados, por exemplo, na simetria da rede de vórtice, que pode até mesmo sofrer transições estruturais no mesmo material. Os vários estados de vórtice geralmente podem ser facilmente manipulados por parâmetros experimentais, como campo magnético, temperatura ou pressão, o que lhes dá uma vantagem sobre suas contrapartes convencionais. Além disso, a matéria do vórtice fica sempre confinada à amostra supercondutora, o que simplifica o manuseio, principalmente para as fases líquidas.

### 2.2.1 Estrutura de um Vórtice

Anteriormente foi discutido que um supercondutor do tipo II ganha energia emergindo de várias interfaces normal-supercondutor. A unidade básica em que o sistema pode ser dividido acima de  $H_{c1}$  é um único vórtice magnético carregando um fluxo de valor  $\Phi_0$ . Uma estrutura menor não pode ser blindada pela supercorrente enquanto a condição de quantização de fluxo não for satisfeita. O núcleo do vórtice consiste em uma região condutora normal, onde o fluxo magnético atravessa a amostra, circundada por correntes de blindagem.

Quando o fluxo magnético penetra em um supercondutor tipo II, os vórtices são distribuídos esparsamente formando uma matriz por todo o material. Enquanto a separação for maior que  $\lambda$ , a interação entre os vórtices é desprezível, podendo-se tratá-los como isolados. Dada a simetria axial da situação, o problema se reduz a encontrar uma solução auto-consistente das equações GL para  $\psi$  e  $B(r)$ . Assim, pode-se calcular a energia livre extra  $G_1$  por unidade de comprimento da linha dada uma definição do campo crítico inferior  $H_{c1}$ , onde a energia livre de Gibbs deve ter o mesmo valor se o primeiro vórtice estiver dentro ou fora a amostra:

$$G_s|_{n=0} = G_s|_{n=1} \quad (2.39)$$

onde  $n = 0$  significa não haver nenhum fluxo magnético, e  $n = 1$  representa a entrada de 1 vórtice. Na ausência de fluxo, a energia de Gibbs coincide com a de Helmholtz, e a condição se torna:

$$F_s = F_s + G_1 L - \frac{H_{c1} \int B dr}{4\pi} = F_s + G_1 L - \frac{H_{c1} \Phi_0 L}{4\pi} \quad (2.40)$$

onde  $L$  é o comprimento da linha de vórtice na amostra. Com isso, obtemos uma relação para o primeiro campo crítico  $H_{c1}$  onde começa a penetração de vórtices:

$$H_{c1} = \frac{4\pi G_1}{\Phi_0}. \quad (2.41)$$

Antes de apresentar a forma da energia da linha de vórtice, precisamos entender o comportamento da indução magnética na chamada aproximação *high- $\kappa$* .

Como o parâmetro de ordem recupera seu valor unitário em distâncias da ordem do comprimento de coerência  $\xi$ , podemos realizar uma aproximação conveniente assumindo que  $\lambda \gg \xi$ , ou equivalentemente quando  $\kappa \gg 1$ . Quando  $\Psi \approx 1$ , a equação que governa a indução magnética e correntes supercondutores fora do núcleo exceto em uma região do núcleo de raio  $\xi$ , é simplesmente a equação de London (2.21). Entretanto, agora com uma parte não homogênea

que indexa a posição do núcleo por um delta de Dirac:

$$\nabla \times \vec{B} - \frac{1}{\lambda^2} \vec{B} = -\frac{\Phi_0}{\lambda^2} \delta(\vec{r}) \hat{z} \quad (2.42)$$

A solução exata dessa equação é:

$$B(r) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (2.43)$$

onde,  $K_0$  é a função de Bessel modificado de ordem zero. A longa distância,  $K_0(r/\lambda) \approx e^{-r/\lambda}$  enquanto que quando  $r \rightarrow 0$ ,  $K_0(r/\lambda) \approx \ln(r/\lambda)$ , de forma que em  $r \approx \xi$ , onde  $|\Psi|^2$  começa a cair para zero,  $B(r)$  é regular no centro do vórtice.

A energia livre por unidade de comprimento da linha de vórtice  $G_1 = G/L$  é determinada pela combinação das contribuições da energia magnética e da energia cinética das correntes, se o núcleo do vórtice for negligenciado. Em outras palavras, a forma da energia da linha de vórtice  $G_1$  é determinada apenas pela energia magnética e cinética quando o núcleo do vórtice é ignorado.

$$G_1 = \frac{1}{8\pi} \int (B^2 + \lambda^2 |\nabla \times \vec{B}|^2) dA \quad (2.44)$$

Considerando  $\hat{z}$  o versor unitário na direção ao longo do vórtice e  $\delta(\vec{r})$  a função delta de Dirac na localização do núcleo do vórtice, a energia assume a forma:

$$G_1 = \frac{1}{8\pi} \int |\vec{B}| \Phi_0 \delta(\vec{r}) dA + \frac{\lambda^2}{8\pi} \oint (\vec{B} \times \nabla \times \vec{B}) \cdot d\vec{l} \quad (2.45)$$

onde as integrais de caminho ao redor do perímetro interno e externo da integração excluem o núcleo do vórtice. O primeiro termo não contribui, enquanto o segundo termo vai para zero no infinito mas fornece uma contribuição finita ao redor do núcleo tal que:

$$G_1 = \frac{\lambda^2}{8\pi} \left[ 2\pi r_n B \frac{dB}{dr_n} \right]_{r_n=\xi} \quad (2.46)$$

Aplicando o limite assintótico quando  $r \rightarrow 0$  na Eq. (2.46), obtemos facilmente  $\frac{dB}{dr} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2 r}$ , e notando que no núcleo  $B(\xi) \approx B(0)$ , dado que as densidades de supercorrentes vão para zero no núcleo, a energia da linha de vórtice fica

$$G_1 \approx \frac{\Phi_0^2}{16\pi^2 \lambda^2} \ln \kappa, \quad (2.47)$$

que dependente de forma logarítmica do tamanho do núcleo. Utilizando a relação  $\Phi_0 = 2\sqrt{2}\pi\lambda\xi H_c$ , a energia assume:

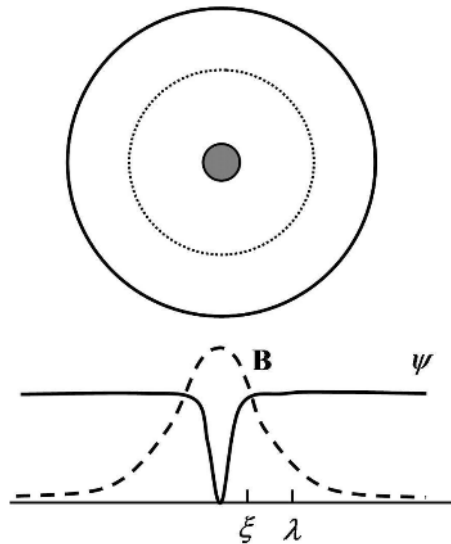
$$G_1 = \frac{H_c^2}{2\pi} \xi^2 \ln \kappa, \quad (2.48)$$

o que mostra que a energia da linha de vórtice tem a mesma ordem de magnitude que a energia do condensado perdida no núcleo. Neste sentido, o campo crítico  $H_{c1}$  que demarca o início do processo de penetração de fluxo assume a forma:

$$H_{c1} = \frac{H_c}{\sqrt{2\kappa}} \ln \kappa. \quad (2.49)$$

A Figura 9 representa a estrutura característica de um único vórtice, em que o parâmetro de ordem é suprimido em uma escala de comprimento de coerência  $\xi$ , ou seja, em uma região próxima ao centro do vórtice, o valor do parâmetro de ordem é significativamente reduzido em comparação com o valor no estado uniforme. Além disso, as supercorrentes são localizadas em uma faixa de comprimento de penetração  $\lambda$ , que é uma medida da distância em que as correntes induzidas pelo vórtice são significativas e decrescem exponencialmente em relação à profundidade. Em resumo, a Figura 9 ilustra como a estrutura do vórtice afeta a distribuição do parâmetro de ordem e das correntes na sua vizinhança.

Figura 9 – Estrutura de um vórtice magnético em um supercondutor, onde o vórtice carrega exatamente um quantum de fluxo  $\Phi_0$  e é circundado pelas supercorrentes  $\vec{J}$  que blindam o supercondutor remanescente do fluxo magnético.



Fonte: (TINKHAM, 1996)

## 2.2.2 Interações entre Vórtices

Baseando-se na aproximação  $\kappa \gg 1$ , a energia de interação entre dois vórtices pode ser facilmente tratada. O campo magnético na presença de dois vórtices é dado pela superposição

dos campos individuais:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}_1(\vec{r}) + \vec{B}_2(\vec{r}) = B(|\vec{r} - \vec{r}_1|) + B(|\vec{r} - \vec{r}_2|)\hat{z} \quad (2.50)$$

onde  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  especificam as posições dos núcleos das duas linhas de vórtices e  $B(r)$  é dado pela Eq. (2.43). O incremento na energia livre por unidade de comprimento pode então ser escrito como:

$$\begin{aligned} \Delta F &= \frac{\Phi_0}{8\pi} (B_1(\vec{r}_1) + \vec{B}_1(\vec{r}_2) + B_2(\vec{r}_1) + \vec{B}_2(\vec{r}_2)) \\ &= 2 \left( \frac{\Phi_0}{8\pi} B_1(\vec{r}_1) \right) + \frac{\Phi_0}{4\pi} B_1(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (2.51)$$

o primeiro termo representa simplesmente a soma das energias de linha individuais. O segundo termo é a energia de interação desejada, denotada por  $E_{12}$  que pode ser expressa por:

$$E_{12} = \frac{\Phi_0^2}{8\pi^2\lambda^2} K_0\left(\frac{r_{12}}{\lambda}\right). \quad (2.52)$$

Essa energia cai com  $r_{12}^{-1/2}e^{-r_{12}/\lambda}$  a longas distâncias e varia de forma logarítmica a curta distância, implicando em uma interação repulsiva no caso usual onde os fluxos têm o mesmo sentido de rotação nos dois vórtices. A força de interação pode ser obtida simplesmente tomando a derivada negativa da energia de interação. Por exemplo, a força na linha de vórtice 2 devido ao vórtice 1 na direção  $x$  pode ser escrita da forma:

$$f_{2x} = -\frac{\partial E_{12}}{\partial x_2} = -\frac{\Phi_0}{4\pi} \frac{\partial B_1(\vec{r}_2)}{\partial x_2} = \frac{\Phi_0}{c} J_{1y}(\vec{r}_2) \quad (2.53)$$

onde, na última passagem utilizamos a relação de Maxwell. Na forma vetorial, a força por unidade de comprimento atuando no vórtice 2 é:

$$\vec{f}_2 = \vec{J}_S \times \vec{\Phi}_0/c \quad (2.54)$$

$\vec{J}_S$  representa a densidade total de supercorrente causada por todos os outros vórtices e também inclui qualquer transporte líquido de correntes na localização do núcleo do vórtice.

No entanto, essas considerações são válidas apenas na suposição de que apenas os campos magnéticos dos vórtices se sobrepõem, mas não seus núcleos (KLEIN, 1987; KRAMER, 1971). Através a teoria de GL e considerações no ganho da energia do condensado, que ocorre quando o núcleo do vórtice se colapsa, a energia de interação entre dois vórtices no *bulk* neste caso tem o formato:

$$U_{vv} = \frac{\Phi_0^2}{8\pi^2\lambda^2} \left[ K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) - K_0\left(\frac{r}{\xi/\sqrt{2}}\right) \right]. \quad (2.55)$$

Portanto, ao incluir as contribuições do núcleo do vórtice, obtém-se uma parte atrativa adicional na interação entre os vórtices. Sua explicação física é que se o parâmetro de ordem for suprimido em uma escala de comprimento comparável a  $\lambda$ , os vórtices ganharão energia sobrepondo suas regiões centrais desde então, a depressão geral de  $\Psi$  ocorre em um volume menor e a energia de condensação é aumentada.

Quando  $\kappa > 1/\sqrt{2}$  estamos no regime de supercondutores do tipo II e a energia  $U_{vv}$  é positiva e, os vórtices se repelem. Quando  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , no regime de supercondutores do tipo I, a energia  $U_{vv}$  troca de sinal e temos uma interação completamente atrativa. Vale ressaltar que nesse modelo são considerados apenas interações monotônicas, ou seja, os vórtices são puramente repulsivos (tipo II) ou puramente atrativos (tipo I). Interações não monotônicas resultam em uma atração de longo alcance e repulsão de curto alcance que podem favorecer energeticamente no condensado a existência de domínios magnéticos, o estado misto intermediário e num contexto geral, o regime intertipo.

Por fim, os vórtices não apenas interagem entre si, mas também com todas as outras correntes externas e internas na amostra. Conseqüentemente, os vórtices formados na superfície da amostra são conduzidos para o interior do objeto pelas correntes de Meissner que blindam a amostra. Além disso, uma corrente aplicado também irá acelerar as linhas de vórtices perpendiculares à direção da corrente conforme a força de Lorentz. Esse movimento de fluxo dissipa energia e, deve ser evitado. Para evitar essa movimentação é necessário fixar os vórtices com os chamados centros de Pinning de modo a manter a condutância perfeita do material.

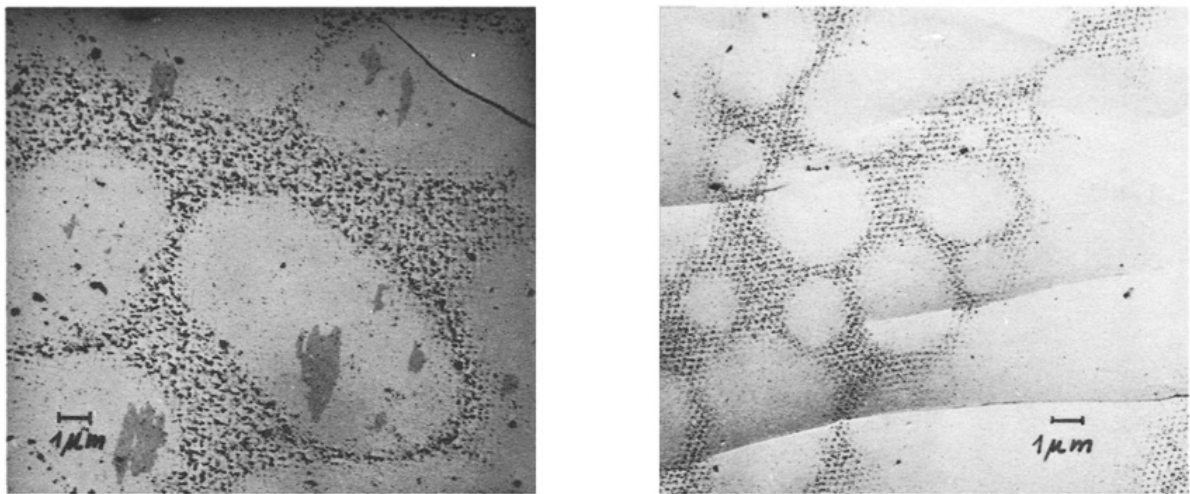
### 2.2.3 Padrões de Fluxo e Domínios Magnéticos

No final da década de 60 e no início da década de 70, a medida em que foram feitos experimentos com diversos supercondutores, surgiu um quadro que vai além da classificação de Abrikosov. Vale destacar os trabalhos (KRAGELOH, 1969), (AUER; ULLMAIER, 1973) devido ao seu grande valor histórico. Em (KRAGELOH, 1969) aborda-se o estudo das propriedades dos supercondutores no estado intermediário, onde o campo magnético penetra no material formando uma estrutura regular chamada de rede de linhas de fluxo.

Nesse estado, o parâmetro de Ginzburg-Landau  $\kappa$  têm um valor próximo a  $1/\sqrt{2}$ . Os pesquisadores investigaram como essa proximidade afeta a formação e o comportamento da rede de linhas de fluxo. Através de simulações computacionais e análises teóricas, foi observado que os supercondutores com  $\kappa \approx 1/\sqrt{2}$  apresentam uma variedade de estruturas de rede de

linhas de fluxo onde a coexistência entre regiões Meissner e regiões de vórtices como pode ser observado na Fig. 10. Essa coexistência indica que deve haver uma energia de superfície positiva entre eles. Um valor positivo de sua energia de superfície implica em interações atrativas de longo alcance entre as linhas de fluxo. O equilíbrio entre tal interação atrativa e a interação repulsiva de curto alcance mais conhecida poderia de fato levar à constância aproximada do parâmetro de rede das redes de fluxo.

Figura 10 – Estruturas de estado intermediário consistindo em rede de vórtices coexistindo com domínios Meissner foram encontradas na vizinhança de  $\kappa = 1/\sqrt{2}$ .

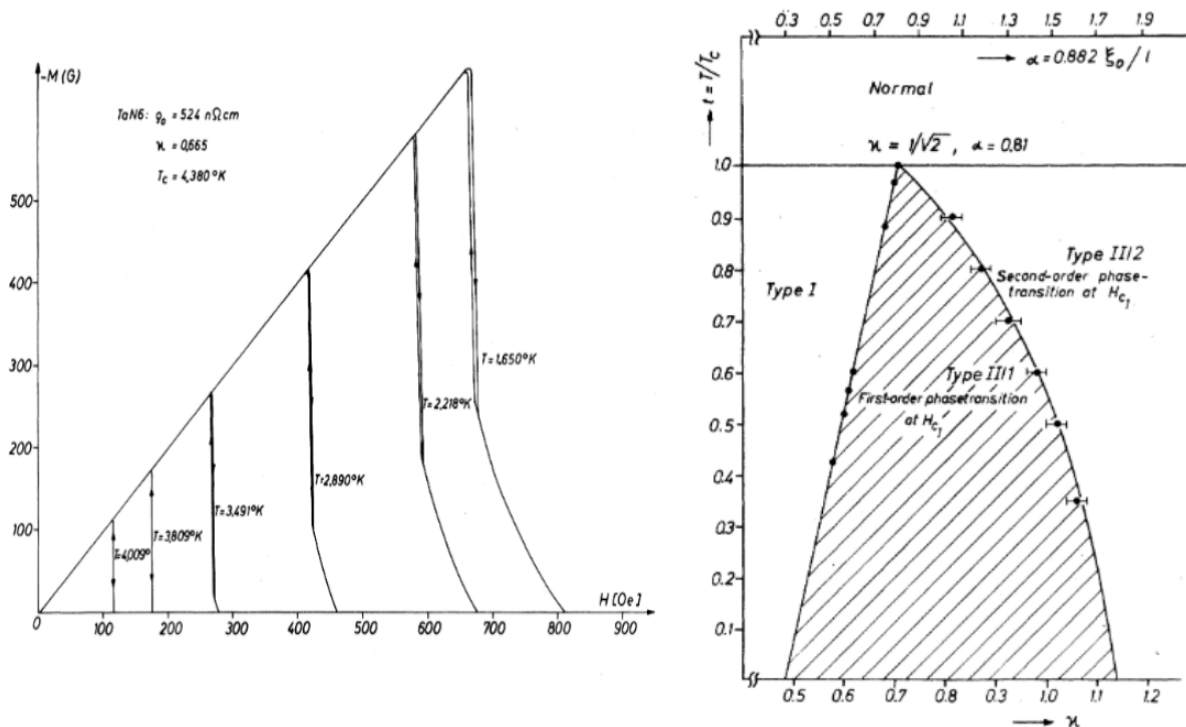


Fonte: (KRAGELOH, 1969)

Através de experimentos que consistiam em dopar o tântalo nitrogênio (TaN) para diversos valores de temperatura, em (AUER; ULLMAIER, 1973) foi observado que próximo da vizinhança de  $1/\sqrt{2}$  a magnetização crescia linearmente como na fase Meissner até um certo campo crítico e tinha uma queda abrupta para então decrescer como na fase de vórtices, indicando uma transição de fase de primeira ordem. Além disso os autores mapearam um diagrama de fases que relacionava o parâmetro de Ginzburg-Landau  $\kappa$  e a temperatura  $T$ , exibindo a região onde ocorre a transição para esses novos supercondutores que foram classificados como tipo II/I. A Fig. 11 ilustra as medições das curvas de magnetização e o diagrama de fases.

Além do estado misto intermediário (IMS) ser caracterizado por esses supercondutores do tipo II/I, também é possível ter supercondutores do tipo 1/II onde a interação de vórtices nesse caso é parcialmente repulsiva. Além das propriedades supercondutoras, o IMS também é um sistema modelo para a física de domínio universal (BRANDT, 1986), dado que pode ser facilmente ajustado por temperatura e campo magnético. A forma das interações de vórtices como repulsivas ou atrativas, e suas consequências na estrutura de domínio da matéria de

Figura 11 – Curvas de magnetização do  $TaN$  exibindo o comportamento tipo-I para altas temperaturas e tipo-II para baixas temperaturas. Diagrama de fases  $\kappa - T$  exibindo regiões onde o  $TaN$  se comporta como tipo I, tipo II e um novo tipo, que foi chamado na época de tipo II/1.



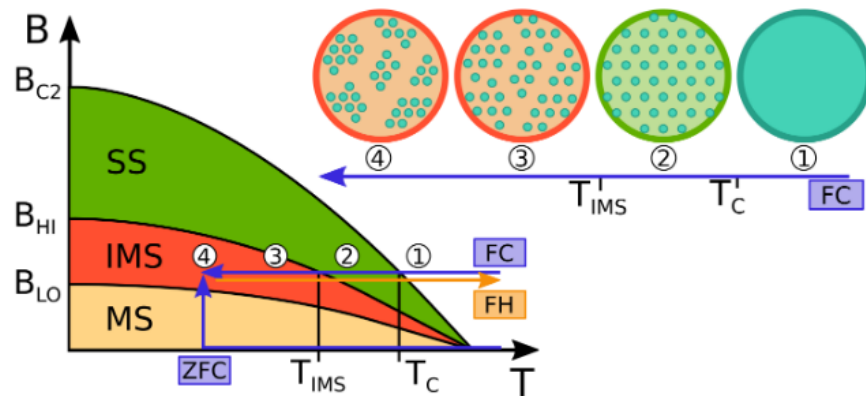
Fonte: (AUER; ULLMAIER, 1973)

vórtices em supercondutores se encontraram com interesse renovado com a descoberta de supercondutores multibandas que serão abordados nas próximas seções.

