

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

THIAGO BISPO MARTINS

**ESTUDO DA NUCLEAÇÃO SUPERCONDUTORA EM
ESTRUTURAS HÍBRIDAS
SUPERCONDUTOR/FERROMAGNÉTICO**

VITÓRIA
2015

THIAGO BISPO MARTINS

**ESTUDO DA NUCLEAÇÃO SUPERCONDUTORA EM
ESTRUTURAS HÍBRIDAS
SUPERCONDUTOR/FERROMAGNÉTICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física, na área de concentração Física da Matéria Condensada.

Orientador: Jorge Luis Gonzalez Alfonso

VITÓRIA

2015

Dedico este trabalho ao Pietro, Deus, Sônia, Emerson e a toda minha família.

Primeiro agradeço a Deus por me dar sabedoria, paciência, inteligência, força e virtudes para chegar ao fim deste trabalho.

Ao meu filho Pietro por ser motivo de tanta inspiração, dedicação e luta. Pela sua compreensão, apesar da pouca idade, em entender que muitas vezes deixei de brincar com ele e vê-lo para concluir este trabalho.

À CAPES por confiar em mim, no meu projeto e financiar o meu mestrado.

Aos meu pais, Emerson e Sônia, pela educação e apoio durante toda minha vida, em especial durante o tempo do mestrado.

Ao meu orientador Jorge Luis, pela orientação, discussões físicas, compreensão e por toda assistência prestada para a conclusão do trabalho.

Aos meus amigos: Cássio (mãozinha) pelas discussões física e por me escutar diversas vezes, Caio (cabelim), aos amigos de profissão, Alan, e todos os outros que me ajudaram de forma significativa.

À Joyce que escutou-me dando inúmeros conselhos durante todo o desenvolvimento deste trabalho.

"Se alguém lhe bloquear a porta, não gaste energia com o confronto, procure as janelas. Lembre-se da sabedoria da água: A água nunca discute com seus obstáculos, mas os contorna [...]"

Augusto Cury

RESUMO

A inter-relação entre supercondutividade e magnetismo sempre foi um tema controverso e ao mesmo tempo essencial para a compreensão do fenômeno da supercondutividade. A princípio o efeito Meissner pressupõe que ambos os fenômenos são excludentes. No entanto recentes avanços na tecnologia de deposição de filmes finos tem permitido construir sistemas híbridos em que supercondutores e sistemas magnéticos coexistem, além de que as propriedades físicas de ambos os sistemas são mutuamente modificadas. Esta dissertação tem como objetivo central o estudo do ponto de vista teórico de bicamadas formadas por filmes magnéticos e supercondutores. Em essência é estudado como a estrutura magnética do ferromagneto afeta a nucleação da ordem supercondutora no filme supercondutor. Usando a teoria de Ginzburg-Landau é estudada a dependência de T_c com o campo magnético, assim como a localização do parâmetro de ordem supercondutor em amostras com dimensões da ordem do comprimento de coerência do supercondutor. Foram estudadas bicamadas com a estrutura do filme magnético apresentando magnetização homogênea uniaxial, ou com estrutura de domínios magnéticos, inclusive considerando a possível influência da parede entre domínios magnéticos. Os resultados mostram que dependendo da geometria estudada, ou seja, das dimensões do sistema, a nucleação supercondutora pode surgir na borda do sistema ou no interior das paredes de domínios magnéticos. Os resultados reproduzem resultados da literatura e fornecem novas ideias sobre a nucleação da ordem supercondutora em sistemas mesoscópicos supercondutores.

Palavras chave: Supercondutividade, sistema híbrido, Ginzburg - Landau, domínio magnético, parede do domínio.