Estudos investigaram a dependência de campo refrigerado a campo zero (ZFC) do IMS. No entanto, essa abordagem leva a fortes inhomogeneidades magnéticas devido aos efeitos geométricos e de desmagnetização refletidos no modelo de estado crítico (CHAVES et al., 2011; BRANDT; ESSMANN, 1987). Em contraste, na Ref. (BRANDT, 1999) foi realizado um estudo sistemático que enfoca a dependência da temperatura durante o resfriamento de campo (FC) e protocolo de aquecimento de campo subsequente (FC / FH) em amostras de Nb com propriedades distintas de fixação. O diagrama de fase e a transição de uma rede de vórtice homogênea no estado misto para os domínios da rede de vórtice cada vez mais densos no estado intermediário misto como pode ser observado na Fig. 12.



Figura 12 – Diagrama de fase de um supercondutor do tipo II/1, dividido entre o estado Meissner, estado misto intermediário, e o estado misto.



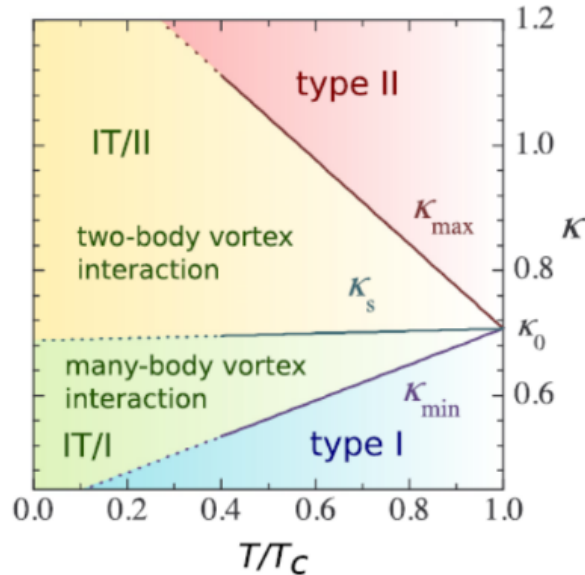
Fonte: (BACKS M. SCHULZ; MÜHLBAUER, 2019)

Nos materiais do tipo II/1, a formação de, por exemplo, duas linhas de vórtices separadas requer mais energia do que a formação de um par. Quando os primeiros vórtices penetram no material, a energia é liberada para que os vórtices se agrupe e então formem novos vórtices. Consequentemente, detecta-se um  $B_{c1}$  mais alto ao aumentar o campo do que durante a redução de campo porque a expulsão final do fluxo em  $B_{c1}$  requer quebrar a ligação vórtice-vórtice, enquanto a penetração de fluxo não. Por outro lado, para materiais do tipo I/II, existe coexistência de domínios Meissner sem fluxo coexistindo com a rede de vórtices. Energeticamente, esses materiais estão no chamado "estado intermediário" e origina-se de um equilíbrio intrincado entre as interfaces de domínio, a curvatura do fluxo magnético e a energia de condensação do estado supercondutor.

#### 2.2.4 Regime Intertipo

Um importante avanço teórico sobre o IMS coloca o formalismo Ginzburg-Landau estendido (EGL) introduzido por Vagov et al. (VAGOV et al., 2016). EGL é uma expansão da teoria BCS em torno do ponto crítico em  $T_c$  e  $\kappa_0$ . Em contraste com a teoria GL clássica, EGL é, portanto, capaz de descrever a região de fase onde o IMS ocorre com precisão. Além disso, ele abre um espaço de fase muito mais geral denominado regime intertipo, que está localizado entre o tipo I clássico e o tipo II Fig. 13. No regime intertipo, encontramos um espaço de fase correspondente ao antigo tipo-II / 1, que apresenta a interação de vórtice necessária para o IMS com uma atração de longo alcance e repulsão de curto alcance.

Figura 13 – O Diagrama de Fases  $\kappa - T$  do regime intertipo apresenta a dicotomia clássica tipo I e tipo II em  $T_c$ . Abaixo de  $T_c$ , o ponto crítico em  $\kappa_0$  se expande para o regime intertipo estendido, dividido em dois regimes distintos: vórtices únicos (IT/I) e configurações de vórtices múltiplos (IT/II). O tipo II/1 e o IMS são vagamente correspondentes à fase IT/II.



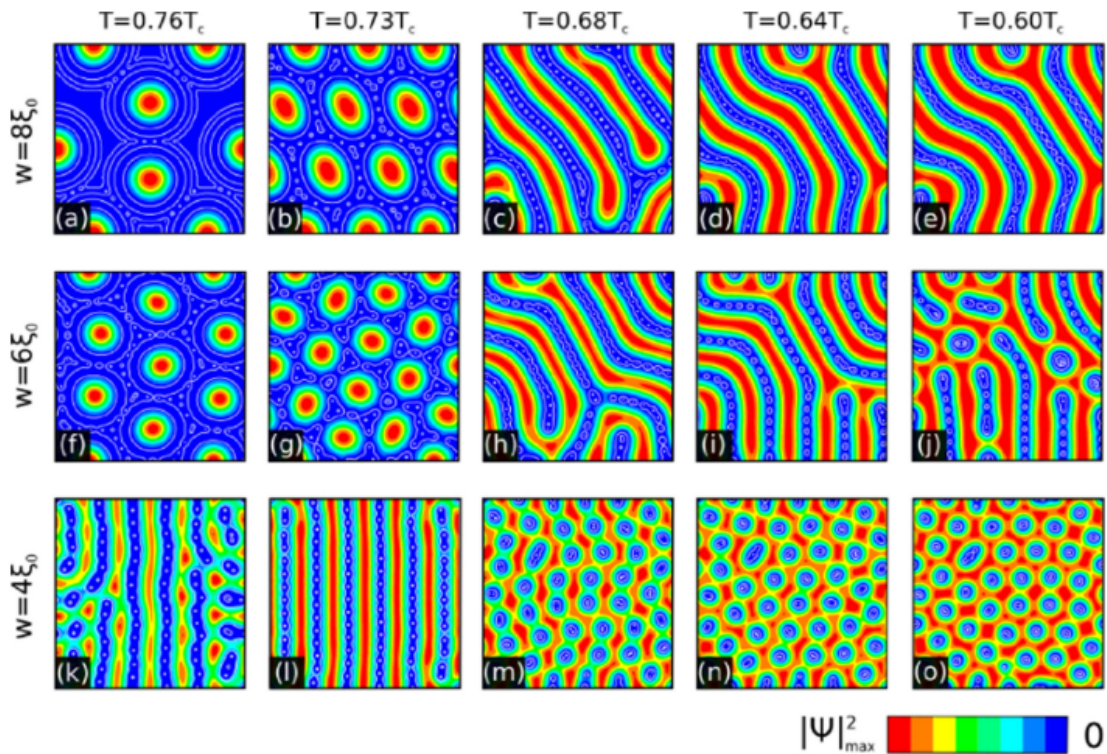
Fonte: (VAGOV et al., 2016)

Supercondutores no regime intertipo são definidos principalmente pela interação entre vórtices. No tipo I e no tipo II, os vórtices são puramente atrativos ou puramente repulsivos, respectivamente. Em contraste, a interação encontrada no regime intertipo pode ser não monotônica. Além disso, vórtices multi-quânticos ou gotículas de multi-vórtices podem ser favorecidos em relação aos vórtices quânticos únicos isolados que definem o estado misto original em materiais do tipo II. As propriedades incomuns encontradas no estado misto intermediário (IMS), sendo um exemplo importante de matéria de vórtice fora da dicotomia tipo I / tipo II, podem ser facilmente explicadas usando as novas interações de vórtice encontradas no escopo de EGL. No IMS, os vórtices tendem a se unir e formar aglomerados. Esse comportamento é direto, se a interação do vórtice não for monotônica, apresentando uma repulsão de curto alcance e uma atração de longo alcance.

Estados Intertipo Exóticos são encontrados por exemplo na Ref. (CÓRDOBA-CAMACHO et al., 2016), onde os autores se concentraram no problema de supercondutividade entre os tipos convencionais I e II em filmes finos supercondutores feitos de um material do tipo I. A degenerescência em  $\kappa_0$  foi removida devido a campos magnéticos dispersos e o domínio intertipo aparece no diagrama de fase espessura do filme  $\times$  temperatura. Os autores, encontraram estruturas internas complexas explicadas pelo regime intertipo, com uma rica variedade de

padrões de fluxo magnético não padronizados quando ocorre a transição para o estado misto. Tais investigações identificaram configurações do tipo, vórtices gigantes, ilhas e cadeias de vórtices, stripes, vermes, labirintos entre outros, como pode ser observado na Fig. 14.

Figura 14 – Densidade local de pares de Cooper  $|\Psi|^2$  em filmes finos de espessura  $w$ .



Fonte: (CórDOBA-CAMACHO et al., 2016)

Essas distribuições de fluxo observadas não podem ser expressar como qualquer combinação simples de configurações do tipo I e do tipo II. Assim, os resultados demonstram que a resposta magnética em filmes finos supercondutores levanta questões importantes sobre a integridade da classificação que é geralmente apresentada nos livros didáticos e abre perspectivas importantes para mais estudos do regime intertipo.

### 2.3 SUPERCONDUTORES MULTIBANDAS

Para o estado normal de um metal, através do modelo de elétrons livres, os níveis de energia dos elétrons são preenchidos até uma certa energia denominada energia de Fermi  $\epsilon$ . Este "mar de Fermi cheio" de elétrons é o estado fundamental do metal normal. Este estado permite pequenas excitações arbitrárias. Um estado excitado pode ser formado pegando um elétron da superfície de Fermi e elevando-o logo acima da superfície de Fermi. Para se obter o estado

supercondutor em baixas temperaturas, foi mostrado na teoria BCS, que mesmo uma interação atrativa fraca entre elétrons pode causar uma instabilidade no estado fundamental do mar de Fermi no que diz respeito à formação de pares de elétrons ligados. Esses pares vinculados são conhecidos como "pares Cooper" com momento e rotação iguais e opostos. Em temperatura "0 K", uma energia mínima de  $2\Delta(0)$  é necessária para quebrar um par Cooper, onde  $\Delta(0)$  é conhecido como a "função de *gap*". Em supercondutores, não há elétrons com energias entre  $\varepsilon_F - \Delta$  e  $\varepsilon_F + \Delta$ . Este *gap* de energia é denotado por  $E_g = 2\Delta$ . Em temperaturas mais altas, as flutuações térmicas gradualmente superariam a lacuna (*gap*) de energia. Como as flutuações são da ordem de  $k_B T$ , a supercondutividade desaparece em  $T_c$  quando  $k_B T_c$  se tornasse comparável a  $\Delta(0)$ .  $k_B$  = constante de Boltzmann. Além disso, espera-se que o *gap* de energia  $2\Delta(T)$  diminua à medida que a temperatura aumenta. A teoria BCS prediz o comportamento da função de *gap* com a temperatura da forma (TINKHAM, 1996):

$$E_g(0) = 2\Delta(0) = 3.53k_B T_c. \quad (2.56)$$

Para os metais, a atração fraca vem das interações elétron-rede-elétron. Essa interação indireta ocorre quando um elétron interage com a rede e a deforma, um segundo elétron vê a rede deformada e se ajusta para aproveitar a deformação para diminuir sua energia. Assim, o segundo elétron interage com o primeiro elétron através da deformação da rede. Esse é o chamado supercondutor convencional, com a interação mediada por fônons.

Não pretendemos nos aprofundar na teoria BCS pois foge do escopo dessa dissertação. Para uma consulta detalhada recomendamos a leitura da teoria BCS na Ref. (TINKHAM, 1996).

Em 2001, um  $T_c = 39K$  inesperadamente alto foi relatado no composto binário intermetálico diboreto de magnésio  $MgB_2$  (MURANAKA et al., 2001). É um material em camadas com boro (B) disposto em um padrão de favo de mel (honeycomb) e magnésio (Mg) situado acima do centro das telhas de favo de mel, de modo que adote uma estrutura hexagonal fechada (hcp). Após esta primeira observação, o mecanismo para altas  $T_c$  não estava claro. Entre as muitas teorias concorrentes, as interações de duas bandas ou dois *gaps* provaram ser a correta. Quando há mais de dois *gaps*, este conceito pode ser estendido para supercondutividade multigap ou multibandas. Neste caso, cada condensado tem uma amplitude e uma fase, e está fracamente acoplado aos outros condensados.

Por outro lado, a supercondutividade multibanda denota especificamente que várias bandas eletrônicas estão presentes no nível de Fermi, que é o caso da maioria dos supercondutores de interesse hoje. Essa noção é ainda mais interessante quando as diferentes bandas têm um

caráter diferente. Um supercondutor anisotrópico de apenas um condensado denota o caso onde o intervalo supercondutor é espalhado continuamente por uma faixa de valores. A sobreposição dos condensados pode ser acidental, quando eles têm cerca do mesmo acoplamento intra-banda, mas também pode ser devido ao forte acoplamento inter-banda. Sob um supercondutor multibandas, entendemos que existem *gaps* mais fortes e mais fracos se abrindo em partes separadas e desconectadas da superfície de Fermi. Eles são acoplados através de acoplamento inter-banda fraco a intermediário.

O acoplamento entre os dois condensados de pares de Cooper no *bulk* do  $MgB_2$  é responsável pelo aumento de  $T_c$  para  $39K$ . Geralmente, a temperatura crítica de um sistema de duas bandas é maior que a temperatura crítica associada com a mais forte das duas bandas. Este importante ponto já foi reconhecido e comprovado em 1959 por Suhl, Matthias e Walker (SUHL; MATTHIAS; WALKER, 1959), como uma extensão da teoria BCS, que surgiu pouco antes. Neste caso, apenas interações atrativas entre as bandas foram consideradas.

Com a descoberta da supercondutividade multibandas no  $MgB_2$  e possivelmente em supercondutores à base de ferro na última década, este campo experimentou um forte ressurgimento de interesse.

Para estudar as propriedades dos supercondutores multibandas mais profundamente, é necessária uma teoria de campo médio apropriada. Aqui, apresentaremos generalizações multibandas da teoria de Ginzburg-Landau. Existem várias abordagens para construir essa teoria GL multibandas. Para as propostas da dissertação, restringimos a discussão multibandas a teoria de Ginzburg-Landau de duas componentes e sua relação com os parâmetros microscópicos obtidas através da formulação de Eileshberg (KOGAN; SCHMALIAN, 2011). Para modelagem numérica e computacional apresentamos a dependência temporal e unidades reduzidas que permitem implementação em algoritmos computacionais.

### 2.3.1 Formalismo de Ginzburg-Landau de Duas Bandas

Como foi dito anteriormente, a teoria de GL é baseada na expansão da energia livre em potências de um parâmetro de ordem complexo, cujo módulo quadrado é proporcional à densidade de pares de Cooper, e do potencial vetor. Para o caso de múltiplas bandas, o funcional de GL deve ser expresso como um parâmetro de ordem multicomponente, com cada componente representando a amplitude do condensado correspondente a cada banda do material.

No modelo que descreve um supercondutor de duas bandas, considera-se o funcional de energia livre de GL como a soma da energia livre de cada banda e de um termo de acoplamento interbanda ou também conhecido como acoplamento Josephson:

$$G = \sum_{k=1}^2 G_k - \int_{\Omega} dV_{\Omega} \Gamma_J (\Psi_1 \Psi_2^* + \Psi_1^* \Psi_2) + \int_{\Omega} dV_{\Omega} \frac{(\vec{B} - \vec{H}_a)}{8\pi}, \quad (2.57)$$

onde  $G_k$  é associado a energia livre de cada banda separadamente, descrito da forma

$$G_k = \int_{\Omega} dV_{\Omega} \left[ \frac{1}{2m_k} |(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\vec{A})\Psi_k|^2 + \alpha_k |\Psi_k|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi_k|^4 \right]. \quad (2.58)$$

$\Psi_k = |\Psi_k|e^{i\theta_k}$ ,  $k = 1, 2$ , são as funções de gap (condensados) de cada banda,  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  é a indução magnética,  $\vec{H}_a$  é o campo magnético externo aplicado,  $\Gamma_J$  é o termo de energia inter-banda também conhecido como acoplamento Josephson.

Antes de apresentarmos as equações de movimento, é interessante analisarmos o que acontece na ausência de campo magnético aplicado na vizinhança da temperatura crítica  $T_c$  de tal forma que  $|\Psi_k|$  é pequeno suficiente e podemos omitir os termos não lineares. Desse modo, a densidade de energia livre se reduz a:

$$g = \alpha_1 |\Psi_1|^2 + \alpha_2 |\Psi_2|^2 - 2\Gamma_J |\Psi_1| |\Psi_2| \cos(\Delta\theta), \quad (2.59)$$

onde  $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$  é a diferença de fase entre os dois condensados. Dependendo do sinal do acoplamento Josephson  $\Gamma_J$  surgem três situações possíveis:

- (i)  $\Gamma_J = 0$ , caso onde as bandas estão desacopladas, a energia é independente da fase relativa entre os dois condensados.
- (ii)  $\Gamma_J > 0$ , a energia livre é minimizada tomando  $\Delta\phi = 0$ .
- (iii)  $\Gamma_J < 0$ , situação estável que ocorre quando  $\Delta\phi = \pi$ .

Considerando o caso (ii), o funcional (2.57–2.58) é minimizado pela solução do sistema

$$\begin{pmatrix} \alpha_1(T) & -\Gamma_J \\ -\Gamma_J & \alpha_2(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

A maior temperatura para o qual o sistema de equações tem solução não trivial é a temperatura crítica  $T_c$ . Essa situação ocorre quando o determinante do sistema (2.60) se anula. Ou seja, quando:

$$\alpha_1(T_c)\alpha_2(T_c) - \Gamma_J^2 = 0. \quad (2.61)$$

Portanto, nenhum dos parâmetros  $\alpha_k$  podem se anular em  $T_c$ . Isso está em terrível contraste com a situação de um único condensado em que, para descrever adequadamente a transição de fase de segunda ordem,  $\alpha$  deve se anular em  $T_c$ . Isso significa que, no caso de um sistema com dois condensados,  $\alpha_k$  são expressos apropriadamente pela combinação linear  $\alpha_k = \alpha_k(T_c) + a_k\tau$ , onde  $\tau = \ln(T_c/T) \approx 1 - T/T_c$ . Notando que  $|\Psi_k| \propto \tau^{1/2}$ ,  $\nabla|\Psi_k| \propto \tau$  como no caso de um único condensado, os termos da energia livre estão escalados com  $\tau^2$ , exceto os termos  $\alpha_k(T_c)|\Psi_k|^2$  e  $\Gamma|\Psi_1||\Psi_2|$  tem escala com  $\tau$ . Para tratar todos os termos corretamente com o mesmo grau em  $\tau$  é necessário calcular  $|\Psi|$  com precisão de  $\tau^{3/2}$ . Essa descrição foi feita pelo formalismo Estendido de Ginzburg-Landau com uma expansão sistemática em  $\tau$  e é descrita de forma detalhada na Ref. (SHANENKO et al., 2011). Contudo, a teoria *EGL* foge do escopo dessa dissertação e iremos nos restringir ao caso convencional.

A minimização da energia livre é feita em analogia ao caso de um único condensado, e as equações para duas componentes assumem a forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_1}(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\vec{A})^2\Psi_1 + (\alpha_1 + \beta_1|\Psi_1|^2)\Psi_1 - \Gamma_J\Psi_2 &= 0, \\ \frac{1}{2m_2}(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\vec{A})^2\Psi_2 + (\alpha_2 + \beta_2|\Psi_2|^2)\Psi_2 - \Gamma_J\Psi_1 &= 0, \\ \frac{c}{4\pi}[\nabla \times \nabla \times \vec{A}] &= \vec{J}_S \end{aligned} \quad (2.62)$$

onde neste caso,  $\vec{J}_S$  descreve a supercorrente total, dada pela superposição da contribuição individual das supercorrentes de cada condensado:

$$\vec{J}_S = \vec{J}_{S_1} + \vec{J}_{S_2} = \frac{2e}{m_1}\Re\left[\Psi_1^*(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\vec{A})\Psi_1\right] + \frac{2e}{m_2}\Re\left[\Psi_2^*(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\vec{A})\Psi_2\right]. \quad (2.63)$$

### 2.3.2 Consistência com a Teoria Microscópica

Na representação de Eilenberger (GOR'KOV; ELIASHBERG, 1968) para o modelo de Ginzburg-Landau de duas componentes, os parâmetros microscópicos relevantes são: a razão entre as velocidades de Fermi de cada banda,  $v_1/v_2$ , a densidade de estados de cada banda  $n_1, n_2, n_1 + n_2 = 1$ , e os elementos da matriz de acoplamento elétron-fônon;

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{12} & \lambda_{22} \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

Nessa representação, a temperatura crítica do sistema está definida pela relação  $e^{-S} = 1.76T_c/2\hbar\omega_D$ , onde  $\omega_D$  é a frequência de corte de Debye e

$$S = \frac{n_1\lambda_{11} + n_2\lambda_{22} - \sqrt{(n_1\lambda_{11} - n_2\lambda_{22})^2 + 4n_1n_2\lambda_{12}\lambda_{21}}}{2 \det \Lambda} \quad (2.65)$$

é a condição para que as raízes do sistema de equações lineares autoconsistentes para os dois gaps

$$\Delta_1 = (n_1\lambda_{11}\Delta_1 + n_2\lambda_{12}\Delta_2)S \quad (2.66)$$

$$\Delta_2 = (n_1\lambda_{12}\Delta_1 + n_2\lambda_{22}\Delta_2)S$$

sejam não triviais. A menor raiz fornece o valor correto de  $T_c$ .

### 2.3.3 Dependência Temporal e Unidades Reduzidas

Quando o supercondutor é conduzido para fora do equilíbrio, precisamos modificar a energia livre para considerar os processos de relaxação. Podemos expressar a energia livre total pela superposição do equilíbrio com o desvio de equilíbrio (relaxação):

$$G = G_{\text{equilíbrio}} + G_{\text{relaxação}} \quad (2.67)$$

A forma explícita de  $G_{\text{relaxação}}$  pode ser bem complicada de se obter. Contudo, o que realmente interessa e apresenta significado físico são suas condições de minimização com respeito aos condensados e ao potencial vetor:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{\text{relax}}}{\partial \Psi_1^*} &= \int_{\Omega_S} d\Omega_S \left[ D_1 \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{2ei}{\hbar} \Phi \right) \Psi_1 \right] \delta \Psi_1^* \\ \frac{\partial G_{\text{relax}}}{\partial \Psi_2^*} &= \int_{\Omega_S} d\Omega_S \left[ D_2 \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{2ei}{\hbar} \Phi \right) \Psi_2 \right] \delta \Psi_2^* \\ \frac{\partial G_{\text{relax}}}{\partial \vec{A}} &= \int_{\Omega_S} d\Omega_S \left[ \Sigma \left( \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \nabla \Phi \right) \right] \delta \vec{A} \end{aligned} \quad (2.68)$$

Os coeficientes  $D_1, D_2$  contêm a informação sobre a taxa de relaxação de cada banda.  $\Phi$  é o potencial eletrostático necessário para preservar a invariância de calibre devido às variações temporais.  $\Sigma$  é a condutividade no estado normal tal que a densidade de corrente normal é representada por  $\vec{J}_n = \Sigma \left( \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \nabla \Phi \right)$  devido ao campo elétrico induzido  $\vec{E}$ . As equações de movimento que governam a evolução temporal do sistema composto por dois condensados supercondutores é portanto:

$$\begin{aligned} D_1 \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i2e}{\hbar} \Phi \right) \Psi_1 &= \frac{1}{2m_1} (-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \vec{A})^2 \Psi_1 + (\alpha_1 + \beta_1 |\Psi_1|^2) \Psi_1 - \Gamma_J \Psi_2, \\ D_2 \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i2e}{\hbar} \Phi \right) \Psi_2 &= \frac{1}{2m_2} (-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \vec{A})^2 \Psi_2 + (\alpha_2 + \beta_2 |\Psi_2|^2) \Psi_2 - \Gamma_J \Psi_1, \end{aligned} \quad (2.69)$$



acopladas com a equação de evolução temporal do potencial vetor

$$\Sigma \left( \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \nabla \Phi \right) = \vec{J}_S - \frac{c}{4\pi} \nabla \times \nabla \times \vec{A}. \quad (2.70)$$

Neste momento, é apropriado expressarmos os parâmetros fenomenológicos em função dos parâmetros microscópicos (KOGAN; SCHMALIAN, 2011)

$$\begin{aligned} \alpha_j &= -N(0)n_j\chi_j, \quad \beta_j = N(0)n_j/W^2 \\ m_j &= \frac{3W^2}{N(0)n_jv_j^2}, \quad \Gamma_J = \frac{N(0)\lambda_{12}}{\det \Lambda}, \\ W^2 &= \frac{8\pi^2T_c^2}{7\zeta_3}, \quad \chi_j = \tau - \frac{S_j}{n_j \det \Lambda}, \end{aligned} \quad (2.71)$$

onde  $N_j = N(0)n_j$  é a densidade de estados de cada banda na energia de Fermi,  $S_1$  e  $S_2$  aparecem na solução das equações linearizadas (2.66) para a temperatura crítica  $T_c$  e são definidas por:  $S_1 = \lambda_{22} - n_1 \det \Lambda S$ ,  $S_2 = \lambda_{11} - n_2 \det \Lambda S$ .

Embora os comprimentos característicos deste modelo dependam fortemente do acoplamento entre as bandas, ainda se pode definir os comprimentos de coerência e penetração para cada banda, considerados separadamente:

$$\xi_k = \frac{\hbar v_k}{\sqrt{6}W}, \quad \lambda_k = \sqrt{\frac{3c^2}{16\pi N(0)e^2 n_j v_j^2}} \quad (2.72)$$

As temperaturas críticas das bandas desacopladas, isso é, a temperatura que corresponde a troca de sinal nos parâmetros  $\alpha_k$  descritas pela teoria de Eilenberg são:

$$T_{c_k} = T_c \left( 1 - \frac{S_k}{n_k G} \right) \quad (2.73)$$

Note que ambas  $T_{c_k}$  são sempre menos que  $T_c$ . Portanto,  $T_{c_1}, T_{c_2} < T < T_c$ , ambos  $\alpha_k$  são positivos e a supercondutividade sobrevive no sistema apenas devido ao acoplamento entre bandas, onde quanto a  $T < T_{c_1}, T_{c_2}$ , ambas as bandas estão ativas ( $\alpha_k < 0$ ). Na região  $T_{c_P} < T < T_{c_A}$ , onde uma das bandas é ativa (banda A) enquanto a outra banda é passiva (banda P), a supercondutividade permanece apenas devido aos pares de Cooper provenientes da banda A.

Para as propostas numéricas e aplicação em algoritmos computacionais, é mais conveniente adotar unidades reduzidas, e neste caso de duas bandas, é conveniente escalarmos as quantidades relevantes usando os parâmetros da banda dominante, geralmente denotada como

banda 1:

$$\Psi_k = W\Psi'_k, \quad \vec{r} = \xi_1\vec{r}', \quad \nabla = \frac{1}{\xi_1}\nabla', \quad \vec{A} = \frac{\hbar c}{2e\xi_1}\vec{A}',$$

(2.74)

$$t = \frac{4\pi\sigma\kappa_1^2\xi_1^2}{c^2}t', \quad D_k = \frac{4\pi\sigma\kappa_1^2\xi_1^2n_1N(0)}{c^2}D'.$$

Uma comparação sistemática com a teoria microscópica de Eilenberger de duas bandas (SHANENKO et al., 2011) demonstra que o modelo de duas componentes oferece uma descrição quantitativa muito boa de características específicas da supercondutividade de duas bandas, se preservada a forma original com que  $\tau$  varia com a temperatura. A faixa de aplicabilidade estende-se até aproximadamente  $T = 0.75T_c$ , quando os coeficientes fenomenológicos do modelo são conectados diretamente às constantes microscópicas.

### 3 MODELAGEM NUMÉRICA E COMPUTACIONAL

Neste capítulo, serão abordados os métodos numéricos usados para resolver as equações de Ginzburg-Landau para filmes finos supercondutores multibandas. Em particular, usamos o método das diferenças finitas, variáveis de ligação e campos de calibre para discretizar as equações e transforma-las em um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas numericamente. A implementação computacional pode ser feita em qualquer linguagem de programação, contudo, optamos por utilizar processamento de unidades gráficas (GPUs) que tem poder computacional muito maior do que (CPUs) e apresentam maior eficiência na resolução de problemas científicos com grandes cargas computacionais paralelizáveis. Em nosso estudo, apresentamos algumas noções de programação em Cuda e sua implementação para solução das equações de Ginzburg-Landau de duas componentes dependentes do tempo.

#### 3.1 MÉTODOS NUMÉRICOS

Nesta seção, descrevemos os métodos numéricos usados para resolver as equações de Ginzburg-Landau de duas bandas dependentes do tempo. O método das diferenças finitas associado com as variáveis de ligação e campos de Calibre são utilizados para discretizar essas equações e transformá-las em um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas numericamente. A evolução temporal é governada pelo método de Euler, que se mostra suficiente para capturar o comportamento transiente de sistemas não lineares com baixo custo computacional, em particular para integrar as equações de movimento e descrever o comportamento dinâmico de materiais supercondutores.

##### 3.1.1 Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas (HOFFMAN; FRANKEL, 2001) é um dos mais antigos e utilizados para soluções de equações diferenciais. Através de diferenças finitas podemos converter um conjunto de observáveis físicos em sua representação discreta através da partição do domínio contínuo no espaço e no tempo caso seja incluída a evolução temporal do sistema. O erro entre as soluções numéricas e exatas é determinada pelo erro de truncamento na série de Taylor do operador diferencial em questão e na ordem da derivada. Abordaremos

alguns esquemas de discretização conhecidos como, diferenças centras, diferenças progressivas (forward), e diferenças regressivas (backward). Do ponto de vista específico da supercondutividade, elaboraremos versões discretizadas para o parâmetro de ordem, e o potencial vetor convertido utilizando o método das variáveis de ligações para manter a invariância de calibre.

Considere uma função  $f(x)$  suficientemente suave da variável  $x$ . A discretização do domínio de  $x$  em um conjunto de pontos denotados por "nós do domínio" tal que:

$$f(x_i) = f(i\Delta x) = f_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

Substituindo a localização de  $x_i$  por  $i\Delta x$ , as coordenadas nodais são especificadas simplesmente pelo produto do inteiro  $i$  e o espaçamento da rede  $\Delta x$ . O inteiro  $i$  denota a posição do nó ao longo da coordenada  $x$ . Quando o espaçamento  $\Delta x$  é constante, naturalmente podemos representar  $f(i\Delta x)$  como  $f_i$ . No caso bidimensional, a função  $f(x, y)$  pode ser especificada em qualquer localização nodal por:

$$f(x_i, y_j) = f(i\Delta x, j\Delta y) = f_{i,j}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

onde  $\Delta x$  é o espaçamento na direção  $x$  e  $\Delta y$  é o espaçamento na direção  $y$ . O método das diferenças finitas consiste em relacionar as derivadas das funções em equações algébricas que aproximação a solução em cada ponto  $i$ .

O procedimento de discretização da derivada de uma função  $f(x)$  em um intervalo finito  $(0, L)$  pode ser realizado através do domínio discreto como mencionado anteriormente. O intervalo finito é então dividido em um número de segmentos iguais  $N$  e o número de nós é  $N + 1$ . Supondo que  $f_i$  é um nó dentro de  $(0, L)$ . O valor do nó  $f_{i+1}$  pode ser expandido em série de Taylor tal que:

$$f_{i+1} = f_i + \Delta x \frac{\partial f_i}{\partial x} + \dots, \quad (3.3)$$

conhecendo o valor de  $f_i$  e os valores de sua derivada primeira no nó  $i$ , então podemos encontrar uma aproximação para o próximo nó  $f_{i+1}$ . Assim, podemos escrever a derivada  $\frac{\partial f_i}{\partial x}$  como:

$$\frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (3.4)$$

onde,  $O(\Delta x)$  denota o erro de truncamento da ordem de  $\Delta x$  e precisão é de primeira ordem. A expressão (3.4) é conhecida como aproximação por diferenças finitas para frente (forward). Semelhantemente, podemos definir a derivada para trás (backward):

$$\frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.5)$$

A utilização dos métodos para trás ou para frente, dependerá das restrições impostas nas extremidades dos domínios das funções, por exemplo, no ponto inicial, digamos  $x_0$ , o método para trás não pode ser utilizado por não existir nenhum ponto anterior a  $x_0$ . No ponto final  $x_N$  a derivada para frente não pode ser utilizada, por não existir nenhum ponto para fora do domínio.

Para se obter precisão de segunda ordem na primeira derivada, utilizamos a noção de derivada central:

$$\frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (3.6)$$

Note que, essa aproximação não pode ser utilizada em pontos extremos do domínio. Portanto, conclui-se que, na prática, utiliza-se a derivada central para pontos interiores, derivada para frente nos pontos iniciais e derivada para trás para pontos finais do domínio.

Visto que as equações de Ginzburg-Landau contém termos proporcionais ao operador laplaciano  $\nabla^2$ , é essencial obtermos aproximações para as derivadas de segunda ordem. A derivada segunda pode ser obtida simplesmente pela aproximação da derivada central de primeira ordem:

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (3.7)$$

### 3.1.2 Variáveis de Ligação

O método mais popular para solução das equações de Ginzburg-Landau é o método das variáveis de ligação complexas (BUSCAGLIA; BOLECH; LÓPEZ, 2000). Nesse método realiza-se uma discretização gauge-invariante com precisão de segunda ordem no espaço conhecido como método  $U - \Psi$ , a discretização no tempo é usualmente realizada através do método de Euler, que será abordado na próxima seção. Na Ref. (WINIECKI; ADAMS, 2001) é proposto um esquema semelhante ao método  $U - \Psi$ , definindo variáveis de ligações reais que resultam em um menor custo computacional. Nesta seção, abordamos essas sequências de transformações para manter a invariância de Calibre.

Considere um domínio bidimensional isomorfo a  $\mathbb{R}^2$ , descrito por uma rede discreta contendo  $N_x \times N_y$  pontos, cujas coordenadas físicas são dadas por  $x = i\Delta x$ ,  $i = 0, 1, \dots, N_x$  e  $y = j\Delta y$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_y$ , onde,  $\Delta x, \Delta y$  são os espaçamentos ao longo de cada dimensão nas células unitárias discretas, de forma que o domínio físico é  $L_x = N_x\Delta x, L_y = N_y\Delta y$ .

Inicialmente, para trabalhar com o método  $U - \Psi$ , precisamos definir os campos auxiliares

$\mathcal{U}_x, \mathcal{U}_y$ , que se relacionam com as componentes  $A_x, A_y$  do potencial vetor da forma:

$$\mathcal{U}_k(x, y) = e^{-i \int_{k_0}^k A_k(x, y) dk}, \quad (3.8)$$

onde,  $k = x, y$  e  $k_0 = (x_0, y_0)$  é um ponto de referência arbitrário.

Para discretização dos operadores nabla e laplaciano gauge-invariante, considere  $\psi(x, y)$  um parâmetro de ordem arbitrário que descreve o estado supercondutor pela teoria de Ginzburg-Landau em duas dimensões espaciais. Explicitamente, temos que

$$\begin{aligned} (-i\nabla - \vec{A})\psi &= -i\nabla\psi - \vec{A}\psi, \\ (-i\nabla - \vec{A})^2\psi &= -\nabla_k^2\psi + i\nabla_k(A_k\psi) + iA_k\nabla_k\psi + A_k^2\psi \end{aligned} \quad (3.9)$$

é conveniente escrevermos esses termos na forma compacta introduzindo os campos auxiliares (3.8), tal que

$$\begin{aligned} (-i\nabla - \vec{A})\psi &= -i \sum_{k=x,y} \mathcal{U}_k^* \frac{\partial(\mathcal{U}_k\psi)}{\partial k} \hat{k}, \\ (-i\nabla - \vec{A})^2\psi &= - \sum_{k=x,y} \mathcal{U}_k^* \frac{\partial^2(\mathcal{U}_k\psi)}{\partial k^2}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

— denota conjugação complexa e  $\hat{k}$  é o versor unitário. Antes de aplicarmos as aproximações numéricas por diferenças finitas, é importante notar que pela definição dos campos auxiliares podemos definir as variáveis de ligação, análogos discretos de  $\mathcal{U}_k$  definidos nos nós da malha:

$$U_{i,j}^x = \bar{U}_{i,j}^x \mathcal{U}_{i+1,j}^x, \quad U_{i,j}^y = \bar{U}_{i,j}^y \mathcal{U}_{i,j+1}^y \quad (3.11)$$

de modo que, a variável de ligação na direção  $x$ ,  $U_{i,j}^x$  é associada com as ligações horizontais na malha, enquanto a variável de ligação na direção  $y$ ,  $U_{i,j}^y$  é associada com as ligações verticais na malha. O parâmetro de ordem  $\psi$  é associado aos nós ou vértices da malha.

Os operadores descritos na Eq. (3.10) podem então ser discretizados utilizando o método das diferenças finitas (3.4), (3.6) e assumem a forma compacta

$$\begin{aligned} (-i\nabla - \vec{A})\psi &= \frac{i}{\Delta x} (\psi_{i,j} - U_{i,j}^x \psi_{i+1,j}) \hat{x} + \frac{i}{\Delta y} (\psi_{i,j} - U_{i,j}^y \psi_{i,j+1}) \hat{y}, \\ (-i\nabla - \vec{A})^2\psi &= \frac{1}{\Delta x^2} (U_{i,j}^x \psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j}) + \frac{1}{\Delta y^2} (U_{i,j}^y \psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \bar{U}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1}). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Notando que as variáveis de ligação são uni-modulares, i.e.,  $|U_{i,j}^k| = 1$ , podemos expressá-las na forma de exponenciais complexos:

$$U_{i,j}^k = e^{-i\phi_{i,j}^k}, \quad (3.13)$$

onde,  $\phi_{i,j}^k$  é conhecida como variável de ligação real. Os pontos da malha permanecem os mesmo como indicado na Fig. 15. A vantagem dessa abordagem é que por serem variáveis reais o preço computacional é para implementação do algoritmo e leva a uma formulação natural e simplificada de escrever as equações para as componentes do potencial vetor e para o campo magnético interno  $B_z = (\nabla \times \vec{A})_z$ . De fato, aplicando a transformação (3.13) bem como a aproximação de diferenças finitas para  $B_z$ , segue que:

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{1}{\Delta x} \phi^x \hat{x} + \frac{1}{\Delta y} \phi^y \hat{y}, \\ B_{i,j}^z &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left( \phi_{i,j}^x + \phi_{i+1,j}^y - \phi_{i,j+1}^x - \phi_{i,j}^y \right).\end{aligned}\tag{3.14}$$

Outras quantidades importantes, são as derivadas parciais  $\partial_y B_z, \partial_x B_z$  que são as componentes  $x, y$  do termo  $\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \nabla \times \vec{B}$ . Aplicando as diferenças regressivas, obtemos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial B_z}{\partial y} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y^2} (\phi_{x(i,j+1)} - 2\phi_{x(i,j)} + \phi_{x(i,j-1)} + \phi_{y(i,j)} + \phi_{y(i+1,j-1)} - \phi_{y(i,j-1)} - \phi_{y(i+1,j)}), \\ \frac{\partial B_z}{\partial x} &= \frac{1}{\Delta x^2 \Delta y} (\phi_{y(i+1,j)} - 2\phi_{y(i,j)} + \phi_{y(i-1,j)} + \phi_{x(i,j)} + \phi_{x(i-1,j+1)} - \phi_{x(i,j+1)} - \phi_{x(i-1,j)}).\end{aligned}\tag{3.15}$$

### 3.1.3 Método de Euler

O método de Euler é um dos métodos numéricos mais simples e antigos para resolver equações diferenciais. Com raízes na família maior dos métodos de Runge-Kutta, é o método explícito mais básico para integração numérica de equações diferenciais com dependência temporal.

Apesar de sua simplicidade, o método de Euler tem se mostrado muito capaz de capturar o comportamento transiente de sistemas não lineares com baixos custos computacionais. Em particular, é usado para integrar a discretização no tempo de equações diferenciais, de modo a modelar sua evolução temporal e descrever vários comportamentos dinâmicos. A principal desvantagem é ao modelar problemas rígidos onde etapas impraticáveis de pequeno porte são necessárias para manter o erro limitado. Nesses casos, os métodos implícitos são preferidos, pois, eles podem alcançar a convergência com muito menos etapas, apesar de seus custos computacionais mais elevados (HOFFMAN; FRANKEL, 2001). No contexto dos modelos de Ginzburg-Landau, no entanto, este não é frequentemente o caso e o método de Euler direto pode alcançar desempenho computacional satisfatório e descrever com bastante precisão o comportamento transitório.

O método de Euler é usado para resolver iterativamente as equações diferenciais dependentes do tempo. Numericamente, o método calcula uma aproximação da solução como um ponto na linha tangente de sua curva. Por exemplo, uma equação diferencial de primeira ordem:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(u, t), \quad (3.16)$$

que pode ser expressa na forma discreta aplicando a definição de derivada para frente:

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = f(u(t), t) \quad (3.17)$$

de forma que  $f(u(t), t)$  corresponde a inclinação da reta tangente à solução em  $u(t)$ , e  $u(t + \Delta t)$  é justamente a aproximação da solução após um intervalo de tempo  $\Delta t$ . As soluções dinâmicas para a equação diferencial são então calculadas iterativamente para cada etapa usando a solução da etapa anterior iterativamente:

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta t f(u(t), t) \quad (3.18)$$

Após  $N_t$  passos de tempo, uma curva polinomial  $\{u(t + \Delta t), u(t + 2\Delta t), \dots, u(t + N_t \Delta t)\}$  é formada e aproxima a curva da solução. O erro entre as curvas de solução real e aproximada pode ser minimizado reduzindo o tamanho do passo  $\Delta t$ . Sendo um método de primeira ordem, o erro local é proporcional ao quadrado do tamanho do passo e o erro global ao tamanho do passo. Na prática, para garantir a estabilidade das soluções das equações de GL, o passo  $\Delta t$  deduzido por argumentos com os termos de difusão é :

$$\Delta t \leq \frac{\delta^2 \sigma}{4\kappa^2}, \quad \delta^2 = \frac{2\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2}. \quad (3.19)$$

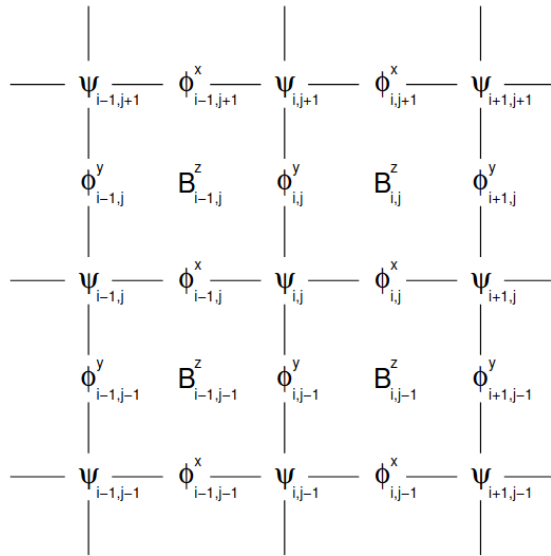
### 3.1.4 Discretização do Modelo de Duas Bandas

Nesta seção, explicitaremos a estrutura discreta das equações de Ginzburg-Landau de duas bandas dependentes do tempo convertidas em um sistema de equações algébricas obtido pelo método das diferenças finitas, variáveis de ligação e campos de calibre e sua evolução temporal através do método de Euler.

No equilíbrio, quando não há conversões de correntes normais em correntes supercondutoras, podemos assumir o gauge onde o potencial eletrostático é mantido nulo. Portanto, da Eq. (2.62), a evolução temporal em termos dos parâmetros microscópicos relevantes e em



Figura 15 – Os nós da malha para os campos  $\Psi$  e  $\phi$  no plano  $(x, y)$ .