ABSTRACT

The relation between magnetism and superconductivity always has been a challenge for condensed matter physics, and at the same time, essential for the understanding of the superconductivity. In principle, the Meissner effect assumes that both phenomena are excluding. However, recent advances in thin films technology have allowed the development of hybrid systems where superconducting and magnetic systems coexist. Furthermore, the physical properties of both systems are mutually modifies. The principal objective of this work is to perform a study, from theoretical point of view, of bilayers created by magnetic and superconducting layers. In essence, it is studied how the magnetic structure of a ferromagnetic system affects the superconducting order parameter inside the superconductor. The dependence of the critical temperature T_c with the magnetic field is studied using the Ginzburg - Landau theory. Also is studied how the superconducting order parameter localizes in superconducting samples which have dimensions of the same order as, for example, the superconducting coherence length. Bilayers where the magnetic layer structure introduces a homogeneous uniaxial magnetization were studied. Also it was considered the possible influence of magnetic domains which are presented in the magnetic systems. The results show that depending of the geometry of the superconductor system the superconducting nucleation will arise at the edges of the films, or inside the domain wall between magnetics domains. The results reproduce experimental results found in the literature and provide new insights about the nucleation of the superconducting order parameter in mesoscopics systems.

Keywords: Superconductivity, hybrid system, Ginzburg - Landau, magnetic domain, domain wall.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 -	15
Figura 1.2 -	16
Figura 1.3 -	18
Figura 1.4 -	20
Figura 1.5 -	21
Figura 1.6 -	23
Figura 1.7 -	24
Figura 1.8 -	26
Figura 2.1 -	28
Figura 2.2 -	29
Figura 2.3 -	32
Figura 2.4 -	32
Figura 2.5 -	33
Figura 2.6 -	37
Figura 3.1 -	41
Figura 4.1 -	45
Figura 4.2 -	48
Figura 4.3 -	50
Figura 4.4 -	52

Figura 4.5 -	54
Figura 4.6 -	55
Figura 4.7 -	58
Figura 4.8 -	60
Figura 4.9 -	63
Figura 4.10 -	64
Figura 4.11 -	65
Figura 4.12 -	66
Figura 4.13 -	66
Figura 4.14 -	68
Figura 4.15 -	68
Figura 4.16 -	70
Figura 4.17 -	71
Figura 4.18 -	73
Figura 4.19 -	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 -	49
Tabela 4.2 -	53

SUMÁRIO

1. Introdução	14
1.1 Início da supercondutividade	15
1.2 Teoria de London	16
1.3 Supercondutores tipo II	19
1.4 Teoria BCS	21
1.5 Sistemas híbridos	22
2. Teoria de Ginzburg - Landau	27
2.1 Transições de fases	28
2.2 Modelo de Landau para transições de fases	29
2.3 Teoria de Ginzburg - Landau	30
2.4 Linearização da equação de Ginzburg - Landau.....	32
2.5 Exemplos de aplicações da equação de Ginzburg - Landau linearizada	33
2.5.1 Nucleação supercondutora em <i>bulk</i> simples	33
2.5.2 Nucleação supercondutora em superfícies	36
3. Soluções de equações diferenciais por métodos numéricos	39
3.1 Métodos numéricos	40
3.2 Diferencial finitas. Definições básicas	41
3.3 Método de diferenças finitas (MDF)	42
4. Resultados	44
4.1 Estudo de um filme supercondutor/ferromagnético com magnetização uniaxial na ausência de domínio	45
4.1.1 Condições de bordas periódicas	48
4.1.2 Condições de borda de Ginzburg - Landau	51
4.2 Estrutura magnética com magnetização <i>steplike</i>	54
4.2.1 Nucleação da supercondutividade para uma estrutura magnética <i>steplike</i>	56

4.2.2 Solução analítica	57
4.2.3 Efeitos de tamanho finito na solução do problema steplike	61
4.2.4 Magnetização steplike com largura da parede entre domínios	67
4.2.5 Resultados e efeitos de tamanho finito na solução do problema steplike com parede entre domínios	69
4.2.6 Comparação com resultados experimentais	72
5. Conclusão	75
6. Referências	78

Capítulo 1

Introdução

1.1. Início da supercondutividade

O fenômeno da supercondutividade foi descoberto acidentalmente, em 1911, por Heike Karmelinh Onnes quando fazia uma experiência resfriando mercúrio. Onnes observou que a resistividade do mercúrio diminuía repentinamente a zero no mesmo momento em que a amostra estava sendo resfriada a uma temperatura abaixo de 4,2 K. Este estado em que a resistividade torna-se nula Onnes chamou de supercondutividade [1-3]. Algum tempo depois ele percebeu que, mesmo se $T < T_c$ o estado supercondutor pode deixar de existir se um campo magnético forte o suficiente for aplicado na amostra supercondutora.