Fonte: (WINIECKI; ADAMS, 2001)

unidades reduzidas, pode ser modelada no seguinte sistema de equações diferenciais parciais acopladas:

$$\begin{cases} \Gamma_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = -(-i\nabla - \vec{A})^2 \psi_1 + (\chi_1 - |\psi_1|^2) \psi_1 + \gamma \psi_2 \\ \Gamma_2 \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{1}{\alpha} (-i\nabla - \vec{A})^2 \psi_2 + (\chi_2 - |\psi_2|^2) \psi_2 + \frac{\kappa_2^2}{\alpha^2 \kappa_1^2} \gamma \psi_1 \\ \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{J}_S - \kappa_1^2 \nabla \times \vec{B} \end{cases} \quad (3.20)$$

onde,  $\vec{J}_S$  denota a densidade de supercorrente em unidades reduzidas:

$$\vec{J}_S = \Re[\psi_1^* (-i\nabla - \vec{A}) \psi_1] + \frac{\alpha \kappa_1^2}{\kappa_2^2} \Re[\psi_2^* (-i\nabla - \vec{A}) \psi_2]. \quad (3.21)$$

Considere a malha retangular representada na Fig. 15: um domínio contínuo com duas dimensões físicas  $L_x \times L_y$  em unidades espaciais de  $\xi_1$ . O domínio é discretizado em uma rede discreta de  $N_x \times N_y$  pontos, cujas coordenadas físicas são dadas por  $x = i\Delta x$  e  $y = j\Delta y$  e coordenadas discretas  $i = 0, 1, \dots, N_x$  e  $j = 0, 1, \dots, N_y$ . As dimensões das células unitárias discretas ao longo de cada dimensão é  $\Delta x = L_x/N_x$  e  $\Delta y = L_y/N_y$ . Visto que fenômenos físicos importantes não podem ser capturados adequadamente em uma rede espacial grosseira, o tamanho máximo de cada célula unitária não deve exceder  $0.3\xi_1$ . Definindo as matrizes  $\Psi_1, \Psi_2 \in \mathbb{C}^{N_x \times N_y}$ , cujos elementos são os valores dos parâmetros de ordem nos pontos da rede:

$$\begin{aligned} \Psi_{1i,j} &= \Psi_1(i\Delta x, j\Delta y), \quad i = 0, 1, \dots, N_x, \quad j = 0, 1, \dots, N_y, \\ \Psi_{2i,j} &= \Psi_2(i\Delta x, j\Delta y), \quad i = 0, 1, \dots, N_x, \quad j = 0, 1, \dots, N_y \end{aligned} \quad (3.22)$$

Em seguida, definimos as matrizes,  $\phi_x \in \mathbb{R}^{((N_x-1) \times N_y)}$ ,  $\phi_y \in \mathbb{R}^{(N_x \times (N_y-1))}$  que tomam os valores das componentes  $A_x$  e  $A_y$  do potencial vetor associadas respectivamente aos pontos médios das ligações horizontais e verticais da malha:

$$\begin{aligned}\phi_{x_{i,j}} &= \phi_x((i+1/2)\Delta x, j\Delta y), \quad i = 0, 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 0, 1, \dots, N_y \\ \phi_{y_{i,j}} &= \phi_y(\Delta x, (j+1/2)\Delta y), \quad i = 0, 1, \dots, N_x, \quad j = 0, 1, \dots, N_y - 1\end{aligned}\quad (3.23)$$

### 3.1.5 Equações de Movimento

Aplicando o método de Euler para evolução temporal e discretização espacial com diferenças finitas e campos de calibre reais, os pontos internos da malha para atualização dos parâmetros de ordem das bandas 1 e 2 são respectivamente:

$$\begin{aligned}\Psi_{1_{i,j}}^{n+1} &= \Psi_{1_{i,j}}^n + \frac{\Delta t}{\Gamma_1 \Delta x^2} [e^{-i\phi_{x_{i,j}}^n} \Psi_{1_{i+1,j}}^n - 2\Psi_{1_{i,j}}^n + e^{i\phi_{x_{i-1,j}}^n} \Psi_{1_{i-1,j}}^n] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Gamma_1 \Delta y^2} [e^{-i\phi_{y_{i,j}}^n} \Psi_{1_{i,j+1}}^n - 2\Psi_{1_{i,j}}^n + e^{i\phi_{y_{i,j-1}}^n} \Psi_{1_{i,j-1}}^n] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Gamma_1} (\chi_1 - |\Psi_{1_{i,j}}^n|^2) \Psi_{1_{i,j}}^n + \frac{\gamma \Delta t}{\Gamma_1} \Psi_{2_{i,j}}^n, \quad i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots, N_y - 1.\end{aligned}\quad (3.24)$$

e,

$$\begin{aligned}\Psi_{2_{i,j}}^{n+1} &= \Psi_{2_{i,j}}^n + \frac{\Delta t}{\alpha \Gamma_2 \Delta x^2} [e^{-i\phi_{x_{i,j}}^n} \Psi_{2_{i+1,j}}^n - 2\Psi_{2_{i,j}}^n + e^{i\phi_{x_{i-1,j}}^n} \Psi_{2_{i-1,j}}^n] \\ &+ \frac{\Delta t}{\alpha \Gamma_2 \Delta y^2} [e^{-i\phi_{y_{i,j}}^n} \Psi_{2_{i,j+1}}^n - 2\Psi_{2_{i,j}}^n + e^{i\phi_{y_{i,j-1}}^n} \Psi_{2_{i,j-1}}^n] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Gamma_2} (\chi_2 - |\Psi_{2_{i,j}}^n|^2) \Psi_{2_{i,j}}^n + \frac{\gamma \Delta t \kappa_2^2}{\alpha^2 \kappa_1^2 \Gamma_2} \Psi_{1_{i,j}}^n, \quad i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots, N_y - 1.\end{aligned}\quad (3.25)$$

Através das sucessivas transformações de Calibre, as componentes  $A_x$  e  $A_y$  do potencial vetor são então convertidas em componentes  $\phi_x$  e  $\phi_y$  das variáveis de ligações reais:

$$\begin{aligned}\phi_{x_{i,j}}^{n+1} &= \phi_{x_{i,j}}^n + \frac{\Delta t}{\sigma} J_{1x_{i,j}}^n + \frac{\Delta t \alpha \kappa_1^2}{\sigma \kappa_2^2} J_{2x_{i,j}}^n + \frac{\Delta t \kappa_1^2}{\sigma \Delta y^2} (\phi_{x_{i,j+1}}^n - 2\phi_{x_{i,j}}^n + \phi_{x_{i,j-1}}^n) \\ &+ \frac{\Delta t \kappa_1^2}{\sigma \Delta y^2} (\phi_{y_{i,j}}^n + \phi_{y_{i+1,j-1}}^n - \phi_{y_{i,j-1}}^n - \phi_{y_{i+1,j}}^n), \quad i = 0, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots, N_y - 1.\end{aligned}\quad (3.26)$$

$$\begin{aligned}\phi_{y_{i,j}}^{n+1} &= \phi_{y_{i,j}}^n + \frac{\Delta t}{\sigma} J_{1y_{i,j}}^n + \frac{\Delta t \alpha \kappa_1^2}{\sigma \kappa_2^2} J_{2y_{i,j}}^n + \frac{\Delta t \kappa_1^2}{\sigma \Delta y^2} (\phi_{y_{i+1,j}}^n - 2\phi_{y_{i,j}}^n + \phi_{y_{i-1,j}}^n) \\ &+ \frac{\Delta t \kappa_1^2}{\sigma \Delta y^2} (\phi_{x_{i,j}}^n + \phi_{x_{i-1,j+1}}^n - \phi_{x_{i,j+1}}^n - \phi_{x_{i-1,j}}^n), \quad i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 0, \dots, N_y - 1.\end{aligned}\quad (3.27)$$

onde,  $J_{kx}^n = \Im(\Psi_{k,i,j}^n e^{-i\phi_{x,i,j}^n} \Psi_{k,i+1,j}^n)$ ,  $J_{ky}^n = \Im(\Psi_{k,i,j}^n e^{-i\phi_{y,i,j}^n} \Psi_{k,i,j+1}^n)$  são as versões discretizadas das componentes  $x, y$  das densidades de supercorrente dos dois condensados.

Observe que, nessa nova metodologia, que podemos chamar método  $\phi - \Psi$  em analogia ao tradicional método  $U - \Psi$ , realizamos sequências de transformações de calibre. Assim, notamos que as equações assumem uma forma simples para implementação no caso das componentes do potencial vetor e do campo magnético interno  $B_z$ . Em contraste, as variáveis de ligações complexas necessitam introduzir um termo conhecido como "Bloop" (BUSCAGLIA; BOLECH; LÓPEZ, 2000), deduzido através do Teorema de Stokes, utilizado para atualização do campo magnético externo, o que deixa as equações um pouco mais complicadas para aproximações de segunda ordem nas condições de contorno do potencial vetor. A próxima etapa é a formulação das condições de contorno. Nessa dissertação analisamos primeiramente condições de contorno periódicas em ambas as direções que representa o caso de filmes finos supercondutores de duas componentes sujeitos a um campo magnético aplicado normal ao plano do filme, de forma que o problema pode ser modelado em um domínio periódico.

### 3.1.6 Condições de Contorno Periódicas

No caso de filmes finos supercondutores com dimensões infinitamente maiores que os comprimentos característicos escolhem-se uma célula padrão de tamanho  $L_x \times L_y$ . Considera-se que o comportamento do supercondutor observado nessa célula repete-se em todo o sistema, o que traduz em ter um sistema com condições de contorno periódicas. Para manter a invariância de calibre, para translações do potencial vetor e do parâmetro de ordem na rede, as condições de contorno periódicas são:

$$\begin{aligned} \vec{A}(x + L_x, y + L_y) &= \vec{A}(x, y) + \nabla \chi_\mu(x, y), \quad \mu = x, y, \\ \Psi_k(x + L_x, y + L_y) &= \Psi_k(x, y) e^{i \frac{2e}{\hbar c} \chi_\mu(x, y)}, \quad k = 1, 2 \end{aligned} \quad (3.28)$$

Para que o potencial vetor e o parâmetro de ordem sejam funções uni-valoradas, precisamos escolher o calibre adequadamente. As componentes do potencial vetor para um campo magnético uniforme aplicado na direção  $\hat{z}$  pode ser expresso como  $A_x = 0$ ,  $A_y = x H_a \hat{y}$ , onde  $H_a$  é o campo aplicado. Uma transformação de Calibre que forma a periodicidade desejada para evitar descontinuidades entre as células unitárias adjacentes é  $\chi_x = y H_a L_x = y \frac{\Phi}{L_y}$ ,  $\chi_y = 0$ , onde  $\Phi = H_a L_x L_y$ . Por outro lado, pela quantização de fluxo,  $\Phi = n \Phi_0$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , tal que as condições periódicas impõem restrições em que o campo magnético deve ser múltiplo inteiro

do quantum de fluxo na seção transversal correspondente ao plano  $(x, y)$ ,  $H_a = 2\pi n/(L_x L_y)$ .

Usando a invariância translacional para o caso de  $\vec{r}_x = L_x \hat{x}$  e o calibre de potencial dado pela equação (3.28 tem-se:

$$\begin{aligned} A_x(L_x, y) &= A_x(0, y), \quad A_y(L_x, y) = A_y(0, y) + \frac{2\pi n}{L_y}, \\ \Psi_k(L_x, y) &= \Psi_k(0, y) e^{i(2\pi n/L_y)y} \end{aligned} \quad (3.29)$$

e respectivamente na direção  $y$ :

$$\begin{aligned} A_x(x, L_y) &= A_x(x, 0), \quad A_y(x, L_y) = A_y(x, 0), \\ \Psi_k(x, L_y) &= \Psi_k(x, 0). \end{aligned} \quad (3.30)$$

A discretização das condições de contorno para o parâmetro de ordem são imediatas, enquanto para as componentes  $A_x, A_y$  do potencial vetor podemos expressá-las através das variáveis de ligação reais  $\phi_x, \phi_y$ . Na malha de simulação de tamanho  $N_x \times N_y$  os nós dos contornos possuem os índices  $(i = 0, j)$ ,  $(i = N_x - 1, j)$ ,  $(i, j = 0)$  e  $(i, j = N_y - 1)$  seguem então as condições de contorno discretas:

*Borda Inferior*  $(i, j = 0)$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{k(i,0)} &= \Psi_{k(i,N_y-2)} e^{i\phi_{y(i,N_y-2)}}, \\ \phi_{x(i,0)} &= \phi_{x(i,N_y-2)} \end{aligned} \quad (3.31)$$

*Borda Superior*  $(i, j = N_y - 1)$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{k(i,N_y-1)} &= \Psi_{k(i,1)} e^{-i\phi_{y(i,1)}}, \\ \phi_{x(i,N_y-1)} &= \phi_{x(i,1)} \end{aligned} \quad (3.32)$$

*Borda Esquerda*  $(i = 0, j)$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{k(0,j)} &= \Psi_{k(N_x-2,j)} e^{i\phi_{x(N_x-2,j)}} e^{-i(2\pi n/L_y)(j\Delta_y)}, \\ \phi_{y(0,j)} &= \phi_{y(N_x-2,j)} - 2\pi n/N_y \end{aligned} \quad (3.33)$$

*Borda Direita*  $(i = N_x - 1, j = 0)$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{k(N_x-1,j)} &= \Psi_{k(1,j)} e^{i\phi_{x(0,j)}} e^{i(2\pi n/L_y)(j\Delta_y)}, \\ \phi_{y(N_x-1,j)} &= \phi_{y(1,j)} + 2\pi n/N_y \end{aligned} \quad (3.34)$$

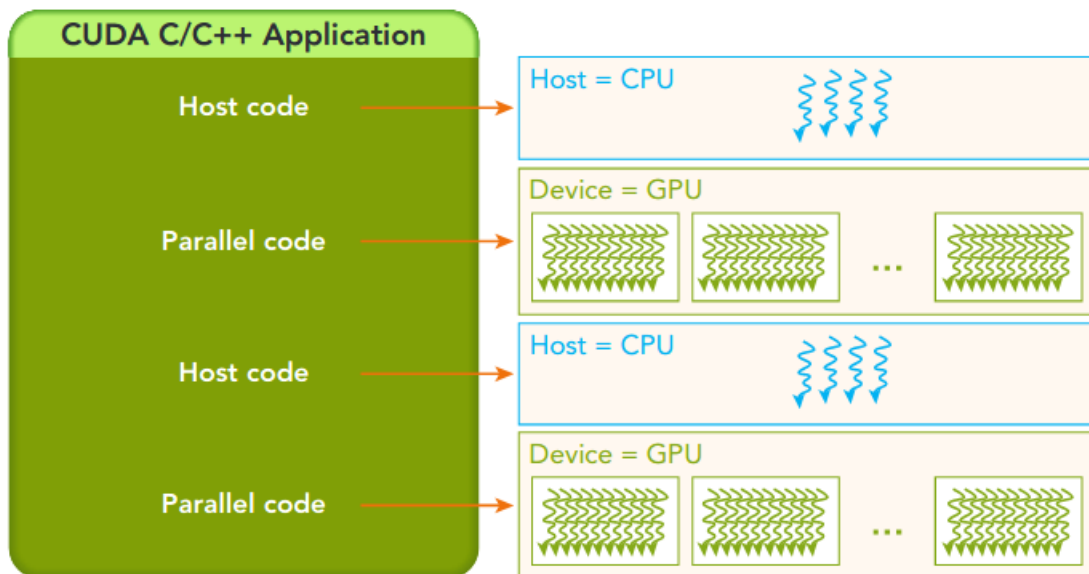
## 3.2 NOÇÕES BÁSICAS SOBRE PROGRAMAÇÃO PARALELA EM CUDA

As unidades de processamento gráfico (GPUs) são dispositivos poderosos que se tornaram predominantes na comunidade científica por sua capacidade de resolver uma variedade de problemas exigentes em prazos realistas. Sua arquitetura paralela de dados inerente permite que centenas de milhares de instruções sejam executadas simultaneamente, normalmente operando a mesma tarefa em dados distribuídos. Esta propriedade atraiu muita atenção entre os pesquisadores, principalmente na resolução de problemas que envolvem equações diferenciais parciais com métodos numéricos como diferenças finitas. Embora a aceleração de diferenças finitas na GPU tenha sido amplamente estudada na literatura, sua abordagem permanece estritamente dependente do problema. Parâmetros como a diferença, ordem (ou seja, primeiro, segundo, terceiro) e esquema de discretização (ou seja, implícito ou explícito) tem efeitos profundos sobre os custos computacionais do algoritmo, que no que lhe concerne influencia a estratégia de otimização escolhida. Resolver métodos implícitos de marcha no tempo, por exemplo, geralmente requer a solução de muitos sistemas tri-diagonais de equações, que não são claros como paralelizar. Em contraste, os métodos explícitos são inerentemente paralelos, o que os torna um bom alvo para aceleração de GPU.

CUDA (Compute Unified Device Architecture) (CHENG; GROSSMAN; MCKERCHER, 2014) é uma plataforma de computação paralela de propósito geral criada pela NVIDIA em 2006. CUDA C é uma extensão da linguagem de programação C/C++ com novas palavras-chave para habilitar computação heterogênea, sendo um programa que executa codificar tanto na CPU quanto em coprocessadores, como uma GPU. CUDA C é apenas uma das linguagens de programação que podem ser usadas para escrever aplicações heterogêneas, sendo usada exclusivamente nesta dissertação. Um programa CUDA consiste em código de host, executado na CPU, e código de dispositivo executado na GPU .

Um componente-chave do modelo de programação CUDA é o kernel - o código executado no dispositivo GPU. Como desenvolvedor, você pode expressar um kernel como um programa sequencial. Nos bastidores, CUDA gerencia o agendamento de kernels escritos por programadores em threads de GPU. Do host, você define como seu algoritmo é mapeado para o dispositivo com base nos dados do aplicativo e na capacidade do dispositivo GPU. A intenção é permitir que você se concentre na lógica de seu algoritmo de maneira direta (escrevendo código sequencial) e não se atole em detalhes de criação e gerenciamento de milhares de threads de GPU.

Figura 16 – Estrutura de um programa CUDA. As setas azuis e verdes indicam a execução de instruções, ou threads, na CPU e GPU, respectivamente.



Fonte: (CHENG; GROSSMAN; MCKERCHER, 2014)

O host pode operar independentemente do dispositivo para a maioria das operações. Quando um kernel é lançado, o controle é retornado imediatamente ao host, liberando a CPU para realizar tarefas adicionais complementadas por código paralelo de dados em execução no dispositivo. O modelo de programação CUDA é principalmente assíncrono, de modo que a computação da GPU realizada na GPU pode ser sobreposta à comunicação do dispositivo host. Um programa CUDA típico consiste em código serial complementado por código paralelo. Conforme mostrado na Fig. 16, o código serial (assim como o código paralelo da tarefa) é executado no host, enquanto o código paralelo é executado no dispositivo GPU. O código do host é escrito em ANSI C e o código do dispositivo é escrito usando CUDA C. Você pode colocar todo o código em um único arquivo de origem ou pode usar vários arquivos de origem para construir seu aplicativo ou bibliotecas. O compilador NVIDIA C (nvcc) gera o código executável para o host e o dispositivo. Ao iniciar um kernel CUDA do host, é necessário especificar quantos threads precisamos executar simultaneamente. Esses threads são organizados em uma hierarquia de dois níveis como bloco e grade. Um bloco consiste em um ou mais threads e uma grade consiste em um ou mais blocos. Simplificadamente, podemos expressar um fluxo de processamento típico de um programa CUDA segue este padrão:

1. Transferência de dados da memória da CPU para a memória da GPU.

2. Execução dos kernels para operar nos dados armazenados na memória da GPU.
3. Transferência de dados da memória da GPU para a memória da CPU.
4. Liberação de memória da GPU

### 3.2.1 Gerenciamento de Memória

Quando trabalhamos com ponteiros para representar arrays  $n$ -dimensionais na linguagem C, precisamos alocar memória identificando o tamanho do ponteiro e qual tipo pertence, tal como, inteiro, float, double, complex, entre outros e em seguida após realizar alguma operação, precisamos liberar a memória para evitar conflitos de armazenamento. No modelo de programação CUDA composto por um sistema híbrido host/device, cada um com seu próprio espaço de memória, podemos definir ponteiros na GPU e através das funções intrínsecas da linguagem CUDA podemos alocar memória no device, transferir dados entre o host e o device e vice-versa, e liberar de memória da GPU.

Em analogia ao malloc em C, a linguagem CUDA fornece várias funções para alocação de memória. A mais utilizada é o cudaMalloc:

```
cudaMalloc(void ** devPtr, size_t size).
```

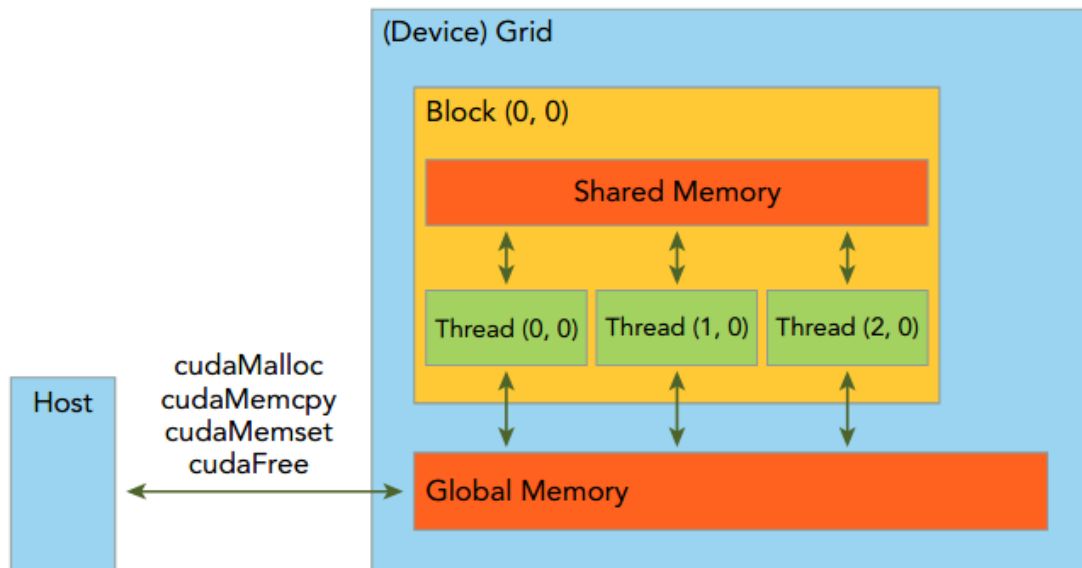
Esta função aloca uma faixa linear de memória do dispositivo com o tamanho especificado em bytes. A memória alocada é retornada por devPtr, que denota um ponteiro e size é o tamanho do ponteiro multiplicado pelo tipo do ponteiro, por exemplo,  $size = N * \text{sizeof}(\text{float})$ .

A função usada para transferir dados entre o host e o dispositivo é cudaMemcpy, em analogia ao memcpy em C, e sua assinatura de função é

```
cudaMemcpy(void *dst, const void *src, size_t count, cudaMemcpyKind kind).
```

Esta função copia os bytes especificados da área de memória de origem, apontada por src, para a área de memória de destino, apontada por dst, com a direção especificada por tipo, onde tipo assume um dos seguintes tipos: cudaMemcpyHostToHost, cudaMemcpyHostToDevice, cudaMemcpyDeviceToHost, cudaMemcpyDeviceToDevice, e esta função exibe um comportamento síncrono porque o aplicativo host bloqueia até que cudaMemcpy retorne e a transferência seja concluída.

Figura 17 – Ilustração do Processo de gerenciamento de memória em CUDA.



Fonte: (CHENG; GROSSMAN; MCKERCHER, 2014)

A função utilizada para liberar uma região da memória do device para onde o ponteiro do device devPtr aponta é o `cudaFree(void *devPtr)`, em analogia ao `free()` em C.

Outra função para transferência de memória muito útil quando trabalhamos com constantes declaradas no device, é o `cudaMemcpyToSymbol` e sua sintaxe tem a forma

```
cudaMemcpyToSymbol(const char * symbol, const void* src, size_t count, size_t offset =
0, enum cudaMemcpyKind kind = cudaMemcpyHostToDevice).
```

Tal função copia bytes de contagem da área de memória apontada por `src` para a área de memória apontada por `offset` de deslocamento desde o início do símbolo de símbolo. As áreas de memória não podem se sobrepôr, e `symbol` pode ser uma variável que reside no espaço de memória global ou constante, ou pode ser uma cadeia de caracteres, nomeando uma variável que reside no espaço de memória global ou constante. `kind` pode ser `cudaMemcpyHostToDevice`, `cudaMemcpyDeviceToHost` ou `cudaMemcpyDeviceToDevice`.

Os dois tipos mais importantes de memória são a memória global e a memória compartilhada. A memória global é análoga à memória do sistema da CPU, enquanto a memória compartilhada é semelhante ao cache da CPU. No entanto, a memória compartilhada da GPU pode ser controlada diretamente de um kernel CUDA C como pode ser observado na Fig. 17.



### 3.2.2 Kernels

A terminologia utilizada em CUDA define como host a parte da CPU e como device a parte da GPU. Em CUDA, uma função a ser executada no device é chamada kernel. O código paralelo é escrito em uma função kernel, que quando chamada, será executada N vezes em paralelo por N CUDA-threads.

Uma função do tipo kernel é construída utilizando-se a palavra-chave `__global__` na definição da função. O qualificador `__global__` informa que esta função será chamada no host e executada no device. O número de threads que executam este kernel é definido no host e passado na chamada do kernel. Sua chamada é especificada usando uma nova sintaxe de execução `<<blocos,threads>>`, logo após o nome do kernel.

Além de `__global__`, a linguagem CUDA introduz mais dois novos qualificadores para as funções: `__host__` e `__device__`. O qualificador `__host__` informa ao compilador nvcc que esta função será chamada e executada apenas no host. Já o qualificador `__device__` permite que as funções sejam chamadas e executadas apenas na GPU. Utilizando os qualificadores `__host__` e `__device__` em sequência indica ao compilador que a função será executada tanto no host como no device simultaneamente. Outros qualificadores também utilizados são o `__constant__` que é utilizado opcionalmente com `__device__` para declarar variáveis que residem no espaço de memória constante. O quantificador `__shared__` reside no espaço de memória compartilhada de cada bloco de threads e é apenas acessível pelas threads que estão nos blocos.

A sincronização de barreira é comumente usada em aplicativos paralelos para coordenar atividades paralelas. No CUDA, os threads dentro de um bloco são sincronizados usando a função CUDA `__syncthreads()`. Quando uma função do kernel chama `__syncthreads()`, todos os threads em um bloco esperam no local de chamada até que cada thread no bloco conclua sua fase de execução e alcance o local. Portanto, `__syncthreads()` pode ser usado para garantir que cada thread no bloco tenha concluído sua etapa atual de execução antes de passar para a próxima etapa de execução. Embora esta função de sincronização de bloco seja útil em muitos aplicativos para coordenar a comunicação entre threads dentro de um bloco, `__syncthreads()` pode reduzir o desempenho do aplicativo, pois a função força alguns warps a permanecerem ociosos até que outros concluam seu trabalho.

### 3.2.3 Hierarquia de Threads

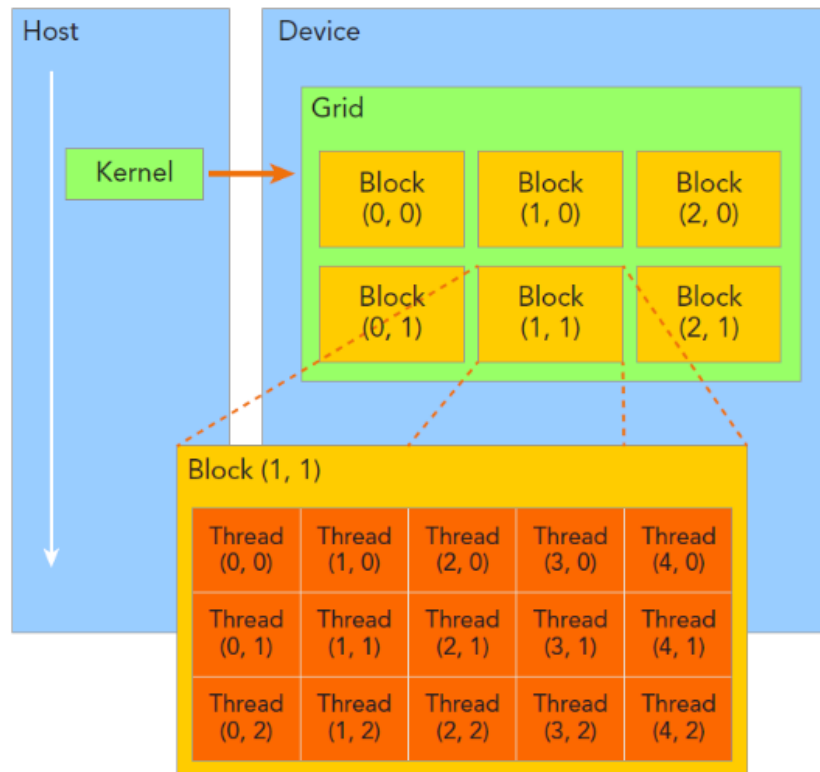
Quando uma função do tipo kernel é chamada no host, a execução é transferida para o device, onde um elevado número de threads é criado e cada thread executa as instruções definidas no kernel. Saber como as threads são organizadas é fundamental para desenvolver código em CUDA. O escalonamento de threads na plataforma CUDA é feito por uma hierarquia de dois níveis, introduzindo dois novos conceitos: bloco de threads e grid de blocos(). É com esses conceitos que se organiza a repartição dos dados entre as threads, bem como sua organização e distribuição no hardware.

**Blocos de Threads:** Um bloco é a unidade básica de organização das threads e de mapeamento para o hardware. Um bloco de threads é alocado em um SM (Multiprocessador de Transmissão), e pode ter até três dimensões,  $x$ ,  $y$  e  $z$ . As threads pertencentes a um mesmo bloco podem cooperar entre si, por instruções de sincronismo entre as threads e acessar os mesmos endereços da memória compartilhada.

**Grid de Blocos:** A grid é a unidade básica onde estão distribuídos os blocos. O grid é a estrutura completa de distribuição das threads que executam um kernel. É no grid que está definido o número total de blocos e de threads que serão criados e gerenciados pela GPU para uma dada função. Um grid pode ter até 3 dimensões  $x$ ,  $y$  e  $z$ . O bloco de construção da arquitetura da GPU é conhecido como multiprocessador de transmissão (SM). Cada SM tem centenas de núcleos CUDA que suportam a execução simultânea de centenas de threads. Uma GPU geralmente tem vários SMs. Como resultado, milhares de threads podem ser executados simultaneamente em uma única GPU. Quando um kernel é iniciado, os blocos de threads são distribuídos entre os SMs disponíveis. O número de blocos e threads que podem residir simultaneamente em um SM depende da capacidade disponível do SM. Quando os blocos de thread alocados terminam a execução, novos blocos são lançados para preencher as posições desocupadas nos SMs. Os blocos de threads nos SMs são divididos em grupos de 32 threads consecutivos chamados warps. Todos os threads no mesmo warp executam a mesma instrução em simultâneo. O número de ciclos de clock entre uma instrução sendo emitida e sendo completada é definido como latência. A latência de um warp pode ser escondida mudando a execução para outros warps se um número suficiente de warps ativos estiverem disponíveis em um SM. Portanto, um melhor desempenho pode ser alcançado quando um grande número de threads estão disponíveis para execução na GPU assim como é mostrado na Fig. 18.

O número de threads por bloco e de blocos por grid é especificado na chamada do kernel

Figura 18 – Threads CUDA são organizados em blocos e os blocos são organizados em grids. Esses blocos e grids podem ser 1D, 2D ou 3D, e esta figura ilustra o caso 2D. Todos os threads em uma grade executam a mesma função do kernel, e o kernel é iniciado a partir do host.



Fonte: (CHENG; GROSSMAN; MCKERCHER, 2014)

na sintaxe «Nblocos,Nthreads». A identificação das threads é então baseada nesses conceitos. Cada thread tem seu índice, que a identifica unicamente na execução do kernel. Para a identificação dos blocos e threads, a plataforma fornece variáveis especiais conhecidas como built-in variables. Elas só são válidas em funções executadas no device. CUDA fornece também um tipo especial para definição das dimensões  $x$ ,  $y$  e  $z$ :  $dim3(x, y, z)$ .

- gridDim: número de blocos em uma grid
- blockDim: contém o número de threads no bloco
- blockIdx: índice do bloco de thread atual na grid
- threadIdx: contém o índice da thread atual dentro de seu bloco

A ideia é que cada thread obtenha seu índice calculando o deslocamento para o início de seu bloco e o índice do bloco vezes o tamanho do bloco e adicionando o índice do thread dentro do bloco. Através dessas variáveis é possível determinar um identificador único para cada thread

(index) e também define o avanço para o número total de threads na grid (stride) , através da sua combinação da seguinte forma:

$$\text{index} = \text{blockIdx.x} * \text{blockDim.x} + \text{threadIdx.x}$$

$$\text{stride} = \text{blockDim.x} * \text{gridDim.x}$$

Existe um limite para o número de threads por bloco, já que as threads de um bloco são alocadas em um mesmo SM e devem compartilhar os recursos. Atualmente o número máximo de threads em um bloco é 1024.

As threads podem acessar múltiplos espaços de memória durante sua execução. Cada thread possui seu espaço privado de memória local. Threads pertencentes a um mesmo bloco podem cooperar entre si e compartilham o mesmo espaço de memória compartilhada (Shared Memory). As threads de um grid possuem uma visão geral do mesmo espaço de memória global (Global Memory), e ainda podem acessar duas outras categorias de memória: memória de textura (Texture Memory) e memória constante (Constant Memory), tipos especiais de memória com categorias de acesso para aplicações específicas. A memória local dependendo do seu tamanho pode ser mapeado em registradores ou na memória global. Os registradores são categorias de memória com acesso mais rápido, seguida pela memória compartilhada. Sua latência é de apenas poucos ciclos. O acesso à memória global tem uma latência muito maior da ordem de centenas de ciclos. As memórias de textura e constante possuem um tempo de acesso que pode chegar à mesma ordem de grandeza da memória global. O correto dimensionamento da memória local influencia muito no desempenho da aplicação, já que a latência de acesso à memória global é centenas de vezes maior do que nos registros.

Para ajudar no endereçamento complexo com base no índice do thread, um aplicativo também pode especificar um bloco como uma matriz bidimensional ou tridimensional de tamanho arbitrário e identificar cada thread usando um índice de 2 ou 3 componentes. Para matrizes bidimensionais de tamanho  $(N_x \times N_y)$  o índice de threads achatado (flattened) que converte as componentes  $(i, j)$  da matriz para forma unidimensional é  $\text{IDX} = i + j * N_x$  é mais conveniente quando  $N_x > N_y$  ou  $i * N_y + j$  se  $N_y > N_x$ . Para matrizes tridimensionais com componentes  $(i, j, k)$  de dimensões  $N_x \times N_y \times N_z$  o índice pode ser escrito como  $\text{IDX} = i + j * N_x + k * N_x * N_y$ .

GPUs CUDA têm muitos processadores paralelos agrupados em Streaming Multiprocessors ou SMs. Cada SM pode executar vários blocos de threads simultâneos. Se considerarmos um problema unidimensional arbitrário tal que o tamanho da malha é  $N$ , a definição correta para

o número de threads deve respeitar o máximo de 1024 threads por bloco, e como regra prática os blocos de threads podem ser determinados pela divisão do tamanho  $N$  pela quantidade de threads por bloco,  $N_{threads}$ , respeitando o caso em que  $N$  não é múltiplo do tamanho do bloco, para isso, utilizamos a função teto (Ceil), que converte o número inteiro,  $N_{blocos}$ , no menor número inteiro maior ou igual a  $N_{blocos}$ . No programa o cálculo dessa função Ceil pode ser feita da forma: `int Ceil( int N, int Nthreads){ return (N % Nthreads != 0) ? (N / Nthreads + 1) : (N / Nthreads); }` onde, o operador `%` é usado para calcular o resto da divisão inteira.

## 4 RESULTADOS

Neste capítulo, será realizado um estudo minucioso das propriedades da matéria de vórtices, utilizando como referência o modelo de Ginzburg-Landau de duas bandas. Serão apresentadas, de forma particular, as interações existentes entre os vórtices e as configurações espaciais da penetração do fluxo magnético. Ao longo do capítulo, será demonstrado que, nas proximidades da temperatura crítica supercondutora, o diagrama de fase das configurações de vórtice no modelo de duas bandas apresenta similaridades qualitativas com os supercondutores de uma banda. Nesse sentido, ele contempla domínios de supercondutividade do tipo I, tipo II e inter-tipo (IT) com configurações não convencionais de fluxo. Cabe destacar que, na temperatura crítica, o domínio IT é degenerado em um único ponto, separando os regimes tipo I e tipo II.

### 4.1 MOTIVAÇÃO

Como vimos nos capítulos anteriores, materiais supercondutores convencionais do tipo BCS com o parâmetro de Ginzburg-Landau (GL)  $\kappa = \lambda/\xi$  próximo ao valor crítico  $\kappa_0 = 1/\sqrt{2}$  (materiais com baixo valor de kappa) exibem estruturas espaciais de penetração de fluxo magnético que diferem tanto dos supercondutores do tipo-II quanto dos do tipo-I. Essas estruturas, descobertas anteriormente em supercondutores Nb, V e Ta, são referidas como supercondutores do tipo II/I ou intertipo (IT). A análise teórica dessas estruturas de vórtices, referentes ao estado misto intermediário (IMS), exige abordagens além da teoria padrão de GL, que atribui o IMS a um único valor independente de temperatura de  $\kappa = \kappa_0$  e falha em descrever um intervalo finito de valores de kappa onde o IMS é observado em  $T < T_c$ .

A análise de estabilidade com a teoria microscópica BCS da rede de vórtices de Abrikosov e do estado misto em geral ajuda a determinar os limites do domínio IT no plano  $\kappa - \tau$ . Outra abordagem proeminente é a expansão perturbativa das equações microscópicas com respeito à vizinhança  $\tau = 1 - T/T_c$  da temperatura crítica e para  $\delta\kappa = \kappa - \kappa_0$ . A expansão perturbativa leva a expressões simples para os contornos do domínio IT, que coincidem com os cálculos da teoria microscópica para pequenos valores de  $\tau$ .

A expansão perturbativa revelou a universalidade da física por trás do domínio IT finito. A principal contribuição para a série de expansão é a teoria de GL em  $\kappa = \kappa_0$ , que é auto dual e infinitamente degenerada. Essa degenerescência significa que todas as configurações de fluxo

obtidas pela solução das equações de GL têm a mesma energia de Gibbs. A degenerescência é quebrada em  $\tau < 0$  e  $\delta\kappa \neq 0$  pelas contribuições das próximas ordens na expansão. As correções dão origem a um intervalo finito IT onde são observadas configurações exóticas de vórtices. Esse mecanismo de formação do domínio intertipo IT é bastante geral e não depende dos detalhes da remoção da degenerescência.

A degenerescência da teoria de GL pode ser removida por vários fatores, como a existência de múltiplos gaps supercondutores. Esses supercondutores multibandas são frequentemente descritos usando as equações de GL para cada função de gap acopladas por uma contribuição de interação do tipo Josephson linear. Na vizinhança da temperatura crítica e na ausência de simetria espacial, o modelo reduz a teoria de GL de uma componente com seu próprio ponto B degenerado. No entanto, as correções morrem para a estrutura multi-gap da teoria, que quebra a degenerescência quando  $T < T_c$  levando a um domínio IT finito no espaço de parâmetros do modelo.

Esses modelos multicomponentes foram propostos para descrever a supercondutividade em materiais onde o emparelhamento ocorre em várias folhas isoladas da superfície de Fermi - os chamados supercondutores multibandas. Por exemplo, o modelo de GL de duas componentes foi empregado para investigar o  $MgB_2$  de duas bandas e argumentou para admitir configurações de vórtices exóticas não observadas em materiais com uma única banda.

No entanto, descobriu-se mais tarde que, tanto nos modelos de duas bandas como nos de banda única, a interação entre vórtices passa por uma transformação semelhante, mudando de repulsão para atração, devido à interação não monotônica entre eles. Além disso, foi observado que o diagrama de fases do domínio IT do modelo de dois componentes, que é determinado por mudanças nos padrões de magnetização e nas interações entre vórtices, apresenta uma topologia semelhante ao do supercondutor de banda única.

Em resumo, a análise teórica da estabilidade de estruturas de vórtices em supercondutores tipo II/I ou intertipo é um tópico de grande interesse. Abordagens como a teoria microscópica BCS da rede de vórtices de Abrikosov e a expansão perturbativa das equações microscópicas em torno da temperatura crítica têm ajudado a determinar os limites do domínio IT no espaço de parâmetros do modelo. Modelos multicomponentes têm sido propostos para descrever a supercondutividade em supercondutores multibandas, mas a interação vórtice-vórtice não monotônica e a topologia do diagrama de fases do domínio IT são desafios que ainda precisam ser compreendidos.

Uma análise baseada na teoria da perturbação, bem como os cálculos numéricos para a

---

magnetização e interação de vórtices apontam para que o modelo de GL de duas componentes também possa ser usado para descrever propriedades da matéria de vórtices no domínio IT em supercondutores de uma banda. No entanto, até agora não foi feita uma comparação direta da distribuição espacial de fluxo nos materiais de duas e uma banda. Neste trabalho nós investigamos as configurações de vórtices para o modelo de GL de duas componentes e comparamos os resultados com os anteriores para um supercondutor BCS de uma única banda, obtido usando a teoria da perturbação.

## 4.2 ESTRUTURA DAS SIMULAÇÕES

As equações de Ginzburg-Landau são amplamente utilizadas em física para modelar fenômenos como supercondutividade, superfluidos e transições de fase. Para solucionar essas equações em sistemas de tamanho real, são necessárias simulações escaláveis que possam lidar com grandes quantidades de dados e computações.

A plataforma CUDA, desenvolvida pela NVIDIA, oferece suporte para simulações escaláveis usando a arquitetura paralela de suas GPUs. Através da programação em CUDA, é possível executar cálculos intensivos de forma paralela e distribuída em milhares de threads simultâneos, permitindo assim a solução de sistemas complexos de equações de Ginzburg-Landau em tempos razoáveis.

A importância de realizar simulações escaláveis em CUDA para a solução das equações de Ginzburg-Landau reside no fato de que essas equações têm aplicações práticas em diversas áreas, incluindo engenharia de materiais, física de partículas e modelagem de sistemas biológicos. Com simulações escaláveis em CUDA, é possível investigar e entender esses sistemas com mais precisão e eficiência, além de permitir o desenvolvimento de novas tecnologias e materiais.

Neste trabalho, todos os cálculos numéricos foram realizados utilizando a versão 11.2 da plataforma CUDA com a placa Nvidia RTX 2080 TI, disponível nos computadores do Laboratório de Supercondutividade (Superlab - Sala B215), no Departamento de Física da UFPE, do qual o prof. Albino é o responsável.



### 4.2.1 Domínio e Parâmetros Computacionais

A estrutura computacional empregada para a determinação da melhor aproximação das equações TDGL compreende um domínio retangular com dimensões de  $N_x$  por  $N_y$  células unitárias, de tamanho  $(\Delta x, \Delta y)$  nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente. Nossas simulações utilizaram amostras configuradas com dimensões de  $N_x = 800\xi_1$  e  $N_y = 600\xi_1$ , apresentando células unitárias de tamanho  $\Delta x = \Delta y = 0.25\xi_1$ . Essa escolha foi resultado de testes empíricos que comprovaram sua capacidade em demonstrar propriedades físicas desejadas, sem sobrecarregar ou subutilizar a unidade de processamento gráfico (GPU).

Neste estudo, resolvemos numericamente as equações (3.20) para investigar as configurações de vórtices no modelo de duas componentes. Inicialmente, concentramo-nos no modelo de validação de domínio, caracterizado por temperaturas próximas de  $T_c$ . As configurações de vórtices obtidas foram comparadas com aquelas emergentes em supercondutores BCS de uma única componente no domínio IT, as quais foram investigadas utilizando um tratamento perturbativo da teoria microscópica BCS.

Para a análise do modelo de duas componentes, utilizamos os parâmetros previamente empregados na Ref. (SILVA et al., 2015), a fim de facilitar a comparação com resultados anteriores:  $\kappa_1 = 1,5$ ,  $n_1 = 0,47$ ,  $\lambda_{11} = 1,55$ ,  $\lambda_{12} = 0,09$ , e  $\lambda_{22} = 1,3$ . Sob esses parâmetros, obtivemos um valor de  $S = 1,508$ , enquanto que a razão entre as temperaturas obtidas por meio da resolução das equações linearizadas foi  $T^*/T_c = 0,755$ . Ressalta-se que, para esses parâmetros, a banda "forte" corresponde a uma banda de um supercondutor do tipo II com  $\kappa_1 > \kappa_0$  quando desacoplada da outra banda. O parâmetro remanescente do sistema é a razão entre as velocidades de Fermi,  $\alpha = v_1/v_2$ , que foi utilizada como variável ao lado da temperatura. Mantivemos o campo magnético constante em nossos cálculos, e, conseqüentemente, o número de vórtices constante.