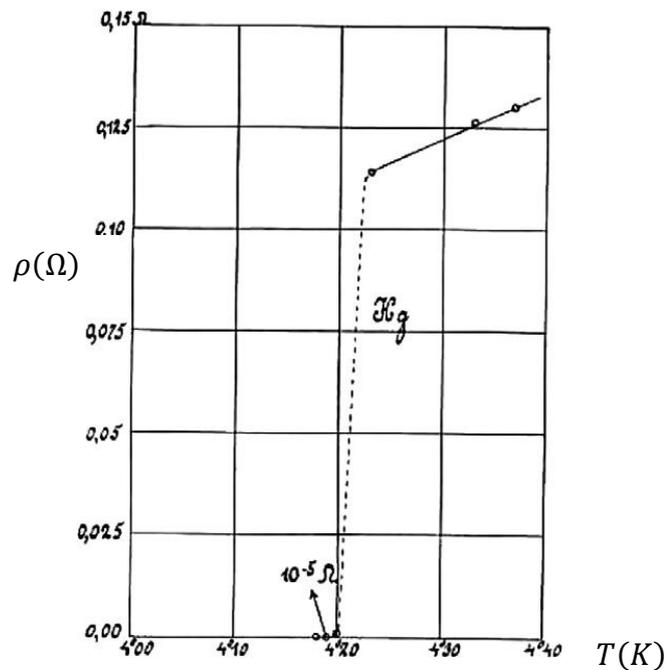


Figura 1.1: Gráfico resistividade x temperatura obtido por Onnes em 1911 [4]

Um modelo é dito supercondutora se apresentar duas características: resistividade nula ($\rho = 0$) em temperatura abaixo da temperatura crítica e indução magnética nula no interior do material supercondutor $\mathbf{B} = \mathbf{0}$. A segunda propriedade é de extrema importância para afirmar se a amostra é supercondutora, uma vez que podem existir amostras que apresentam resistividade nula ($\rho = 0$), porém ($\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$) no interior da amostra, logo não se classificam como sistemas supercondutores.

A segunda propriedade consiste na expulsão do fluxo magnético do interior da amostra quando $T < T_c$ foi encontrada em 1933. Esta propriedade foi chamada de diamagnetismo perfeito ($\mathbf{M} = -\mathbf{H}$) e o fenômeno descrito é conhecido como efeito Meissner [2].

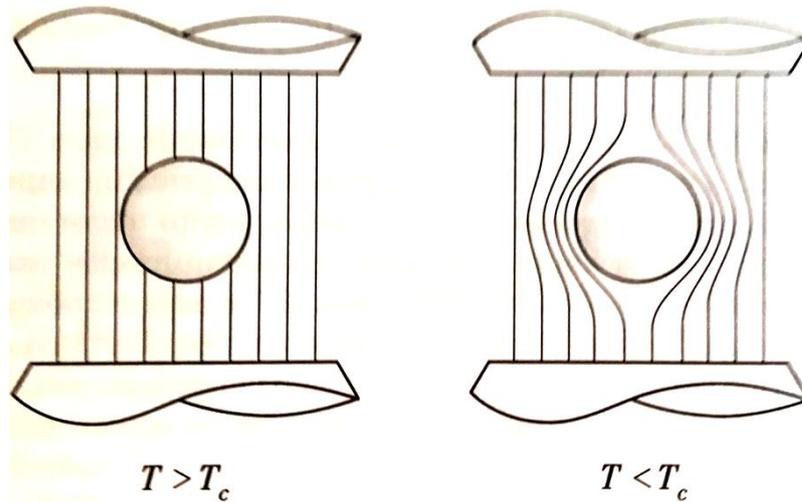


Figura 1.2: Efeito Meissner em uma amostra supercondutora. O campo magnético \mathbf{B} é expulso do interior da amostra quando $T < T_c$. [5]

1.2. Teoria de London

A primeira tentativa de descrever uma teoria sobre o fenômeno surgiu com a finalidade de explicar o efeito Meissner. Os irmãos Fritz e Heinz London [6] elaboraram uma teoria fundamentada nas leis do eletromagnetismo de Maxwell. Considerando a lei de Ohm escrita na forma,

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{J} \quad (1.1)$$

em que \mathbf{E} é o campo elétrico, ρ é a resistividade e \mathbf{J} é a densidade de corrente elétrica. Como a resistividade é nula ($\rho = 0$) no supercondutor, então, de acordo com a equação (1.1), o campo elétrico também será nulo $\mathbf{E} = \mathbf{0}$.