### 4.2.2 Pipeline de Processamento em CUDA

Cada simulação do sistema começa no estado normal, em que o parâmetro de ordem de cada banda,  $\psi_1$  e  $\psi_2$ , é igual a zero em todos os pontos da malha. Fixando o número de vórtices, realizamos as simulações seguindo o processo de resfriamento com campo (field cooling). O sistema é resfriado diminuindo a temperatura em intervalos de  $\Delta T = 0.005T_{c_1}$  até atingir o limite  $T = 0.75T_{c_1}$ . Para cada valor de temperatura, o sistema é relaxado até atingir

um estado estacionário, que pode corresponder a um estado estacionário termodinâmico. O processo de relaxação é avaliado pela variação média do parâmetro de ordem da banda 1 a cada 100.000 passos de integração temporal. Quando a variação alcança uma tolerância da ordem de  $10^{-7}$ , consideramos que o sistema alcançou o estado estacionário, e a simulação continua para o próximo conjunto de parâmetros. Nessa simulação, o tamanho do passo de tempo  $\Delta t$  é escolhido de acordo com a regra de estabilidade para soluções com integração temporal com o método de Euler.

Nas Figs. 19, 20 apresentamos a estrutura de diretório e pipeline de processamento utilizada para implementar o sistema de duas bandas e obter os resultados dessa dissertação em linguagem CUDA. Em sequência, segue a descrição de cada etapa do Pipeline:

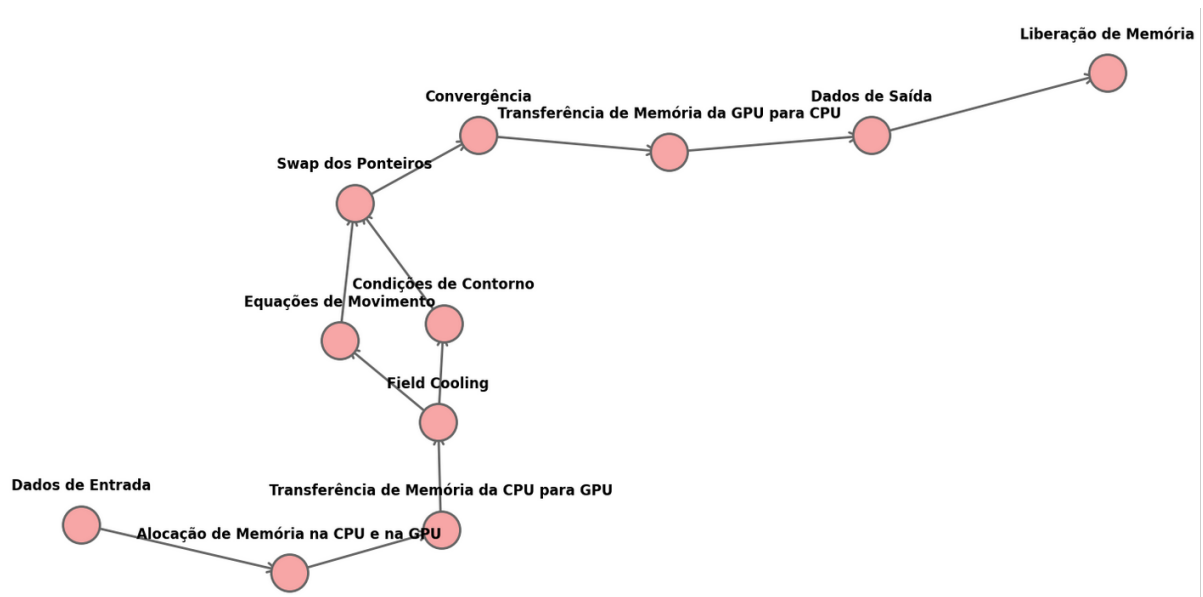
Figura 19 – Diagrama de Árvore do Diretório do Projeto



Fonte: O autor (2023)

1. Dados de Entrada, os dados que serão processados são carregados na memória da CPU.

Figura 20 – Arquitetura do Pipeline de Processamento



Fonte: O autor (2023)

Esses dados consistem de dois arquivos .txt, o primeiro arquivo, condições iniciais.txt, contem as condições para o parâmetro de ordem das bandas 1 e 2 e dos campos auxiliares. No arquivo parâmetros.txt, contém os dados do domínio da simulação, parâmetros microscópicos do material, como termo de relaxação, elementos da matriz de acoplamento elétron-fônon, densidade parcial de estados de cada banda, constante de Ginzburg-Landau da primeira banda, quantidade máxima de passos de tempo entre outros.

2. Alocação de Memória na CPU e na GPU: A etapa de alocação de memória na CPU e na GPU é feita através de funções como "calloc" e "cudaMalloc". A alocação de memória é feita em duas etapas: primeiro, é alocado espaço na memória da CPU para os dados que serão transferidos para a GPU. Em seguida, é alocado espaço na memória da GPU para os dados que serão processados. É preciso tomar cuidado na alocação de memória para definir corretamente as dimensões dos ponteiros.
3. Transferência de Memória da CPU para GPU: Com a alocação de memória completa, os dados são transferidos da memória da CPU para a memória da GPU utilizando a função "cudaMemcpy". É importante notar que a transferência de memória é uma operação custosa em termos de tempo, por isso é importante minimizar o número de transferências necessárias durante a execução do programa.

4. Field Cooling: Esta etapa representa o processamento dos dados na GPU, utilizando o procedimento de resfriamento do sistema. Basicamente consiste de dois loops aninhados, um primeiro loop sobre a temperatura e outro loop de integração temporal.
5. Equações de Movimento: Dentro do loop aninhado da etapa de Field Cooling, são chamadas as funções globais escritas em CUDA para serem processadas na GPU, essas equações de movimento são mostradas no diagrama de árvore como SolvePsi1, SolvePsi2, SolveUx e Solve Uy. Elas consistem da integração sobre os pontos interiores da malha.
6. Condições de Contorno: Após o cálculo das equações de movimento, as condições de contorno do sistema são aplicadas. As condições de contorno são mostradas no diagrama de árvore como Psi1BCx, Psi1BCy, Psi2BCx, Psi2BCy, UxBC, UyBC. Elas consistem da integração sobre os pontos de contorno da malha periódica em ambas as direções.
7. Swap dos Ponteiros: Nesta etapa, os ponteiros são "trocados", para permitir que os dados processados na etapa anterior possam ser utilizados como entrada na próxima iteração. Essa etapa é importante para garantir a convergência do processo e deve ser realizada com cuidado para evitar erros. Existem varias formas de fazer essa troca, e uma forma simples e que preserva a performance é utilizar a biblioteca iostream e utilizar a função `std::swap`.
8. Convergência: O processo de convergência representa a repetição de iteração temporal até que a variação da média do parâmetro de ordem da banda 1 seja menor ou igual a tolerância estabelecida, geralmente definida na ordem de  $10^{-7}$ . É importante estabelecer a convergência para ter um controle e ideia da quantidade de passos temporais necessários para alcançar o estado estacionário. No nosso sistema em questão, a maioria dos casos, a convergência é atingida apenas da ordem de 5 milhões a 10 milhões de interações. Isso ocorre devido ao fato do algoritmo utilizado ter convergência temporal de primeira ordem, o que posteriormente iremos resolver implementando o método de Crank-Nicolson.
9. Transferência de Memória da GPU para CPU: Quando a convergência é atingida, o resultado final é transferido da memória da GPU para a memória da CPU utilizando a função `"cudaMemcpyDeviceToHost"`. É importante notar que a transferência de memória nesse

sentido também é uma operação custosa em termos de tempo e deve ser minimizada sempre que possível.

10. Dados de Saída: Com os dados de saída na memória da CPU, podemos gerar arquivos com a densidade de pares de Cooper para cada banda, energia de interação entre os vórtices, indução magnética e com os dados salvos em disco, realizamos os gráficos de estudo com linguagem Python.
11. Liberação de Memória: Finalmente, é necessário liberar a memória alocada tanto na CPU quanto na GPU utilizando funções como "free" e "cudaFree".

### 4.3 PROPRIEDADES MAGNÉTICAS

Supercondutores são materiais que apresentam uma condutividade elétrica perfeita, sem nenhuma resistência elétrica quando estão abaixo de uma determinada temperatura crítica. Idealmente, eles são diamagnéticos quando no estado de Meissner, o que significa que eles expulsam completamente o campo magnético aplicado e, portanto, não possuem magnetização remanescente.

No entanto, os supercondutores também podem exibir comportamento paramagnético devido ao fluxo magnético aprisionado em sua estrutura. Essa resposta paramagnética em supercondutores é fraca na ausência de pinning e cessa com o aumento da espessura da amostra. No entanto, em supercondutores de várias bandas, a resposta paramagnética pode ser muito grande e, em alguns casos, ela pode ser várias vezes maior do que a resposta diamagnética de Meissner para o mesmo campo magnético aplicado.

A aparência dessa resposta paramagnética pode ser atribuída à ampla transição entre supercondutores convencionais Tipo I e Tipo II. Nessa transição, os vórtices de Abrikosov interagem de forma não-monotônica e os efeitos de muitos corpos se tornam importantes. Isso causa configurações exóticas de fluxo magnético, como clusters de vórtices, labirintos, stripes, coexistência da rede de vórtices com domínios Meissner, entre outros.

Com base em nosso objetivo de evidenciar a complexidade do sistema em análise, optamos por apresentar o diagrama de fases como meio de ilustrar diversas configurações exóticas de fluxo encontradas o potencial de interação entre os vórtices. Tal escolha foi feita para corroborar a natureza não monótona do fenômeno estudado.

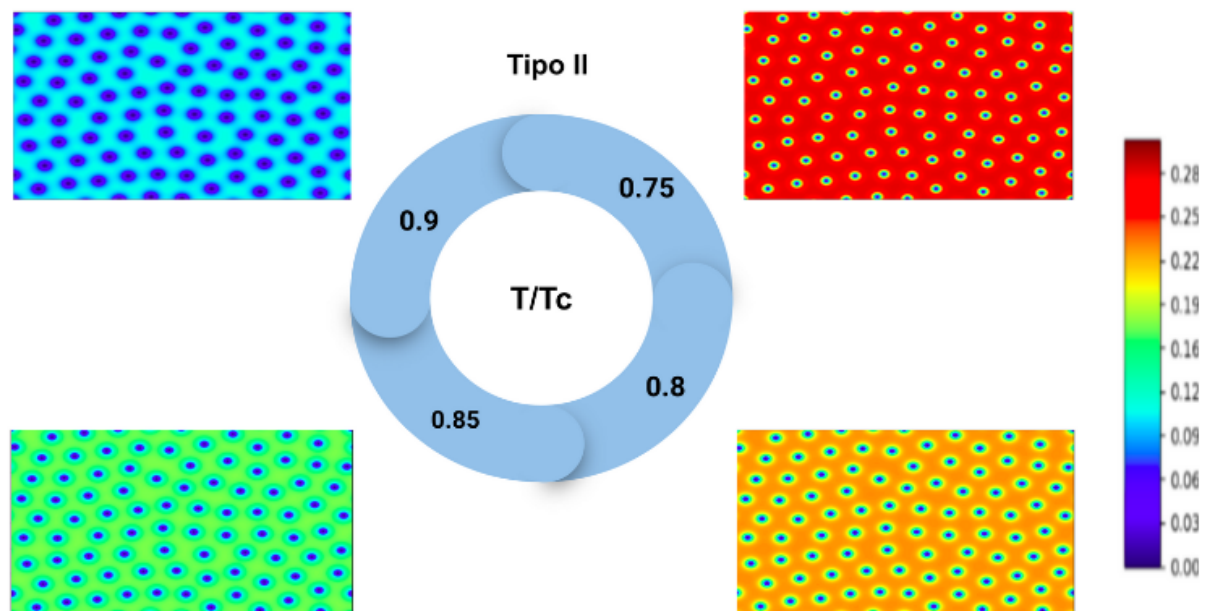
Para complementar a análise, também realizamos a análise espectral da indução magnética, e historamas de distribuição dos vórtices na rede e da distância entre eles. Esses resultados foram de suma importância para uma compreensão mais detalhada do comportamento do sistema e contribuíram significativamente para o desenvolvimento de nossas conclusões.

Em suma, nossa escolha por essas abordagens metodológicas foi fruto de um esforço para fornecer uma análise aprofundada e detalhada do sistema estudado.

### 4.3.1 Diagrama de Fases

Apresentamos a seguir os resultados obtidos para as configurações de vórtices do estado misto em um sistema de duas bandas. Para este estudo, verificamos o domínio IT ao variar o valor de  $\alpha$  entre 0,8, 0,7, 0,6 e 0,5 em diferentes temperaturas  $T$ . Os cálculos foram realizados a um valor fixo de fluxo magnético. Os resultados foram analisados através da distribuição espacial dos valores absolutos do parâmetro de ordem  $\psi_1$ , exibidos nos painéis das Figs. 21 - 24.

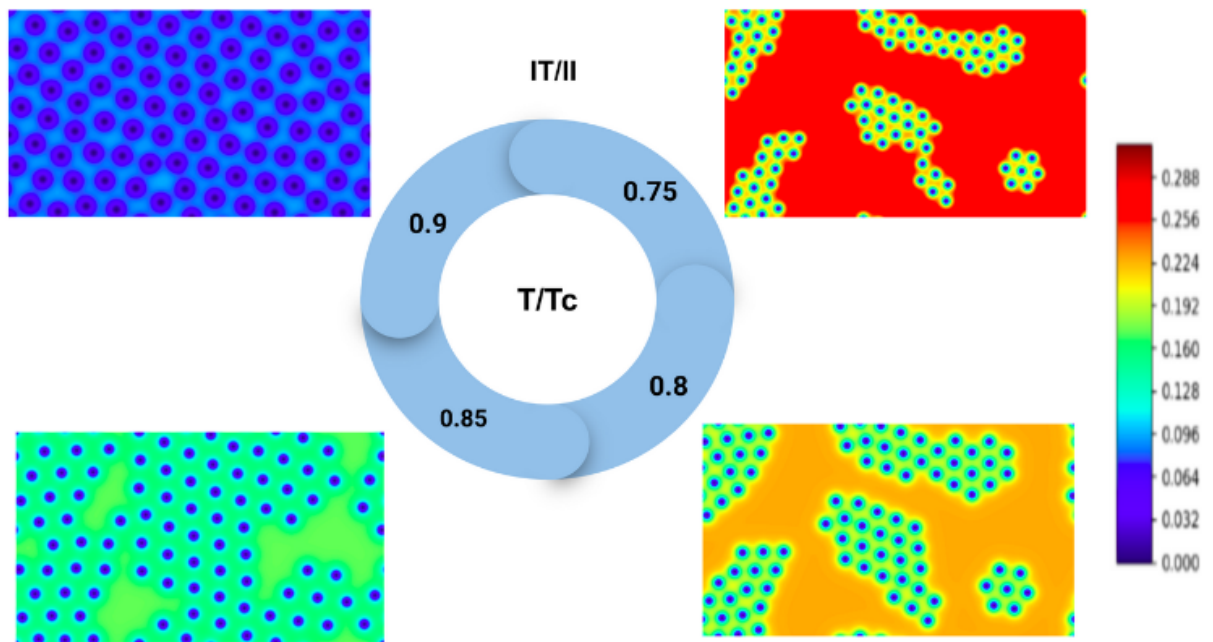
Figura 21 – Perfil Espacial da Banda 1,  $|\Psi_1|^2$  para  $\alpha = 0.8$  exibindo o comportamento de um supercondutor do tipo II com uma rede de Abrikosov levemente distorcida.



Fonte: O autor (2023)

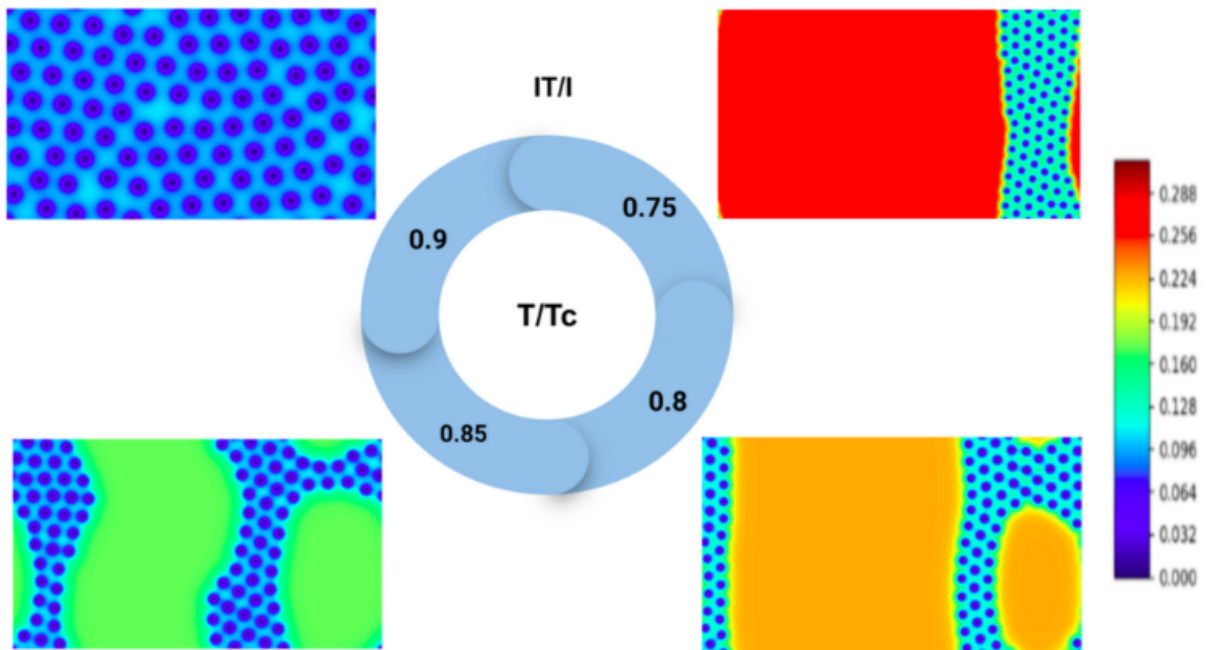
Observou-se que, como esperado, o valor médio absoluto do parâmetro diminui para maiores valores de  $T$ . Para valores maiores de  $\alpha = v_1/v_2$ , os vórtices formam uma rede triangular de Abrikosov, semelhante a um supercondutor padrão do tipo II. Por outro lado, para valores

Figura 22 – Perfil Espacial da Banda 1,  $|\Psi_1|^2$  para  $\alpha = 0.7$  exibindo a transição de uma rede de abrikosov a altas temperaturas até a fragmentação da rede em clusters de vórtices.



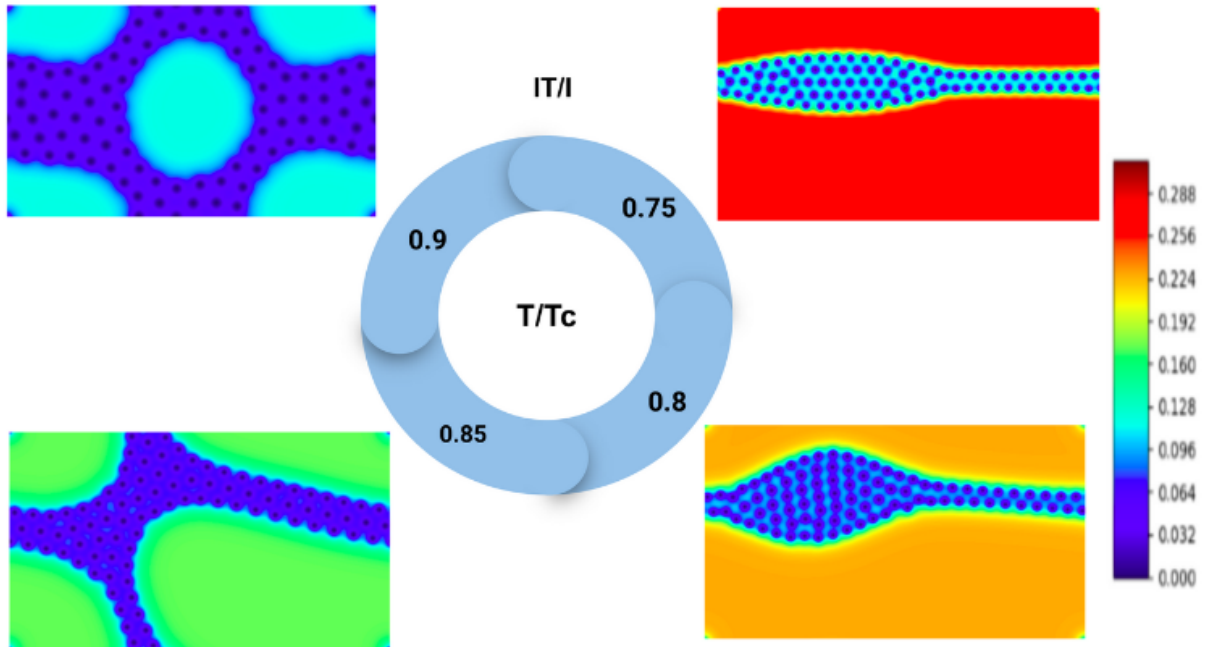
Fonte: O autor (2023)

Figura 23 – Perfil Espacial da Banda 1,  $|\Psi_1|^2$  para  $\alpha = 0.6$  exibindo a transição de uma rede de abrikosov a altas temperaturas e a medida que a temperatura diminui para  $T/T_c = 0.85$  a materia de vórtices muda formando labirintos coexistindo com regiões Meissner e se estabiliza em stripes para  $T/T_c = 0.7$ .



Fonte: O autor (2023)

Figura 24 – Perfil Espacial da Banda 1,  $|\Psi_1|^2$  para  $\alpha = 0.5$ . Em altas temperaturas não apresenta rede de abrikosov e sim um estado líquido com inclusões Meissner contornadas pela matéria de vórtices. À medida em que a temperatura diminui a configuração se torna um labirinto em  $T/T_c = 0.85$  e à medida que a temperatura diminui até  $T/T_c = 0.7$  se forma uma longa cadeia líquida de vórtices.



Fonte: O autor (2023)

muito pequenos de  $\alpha$ , não existem vórtices e o fluxo assume um estado intermediário onde lamelas de fluxo coexistem com o estado de Meissner, como esperado para materiais do tipo I.

Os painéis apresentados mostram diversas configurações representativas para todas as temperaturas analisadas. Quando  $\alpha = 0.8$  e altas temperaturas, temos uma rede de Abrikosov levemente distorcida, à medida em que diminuímos a temperatura a rede permanece e reflete o comportamento esperado de supercondutores do tipo II. Em  $\alpha = 0.7$  e altas temperaturas, os vórtices formam uma rede padrão de Abrikosov (levemente distorcida). Entretanto, à medida que a temperatura diminui, a rede começa a se fragmentar em domínios de estado Meissner, sem que haja o desaparecimento completo dos vórtices. À medida que a temperatura é reduzida ainda mais, os vórtices começam a formar aglomerados (clusters). Na configuração de  $\alpha = 0.6$ , a matéria dos vórtices muda. Ela continua formando uma rede de Abrikosov em altas temperaturas e se agrupa em clusters em temperaturas mais baixas. No entanto, a configuração dos vórtices dentro dos clusters se altera conforme eles se movem mais próximos uns dos outros. Este comportamento é mais evidente em  $\alpha = 0.5$ , onde os vórtices não formam mais uma rede triangular dentro dos clusters, mas a matéria dos vórtices passa a apresentar um



comportamento líquido, de modo que as inclusões do estado de Meissner se assemelham a gotículas separadas por contornos compostos da matéria dos vórtices, que se alongam em cadeias estendidas.

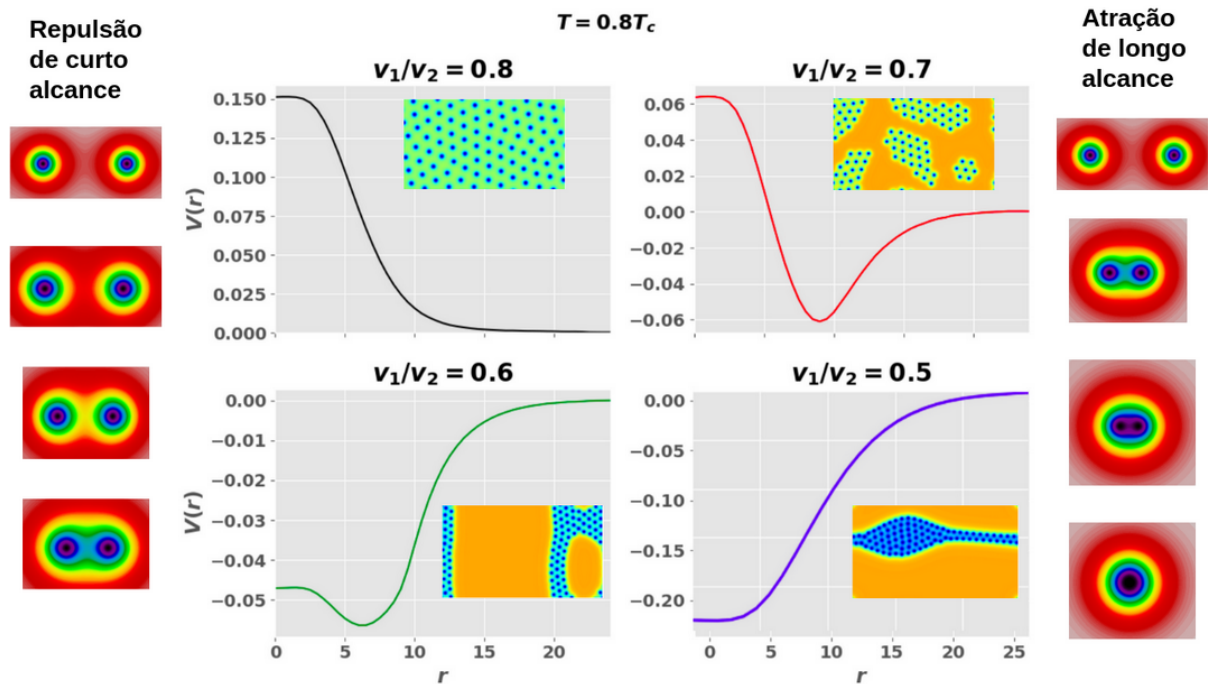
### 4.3.2 Potencial de Interação

Estudos prévios evidenciaram que em proximidade de  $T_c$ , o modelo de dois componentes pode apresentar três tipos de comportamento da dependência do campo de magnetização  $M(H)$ : semelhante aos supercondutores de tipo I, tipo II e IT. Em materiais do tipo I, a magnetização aumenta linearmente com o campo aplicado (estado de Meissner) e, em seguida, cai abruptamente para zero no campo crítico  $H_c$ . Em supercondutores do tipo II, a magnetização também aumenta linearmente com valores menores de  $H$ . Entretanto, quando o campo atinge o primeiro campo crítico  $H_{c1}$ , a magnetização começa a diminuir, marcando a aparência do estado misto com penetração de fluxo magnético no volume da amostra na forma de vórtices. Quando o campo alcança o segundo campo crítico  $H_{c2}$ , a supercondutividade desaparece. Por outro lado, os supercondutores no regime IT também apresentam um salto acentuado em  $H_{c1}$ , porém, para um valor finito de  $M$ . Quando  $H > H_{c1}$ , a magnetização demonstra uma diminuição gradual antes de desaparecer completamente no campo crítico superior  $H_{c2}$ . O modelo de duas componentes reproduz todos esses padrões de magnetização como pode ser visto por exemplo no trabalho de Rogerio, etc al.

Nos supercondutores de uma banda no estado IT, a magnetização exibe um salto em  $H_{c1}$  devido a mudanças na interação entre os vórtices. Essas interações se tornam atrativas a longas distâncias, causando instabilidade na rede de Abrikosov, levando à formação de clusters. Esse fenômeno é bem conhecido e documentado na literatura. É interessante notar que o modelo de duas componentes também exibe um comportamento semelhante nas interações vórtice-vórtice, conforme mostrado no potencial de interação apresentado na Fig. 25. Para a realização dos cálculos, utilizamos a temperatura  $T = 0,8T_c$  e vários valores representativos de  $\alpha = v_1/v_2$  para dois vórtices aprisionados em defeitos circulares. Inicialmente os vórtices encontram-se a uma distância suficientemente grande para um não sentir a interação do outro. Em seguida vamos diminuindo a distância, ou seja, vamos movendo o defeito e conseqüentemente movemos o vórtice através do defeito e calculamos o potencial de interação em cada distância.

Observa-se que em  $\alpha = 0,8$ , o potencial de interação entre vórtices diminui de forma monótona com o aumento da distância inter-vórtice  $r$ , indicando repulsão entre os vórtices,

Figura 25 – Potencial de Interação Vórtice-Vórtice mostrando a mudança da interação puramente repulsiva em  $\alpha = 0.8$ , a interação não monotônica em  $\alpha = 0.7$  até a interação puramente atrativa em  $\alpha = 0.5$ .



Fonte: O autor (2023)

como esperado para supercondutores do tipo II. No entanto, em  $\alpha = 0,7$ , o potencial de interação torna-se não monótono, os vórtices permanecem repulsivos em curtas distâncias, mas atraentes em longas distâncias, levando à formação de clusters. Agora, o potencial apresenta um mínimo em um valor finito de  $r_0$ , favorecendo a formação de clusters. À medida que  $\alpha$  diminui, o valor de  $r_0$  também diminui, e em  $\alpha = 0,5$ , a interação é puramente atrativa, levando à junção de dois vórtices em um único vórtice com dois elementos de fluxo. Os valores de  $\alpha_u$ , em que a interação se torna atrativa em longas distâncias, determinam o início da instabilidade da rede de vórtices e marcam o limite do regime IT que separa a supercondutividade do tipo II. O outro limite, que separa a supercondutividade do regime IT do tipo I, é determinado pelo valor de  $\alpha_l$ , em que a magnetização desaparece completamente em  $H_c$ . Isso é equivalente à condição  $H_c = H_{c2}$ , em que o estado misto se torna impossível em um volume supercondutor. Tanto  $\alpha_u$  quanto  $\alpha_l$  dependem de  $T$ , produzindo linhas no espaço de parâmetros  $(\alpha, T)$ . Isso define o diagrama de fase do sistema de duas componentes, que resume os resultados relatados anteriormente. A linha pontilhada no meio representa a condição de energia nula na parede de domínio entre o estado supercondutor e normal, comumente utilizada para separar o regime do tipo I e tipo II na teoria de GL. Os resultados são ilustrados na Fig.

26, onde são apresentados os diagramas de fase em função da temperatura e do parâmetro de acoplamento  $\alpha$ .

Observa-se que os contornos do limite superior de  $\alpha_u$  e o limite inferior de  $\alpha_l$ , bem como a linha tracejada do meio, convergem em um único ponto em  $T = T_c$  (indicado pelo ponto vermelho na Fig. 26). Conforme a temperatura aumenta, o intervalo IT  $\alpha_l < \alpha < \alpha_u$  diminui, tornando-se um único ponto no limite  $T \rightarrow T_c$ . O diagrama de fase na Fig. 26 (a) é qualitativamente semelhante ao de um supercondutor BCS de uma banda, como mostrado na Fig. 26 (b), onde em ambos os sistemas, o domínio IT separa os regimes do tipo I e do tipo II, e o intervalo IT se reduz a um único ponto em  $T \rightarrow T_c$ . No entanto, a diferença é que a razão  $\alpha$  das velocidades de Fermi no sistema de duas bandas desempenha o papel do parâmetro de GL  $\kappa = \lambda/\xi$  ( $\lambda$  é o comprimento de penetração magnética e  $\xi$  é o comprimento de coerência de GL) em supercondutores de uma banda. É importante ressaltar que a semelhança entre os sistemas de uma e duas bandas é observada não apenas nos contornos do domínio IT e na linha do meio, mas também em outras características, como o papel dominante das interações multi-vórtice na parte inferior do intervalo IT (abaixo da linha tracejada).

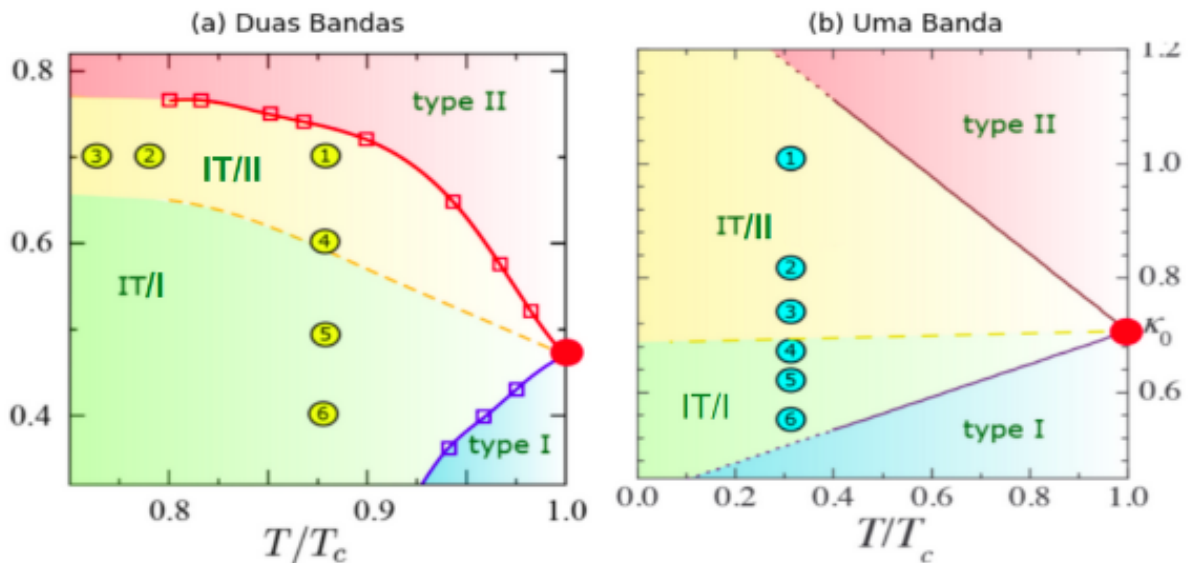
### 4.3.3 Comparação com o Modelo de Uma Banda

Vamos agora apresentar as configurações de vórtices do estado misto no modelo de duas bandas e comparar os resultados com as configurações de supercondutores de uma banda. Para realizar os cálculos, investigamos o domínio IT, selecionando valores de  $\alpha = 0.7, 0.6, 0.5$  em diferentes temperaturas. As configurações de vórtices típicas são apresentadas na sequência de painéis numerados de 1 a 6, marcados como "2-banda" na Fig. 27. Cada painel corresponde a um ponto específico no diagrama de fase da Fig. 26.

Esses pontos foram escolhidos para ilustrar como as configurações de vórtices variam ao transitar entre os regimes do tipo II e do tipo I. É importante ressaltar que, durante os cálculos, assumimos que a densidade total de fluxo (número de vórtices por unidade quadrada) foi mantida constante.

No ponto 1, que se encontra próximo ao domínio do tipo II, os vórtices adotam uma configuração em rede de Abrikosov. Essa configuração é esperada no regime IT quando o fluxo total é grande o suficiente para que a distância entre os vórtices seja menor que a posição do potencial mínimo de interação,  $r_0$ . No entanto, em baixas temperaturas no ponto 2, o valor de  $r_0$  diminui, tornando-se menor que a distância intra-vórtice na rede, o que leva

Figura 26 – Diagrama de fases que separa as regiões de supercondutores convencionais do tipo II ou tipo I em regiões IT/I e IT/II. A linha tracejada indica a mudança de um estado sólido para um estado líquido. A numeração de 1-6 indica as configurações de vórtices observadas na Fig. 27.



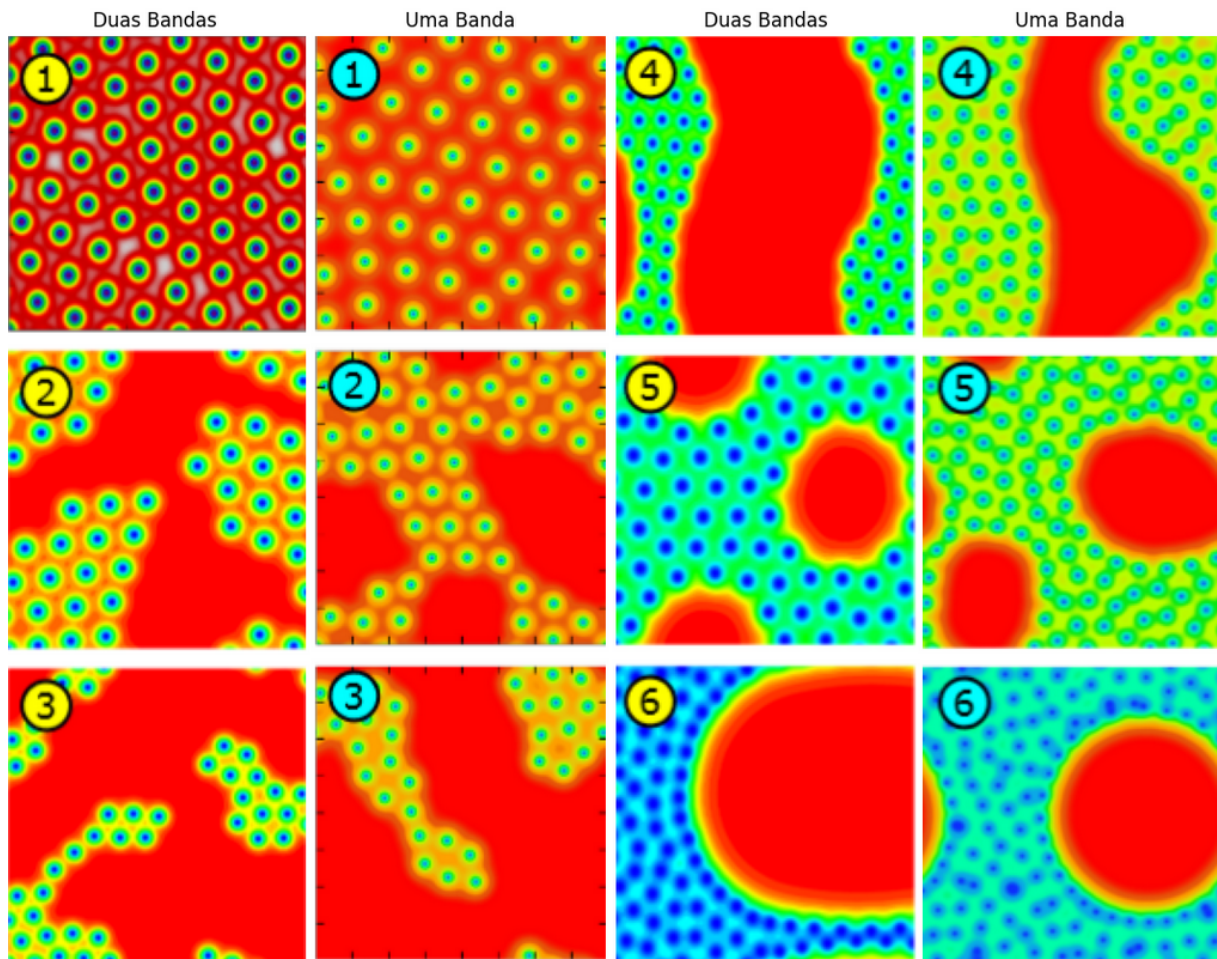
Fonte: O autor (2023)

à quebra da rede em clusters, conforme ilustrado nos painéis correspondentes na Fig. 27.

Podemos observar que dentro dos clusters de vórtices a estrutura de rede permanece, sendo a célula de rede igual a  $r_0$ . No ponto 3, situado próximo à linha tracejada, o tamanho de um cluster típico diminui e os clusters se alongam, às vezes formando cadeias de vórtices. Gradualmente, a estrutura de rede derrete, tornando-se irregular. Mais profundamente no regime IT, abaixo da linha tracejada do meio, a matéria de vórtices dentro dos clusters torna-se mais suave, e a forma do cluster (ou do estado Meissner) assemelha-se às gotículas de água. Esse comportamento é observado nos pontos 4, 5 e 6 na Fig. 27. Por fim, quando a borda inferior de IT é ultrapassada, os vórtices se dissolvem e o sistema retorna ao estado normal."

É importante destacar que as configurações de vórtice em supercondutores de uma única banda são bastante similares àsquelas encontradas no modelo de duas bandas. Ambos os sistemas seguem a mesma sequência de transformações quando se cruza o domínio IT. Essas configurações são ilustradas nos painéis rotulados como "1 banda" na Fig. 27, que foram calculados nos pontos 1-6 do diagrama de fases correspondente, mostrado na Fig. 26. Vale ressaltar que, nesse caso, o diagrama é formado por linhas retas, uma vez que é calculado utilizando a teoria da perturbação. A configuração dos vórtices depende apenas da razão  $\kappa/\tau$  (onde  $\tau = 1 - T/T_c$ ) e a maneira mais fácil de procurar pelo domínio IT é simplesmente variar  $\kappa$  entre  $\kappa_u$  e  $\kappa_l$ .

Figura 27 – Comparação entre as Configurações de Vórtices no Estado Intertipo para o caso de Uma e Duas Bandas. A numeração de 1 – 6 indica em qual fase a configuração aparece no diagrama de fases da Fig. 26.



Fonte: O autor (2023)

Note que, em ambos os sistemas de uma e duas bandas, a linha do meio no diagrama de fase marca um ponto de cruzamento da rede sólida com o estado líquido da matéria de vórtices dentro dos clusters. Isso é relacionado a um fato interessante. Além disso, observe que, em ambos os sistemas, próximo a essa linha, a interação vórtice-vórtice se torna puramente atrativa. No entanto, grandes clusters de vórtices ainda existem. Eles são estabilizados por interações multi-vórtices que permanecem repulsivas quando os vórtices estão próximos. Essa é a interação entre muitos corpos que são responsáveis pela formação do estado líquido de vórtices.

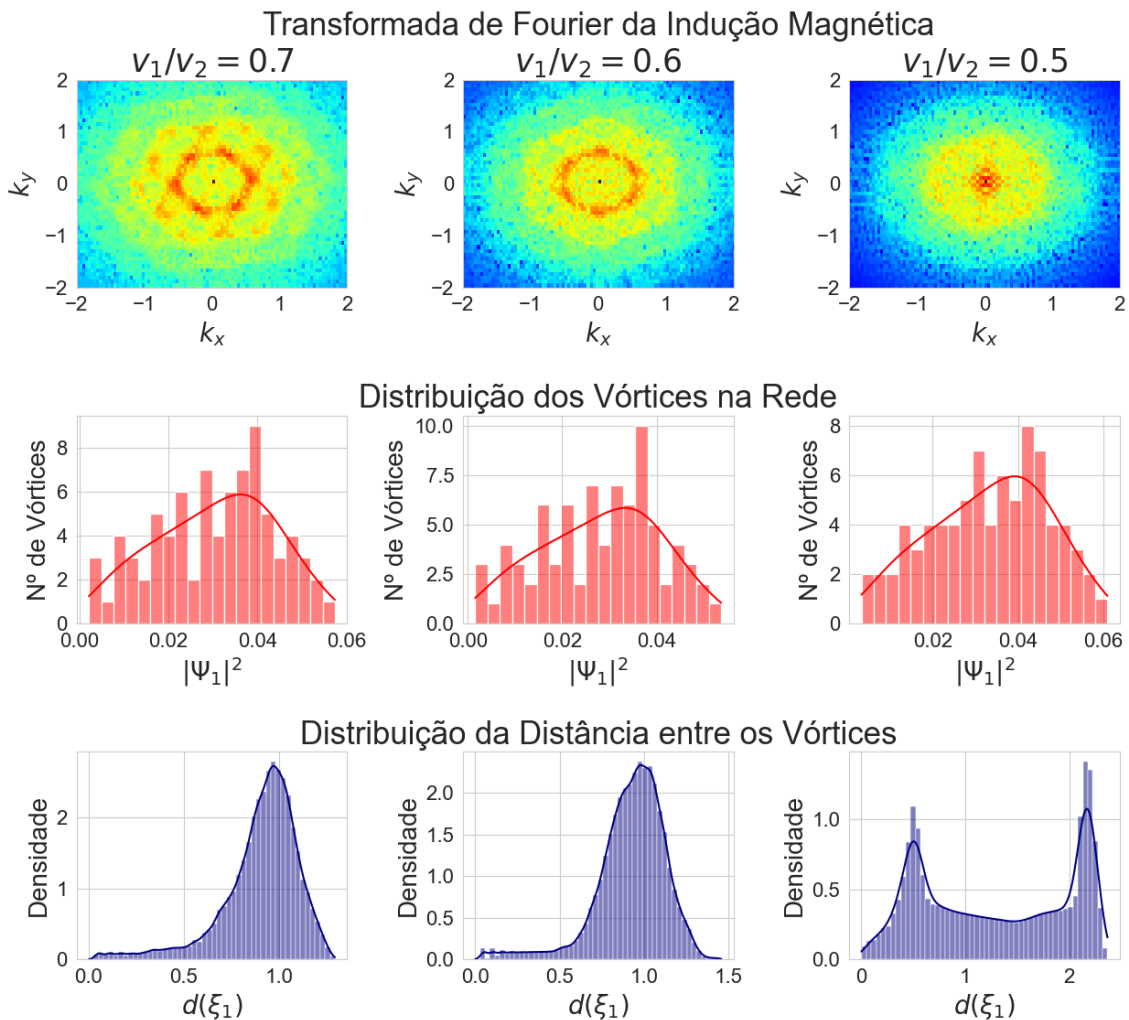
#### 4.3.4 Análise Espectral da Indução Magnética

Estudar o comportamento dos vórtices é crucial para entender como a supercondutividade funciona em condições extremas de campo magnético e temperatura. Além disso, compreender como os vórtices se organizam em diferentes arranjos exóticos pode ajudar a desenvolver novos materiais supercondutores com propriedades ainda mais interessantes. Nesse sentido, os resultados apresentados nesta seção são extremamente relevantes, uma vez que descrevem em detalhes como os vórtices se organizam. Através de análises de espectro de Fourier e distribuições de distância, somos capazes de alinhar a existência do estado intertipo com resultados que são obtidos experimentalmente. Ao analisar a Fig. 28, é possível observar que para  $v_1/v_2 = 0.7$  e  $T/T_c = 0.9$  o espectro de Fourier mostra o comportamento típico da rede de vórtices de Abrikosov, que apresenta uma leve distorção. Nessa configuração, os vórtices são distribuídos homogêaneamente seguindo uma distribuição normal, e eles tendem a se aproximar uns dos outros para manter o equilíbrio da rede devido à força repulsiva existente entre eles. Esse mesmo comportamento é observado para  $v_1/v_2 = 0.6$ .

No entanto, ao se analisar o espectro de Fourier para  $v_1/v_2 = 0.5$ , nota-se uma transição para um estado líquido de vórtices. Nesse caso, a distribuição de distância entre os vórtices apresenta dois picos, indicando uma competição entre as forças de atração e repulsão entre os vórtices. Esse comportamento sugere uma mudança na estrutura da rede de vórtices, que é refletido na coexistência de regiões Meissner com o líquido de vórtices. Mesmo com o surgimento dessa estrutura não convencional, observamos que ainda assim os vórtices tendem a se organizar numa rede de Abrikosov como é refletido no histograma da distribuição dos vórtices. Por mais exótica que seja a configuração, esse comportamento é visivelmente apreciado no diagrama de configurações de vórtices das Figs. 22 - 24.

Ao passo em que resfriamos o sistema, em  $T/T_c = 0.8$  como vimos também ocorre transições interessantes. Para  $v_1/v_2 = 0.7$  a rede se "quebra" e forma clusters de vórtices, que no entanto, não perdem o equilíbrio como pode ser observado nas distribuições da Fig. 29, isso sugere que essas configurações são estáveis e tem grande potencial para aplicar centros de pinning para prendê-las e transportar corrente. No caso de  $v_1/v_2 = 0.6$  a situação já muda completamente, ocorrem diversas transições entre as estruturas, que vão desde a labirintos de vórtices até chegar numa configuração onde existe uma espécie de "buraco do tipo Meissner" no meio do arranjo. O espectro de Fourier exhibe satisfatoriamente esse comportamento, ao passo em que os vórtices tentam se arranjar numa rede de Abrikosov eles também tendem a se

Figura 28 – Análise Espectral da Indução Magnética para  $T/T_c = 0.9$ . Para  $\alpha = 0.7$  o espectro de Fourier exibe o comportamento da rede hexagonal, para  $\alpha = 0.6, 0.5$  acontece uma espécie de derretimento da rede e um colapso para um único pico centrado, respectivamente. A vorticidade se mantém uniforme enquanto que a distribuição da distância entre os vórtices se altera de monomodal para bimodal.



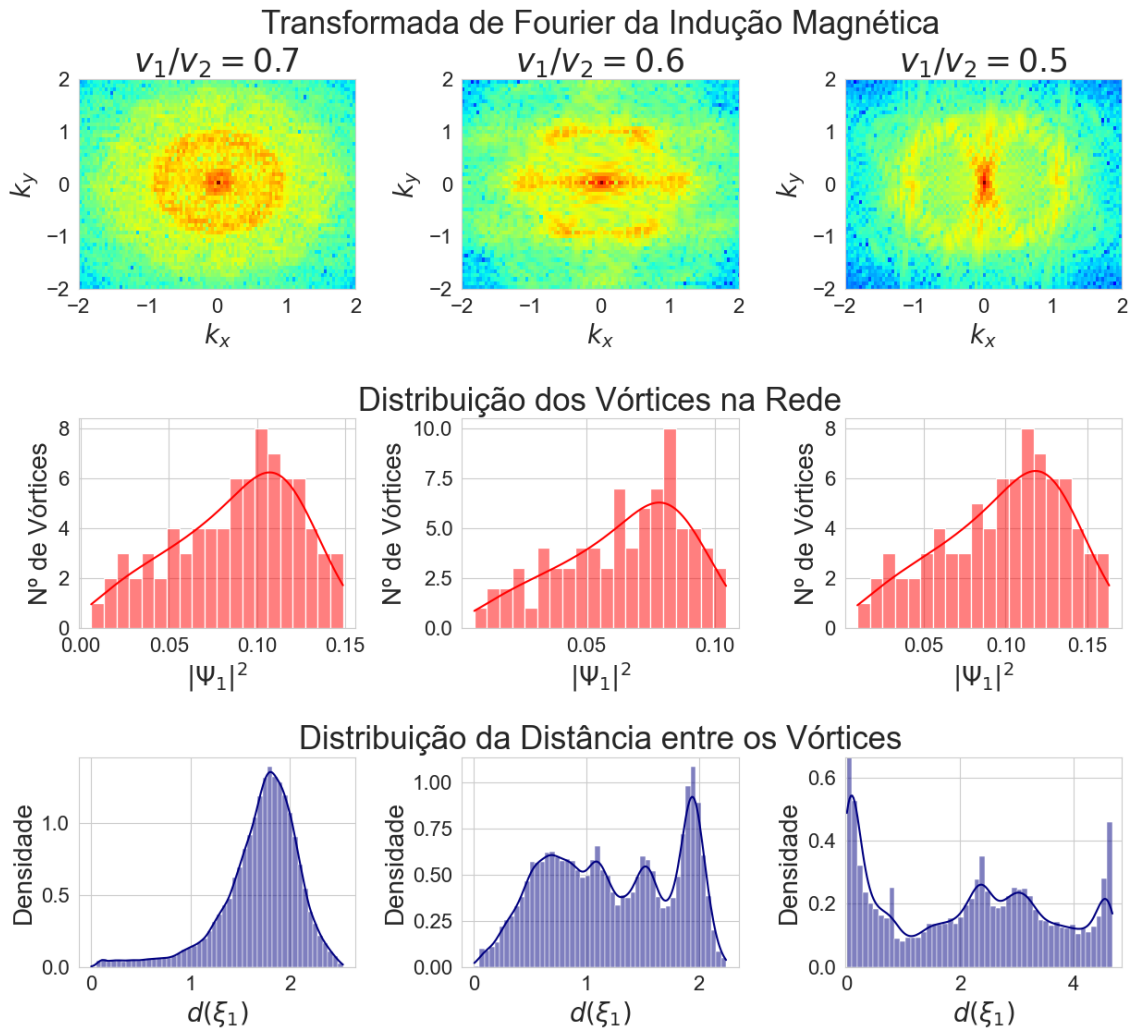
Fonte: O autor (2023)

alongar para formar stripes. A distribuição de distância mostra diversos picos que refletem essa competição.

À medida que resfriamos o sistema para  $v_1/v_2 = 0.5$ , observamos que as regiões Meissner ao redor dos vórtices aumentam significativamente. Além disso, a distribuição de distância exibe máximos e mínimos que indicam repulsão a curta distância e atração a longa distância, em conformidade com o esperado. A tendência dos vórtices é se alinhar puramente para a formação de "stripes", que nesse caso tendem a ser a configuração de equilíbrio.

Neste capítulo, foram apresentadas diversas ferramentas e técnicas para a caracterização e compreensão de materiais supercondutores de duas bandas através de simulações das equações

Figura 29 – Análise Espectral da Indução Magnética para  $T/T_c = 0.8$ . Para  $\alpha = 0.7$ , devido a fragmentação da rede em clusters, os picos no espectro se sobrepoem, a vorticidade se mantém uniforme e a distribuição de distância monomodal. em seguida para  $\alpha = 0.6, 0.5$  por apresentarem um estado mais líquido e ser energeticamente favorável a formação de longas cadeias de vórtices, o espectro de Fourier se concentra em uma região mais alongada e mesmo com a vorticidade sendo uniforme, a distribuição da distância entre os vórtices apresenta o caráter multimodal com vários picos.



Fonte: O autor (2023)

de Ginzburg-Landau. Através da análise de diagramas de fases e do potencial de interação entre os vórtices, foi possível entender as propriedades desses materiais em diferentes condições e temperaturas no regime intertipo. Além disso, a comparação com o modelo de uma banda permitiu evidenciar as semelhanças entre configurações de vórtices e a separação de fase para a região intertipo.

A análise espectral e os histogramas de distribuição destacaram as propriedades exóticas das configurações obtidas devido à natureza intertipo do modelo de duas bandas. Essas análises e técnicas são cruciais para compreender e desenvolver novos materiais supercondutores de alta



performance capazes de manipular diversas estruturas de vórtices. Com o progresso contínuo das pesquisas nessa área, espera-se que ocorram novas descobertas e avanços no estudo desses fascinantes materiais, os supercondutores.

## 5 PERSPECTIVAS E TRABALHOS FUTUROS

O estudo das configurações de vórtices em sistemas supercondutores de duas bandas tem mostrado um grande potencial para o desenvolvimento de novos materiais e aplicações tecnológicas. No entanto, há ainda muitos desafios a serem superados para que esses avanços possam ser alcançados e por isso trazemos nesse capítulo alguns tópicos sobre pesquisas que poderão ser realizadas para dar continuidade a esse trabalho.

- I. **Transporte de Corrente:** Para analisar o transporte de corrente em supercondutores de duas bandas é preciso acoplar a equação de Poisson. Esse estudo pode ser feito para supercondutores com condições de contorno de Neumann ou para uma fita supercondutora. A análise da condutividade elétrica em função da temperatura e da razão das velocidades de Fermi pode ajudar a identificar as propriedades de transporte que surgem quando se atravessa o domínio IT. Além disso, é importante investigar como a presença das múltiplas bandas afeta a dissipação de energia no material e como a presença de impurezas ou defeitos no material pode afetar a distribuição dos vórtices e as transições para o domínio IT.
- II. **Gradiente de Temperatura:** Outro tópico importante a ser explorado é o gradiente de temperatura em sistemas supercondutores de duas ou mais bandas. Para isso, é necessário acoplar a equação de difusão de calor com o sistema de equações de GL, permitindo estudar como a distribuição de temperatura está intimamente ligada com a transição para o domínio IT e como é afetado o transporte de energia térmica devido a presença de configurações exóticas de vórtices.
- III. **Geometrias Não Convencionais** Outro tópico de interesse a ser abordado é a investigação das transições de fase em supercondutores de duas bandas com diferentes geometrias. Isso pode levar ao desenvolvimento de novos materiais supercondutores com propriedades únicas, bem como à compreensão das mudanças nas configurações de vórtices em diferentes condições. Além disso, é importante estudar o acoplamento entre a rede de vórtices e outras estruturas em materiais supercondutores, como interfaces com materiais ferromagnéticos ou estruturas híbridas de supercondutores e grafeno.

Em resumo, a pesquisa das propriedades de materiais supercondutores de uma ou múltiplas bandas no domínio intertipo é uma área em contínuo desenvolvimento. O uso da teoria de

Ginzburg-Landau é uma ferramenta essencial para a compreensão da supercondutividade e suas propriedades, o que pode gerar avanços nesse campo e conduzir a descobertas significativas com impactos na ciência e tecnologia.

## 6 CONCLUSÃO

Neste estudo, foram analisadas as configurações de vórtices em sistemas supercondutores de duas bandas e comparados com o sistema de uma banda. Foram realizados cálculos para diferentes razões da velocidade de Fermi entre as bandas e temperaturas, buscando identificar a transição para o domínio IT. Observou-se que há uma sequência de transformações das configurações de vórtices em ambos os sistemas quando se atravessa o domínio IT. Também foi notado que, próximo à linha do meio no diagrama de fase, a interação vórtice-vórtice se torna puramente atrativa em ambos os sistemas, mas grandes clusters de vórtices ainda existem devido às interações multi-vórtices que permanecem repulsivas quando os vórtices estão próximos.

Adicionalmente, foi observado que em sistemas de duas bandas, a rede de vórtices se quebra em clusters à medida que a temperatura diminui. A estrutura de rede permanece dentro dos clusters, mas gradualmente derrete, tornando-se mais irregular. No caso de sistemas de uma banda, as configurações de vórtices são muito semelhantes e seguem a mesma sequência de transformações quando cruzamos o domínio IT.

Os cálculos numéricos do modelo GL com dois componentes de condensado interagindo via acoplamento tipo Josephson mostraram que, próximo à temperatura crítica, a resposta magnética do sistema é classificada como tipo-I, tipo-II e IT entre as duas anteriores. O diagrama de fase do sistema desenhado no plano  $v_1/v_2 - T$  apresenta semelhança qualitativa com o dos supercondutores de banda única no plano  $\kappa - T$ . Essa classificação padrão aparentemente também é válida quando a temperatura é reduzida abaixo da crítica escondida, embora seja necessário um estudo mais detalhado. Além disso, os cálculos numéricos para os limites do domínio IT concordam bem com os resultados da expansão de perturbação do modelo de dois condensados. Isso indica que o modelo de duas bandas pode ser utilizado para obter, ao menos, uma descrição qualitativamente correta do domínio IT dos supercondutores de banda única. Essa vantagem se dá porque a resolução das equações GL multicomponentes para configurações com muitos vórtices é consideravelmente mais simples do que a análise da teoria microscópica completa do sistema de banda única.

A análise das configurações de vórtices em sistemas supercondutores permite entender como as propriedades dos materiais se alteram conforme se atravessa o domínio IT, o que pode levar ao desenvolvimento de novos materiais e aplicações tecnológicas.

## REFERÊNCIAS

- ABRIKOSOV, A. A. Magnetic properties of superconductors of the second group. *Soviet Physics - JETP*, v. 5, n. 6, 1957.
- ABRIKOSOV, A. A. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Phys. JETP*, v. 5, p. 1174, 1957.
- AUER, J.; ULLMAIER, H. Magnetic behavior of type-II superconductors with small Ginzburg-Landau parameters. *Phys. Rev. B*, 1973.
- BABAEV, E. Vortices with fractional flux in two-gap superconductors and in extended Faddeev model. *Physical Review Letters*, v. 89, p. 067001, 2003.
- BACKS M. SCHULZ, V. P. M. K. P. B. A.; MÜHLBAUER, S. Universal behavior of the intermediate mixed state domain formation in superconducting niobium. *Phys. Rev. B* **100**, 064503, 2019.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical Review*, n. 108, p. 1175–1204, 1957.
- BRANDT, E. H. *Phys. rev. b*. v. 34, p. 6514, 1986.
- BRANDT, E. H. Irreversible magnetization of pin-free type-II superconductors. *Physical Review B*, v. 60, n. 17, p. 11939, 1999.
- BRANDT, E. H.; ESSMANN, U. The flux-line lattice in type-II superconductors. *Phys. Stat. Solidi B*, v. 144, n. 1, p. 13–38, 1987.
- BUSCAGLIA, G. C.; BOLECH, C.; LÓPEZ, A. On the numerical solution of the time-dependent Ginzburg-Landau equations in multiply connected domains. In: BERGER, J.; RUBINSTEIN, J. (Ed.). *Connectivity and Superconductivity*. [S.l.]: Springer, 2000, (Lecture Notes in Physics, v. 62).
- CHAVES, A.; PEETERS, F. M.; FARIAS, G. A.; MILOŠEVIĆ, M. V. *Phys. rev. b*. v. 83, p. 054516, 2011.
- CHENG, J.; GROSSMAN, M.; MCKERCHER, T. *Professional CUDA C Programming*. 1st ed. [S.l.]: Wrox Press Ltd., 2014.
- CHIBOTARU, L. F.; DAO, V. H.; CEULEMANS, A. Thermodynamically stable noncomposite vortices in mesoscopic two-gap superconductors. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 78, n. 4, p. 47001, 2007.
- CUBITT, R.; FORGAN, E. M.; YANG, G.; LEE, S. L.; PAUL, D. M.; MOOK, H. A.; YETHIRAJ, M.; KES, P. H.; LI, T. W.; MENOVSKY, A. A. Direct observation of magnetic flux lattice melting and decomposition in the high- $T_c$  superconductor  $\text{Bi}_2\text{Sr}_1.95\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ . *Nature*, v. 365, n. 6445, p. 407, 1993.
- CÓRDOBA-CAMACHO, W. Y.; SILVA, R. M. da; VAGOV, A.; SHANENKO, A. A.; AGUIAR, J. A. Between types I and II: Intertype flux exotic states in thin superconductors. *Phys. Rev. B*, v. 94, p. 054511, 2016.

- GINZBURG, V. L.; LANDAU, L. D. Toward the superconductivity theory. *Zhurnal Eksp. Teor. Fiz.*, v. 20, p. 1064–1082, 1950.
- GINZBURG, V. L.; LANDAU, L. D. Toward the superconductivity theory. *Zhurnal Eksp. Teor. Fiz.*, v. 20, p. 1064–1082, 1950.
- GOR'KOV, L. P.; ELIASHBERG, G. M. Generalization of the ginzburg-landau equations for non-stationary problems in the case of alloys with paramagnetic impurities. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 27, p. 328, 1968.
- HOFFMAN, J. D.; FRANKEL, S. *Numerical methods for engineers and scientists*. [S.l.]: CRC press, 2001.
- HÜBNER, R. P. *Magnetic Flux Structures in Superconductors*. [S.l.]: Springer, 2001.
- KLEIN, U. Microscopic calculations on the vortex state of type-II superconductors. *Journal of Low Temperature Physics*, v. 69, n. 1-2, p. 1–37, 1987.
- KOGAN, V. G.; SCHMALIAN, J. Ginzburg-landau theory of two-band superconductors: Absence of type-1.5 superconductivity. *Phys. Rev. B*, v. 83, p. 054515, 2011.
- KRAGELOH, U. Flux line lattices in the intermediate state of superconductors with ginzburg landau parameter near  $1/\sqrt{2}$ . *Phys. Lett. A*, 1969.
- KRAMER, L. *Phys. rev. b*. v. 3, p. 3821, 1971.
- LEGGETT, A. J. Number-phase fluctuations in two-band superconductors. *Progress of Theoretical Physics*, v. 36, n. 5, p. 901, 1966.
- LONDON, F.; LONDON, H. *Proc. roy. soc.* A149, p. 71, 1935.
- MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Die Naturwissenschaften*, v. 21, p. 787–788, 1933.
- MURANAKA, T.; ZENITANI, Y.; AKIMITSU, J.; NAGAMATSU, J.; NAKAGAWA, N. Superconductivity at 39 k in magnesium diboride. *Nature*, v. 410, p. 63, 2001.
- MÜHLBAUER, S.; PFLEIDERER, C.; BÖNI, P.; LAVER, M.; FORGAN, E. M.; FORT, D.; KEIDERLING, U.; BEHR, G. Morphology of the superconducting vortex lattice in ultrapure niobium. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 13, p. 136408, 2009.
- ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. *Communications from the Physical Laboratory at the University of Leiden*, v. 122b, 1911.
- PEREIRA1, M. G. F. S. 100 anos de supercondutividade e a teoria de ginzburg-landau. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 35, n. 1, 1313, 2013.
- PIPPARD, A. B. *Proc. roy. soc. (london)*. A216, p. 547, 1953.
- POLO, A. S. M.; SILVA, R. M. da; VAGOV, A.; SHANENKO, A. A.; TORO, C. E. D.; AGUIAR, J. A. Nonequilibrium interband phase textures induced by vortex splitting in two-band superconductors. *Physical Review B*, v. 96, p. 054517, 2017.
- PUREUR, P. *Supercondutividade, IX Escola do CBPF*. Tese (Doutorado) — PhD Thesis, Rio de Janeiro, 2012.

- 
- SHANENKO, A. A.; MILOŠEVIĆ, M. V.; PEETERS, F. M.; VAGOV, A. V. Extended ginzburg-landau formalism for two-band superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 047005, 2011.
- SILVA, R. M. da; MILOŠEVIĆ, M. V.; DOMÍNGUEZ, D.; PEETERS, F. M.; AGUIAR, J. A. Distinct magnetic signatures of fractional vortex configurations in multiband superconductors. *Applied Physics Letters*, v. 105, n. 23, p. 232601, 2014.
- SILVA, R. M. da; MILOŠEVIĆ, M. V.; SHANENKO, A. A.; PEETERS, F. M.; AGUIAR, J. A. Giant paramagnetic meissner effect in multiband superconductors. *Scientific Reports*, v. 5, p. 12695, 2015.
- STOSIC, D. *High Performance Ginzburg-Landau Simulations of Superconductivity*. Tese (Doutorado) — Cin-UFPE, 2018.
- SUHL, H.; MATTHIAS, B. T.; WALKER, L. R. Bardeen-cooper-schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands. *Phys. Rev. Lett.*, v. 3, p. 65, 1959.
- TINKHAM, M. *Introduction to Superconductivity*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1996.
- TOFT-PETERSEN, R.; ABRAHAMSEN, A. B.; BALOG, S.; PORCAR, L.; LAVER, M. Decomposing the bragg glass and the peak effect in a type-ii superconductor. *Nature Communications*, v. 9, n. 1, p. 901, 2018.
- VAGOV, A.; SHANENKO, A. A.; MILOŠEVIĆ, M. V.; AXT, V. M.; VINOKUR, V. M.; AGUIAR, J. A.; PEETERS, F. M. Superconductivity between standard types: Multiband versus single-band materials. *Physical Review B*, v. 93, n. 17, p. 174503, 2016.
- WINIECKI, T.; ADAMS, C. A fast semi-implicit finite-difference method for the tdgl equations. *Journal of Computational Physics*, 2001.
- WOLF, S.; VAGOV, A.; SHANENKO, A. A.; AXT, V. M.; AGUIAR, J. A. Vortex matter stabilized by many-body interactions. *Physical Review B*, v. 96, n. 14, p. 144515, 2017.