Das equações de Maxwell, obtém-se:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (1.3)$$

A equação (1.3) mostra que a densidade de fluxo dentro da amostra supercondutora é constante no tempo. O estado supercondutor também pode ser destruído se o campo magnético externo for maior que o campo magnético crítico B_c da amostra ou se uma densidade de corrente for grande o suficiente para gerar um campo magnético igual ou superior a B_c . Este valor é chamado de corrente crítica para estes supercondutores.

London propôs um modelo de dois fluidos sendo que uma parcela deste fluido é composta por uma densidade n_s elétrons supercondutores e a outra parte do fluido é formado por uma densidade n de elétrons "normais". Os n_s elétrons não sofrem espalhamento causados por impurezas ou pelos fônons, então não contribuem para a resistividade. Sendo v_s a velocidade dos elétrons supercondutores, a equação de movimento é escrita como:

$$m \frac{dv_s}{dt} = e\mathbf{E} \quad (1.4)$$

$$\mathbf{J} = n_s e v_s \quad (1.5)$$

Substituindo (1.5) em (1.4),

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{J}}{n_s e} \right) = e\mathbf{E}$$

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{n_s e^2 \mathbf{E}}{m}$$

$$\mathbf{E} = \frac{m}{n_s e^2} \frac{d\mathbf{J}}{dt} \quad (1.6)$$

Substituindo a equação (1.6) em (1.2):

$$\nabla \times \left(\frac{m}{n_s e^2} \frac{d\mathbf{J}}{dt} \right) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.7)$$

Substituindo a derivada em (1.7) tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \mathbf{J} + \frac{n_S e^2}{m} \mathbf{B} \right) = 0 \quad (1.8)$$

Usando a relação de Maxwell entre a densidade de fluxo e a densidade de corrente pode-se modificar a equação (1.8) conforme

$$\mu_0 \mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B} \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} + \frac{\mu_0 n_S e^2}{m} \mathbf{B} \right) = 0 \quad (1.10)$$

London analisou que uma solução ao problema corresponde à

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} + \frac{\mu_0 n_S e^2}{m} \mathbf{B} = 0 \quad (1.11)$$

Aplicando a propriedade vetorial $\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$ em (1.11), e que $(\nabla \cdot \mathbf{B}) = 0$:

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{\mu_0 n_S e^2}{m} \mathbf{B} \quad (1.12)$$

A equação (1.13) tem como caso particular um problema unidimensional com o objetivo de calcular \mathbf{B} no interior de um supercondutor. Considerando uma configuração onde o campo está ao longo do eixo z e a penetração se dá ao longo do eixo x :

$$\frac{d^2 B}{dx^2} = \frac{B}{\lambda^2} \quad (1.14)$$

$$\lambda^2 = \frac{m}{\mu_0 n_S e^2}$$

$$B_z(x) = c_1 e^{-x/\lambda} + c_2 e^{x/\lambda} \quad (1.15)$$

A equação (1.15) é justamente a solução geral da equação diferencial (1.14). Aplicando as condições de contorno, deve-se garantir que o campo seja nulo em $x \rightarrow \infty$ (efeito *Meissner*), logo $c_2 = 0$. Pela continuidade na superfície, $x = 0$ e, deste modo, $c_1 = B_0$. Com isso, (1.15) chega a sua forma final:

$$B_z(x) = B_0 e^{-x/\lambda} \quad (1.16)$$

A solução (1.16) aparece representada qualitativamente na Figura 1.3 que mostra a penetração do campo magnético no interior de uma amostra supercondutora.

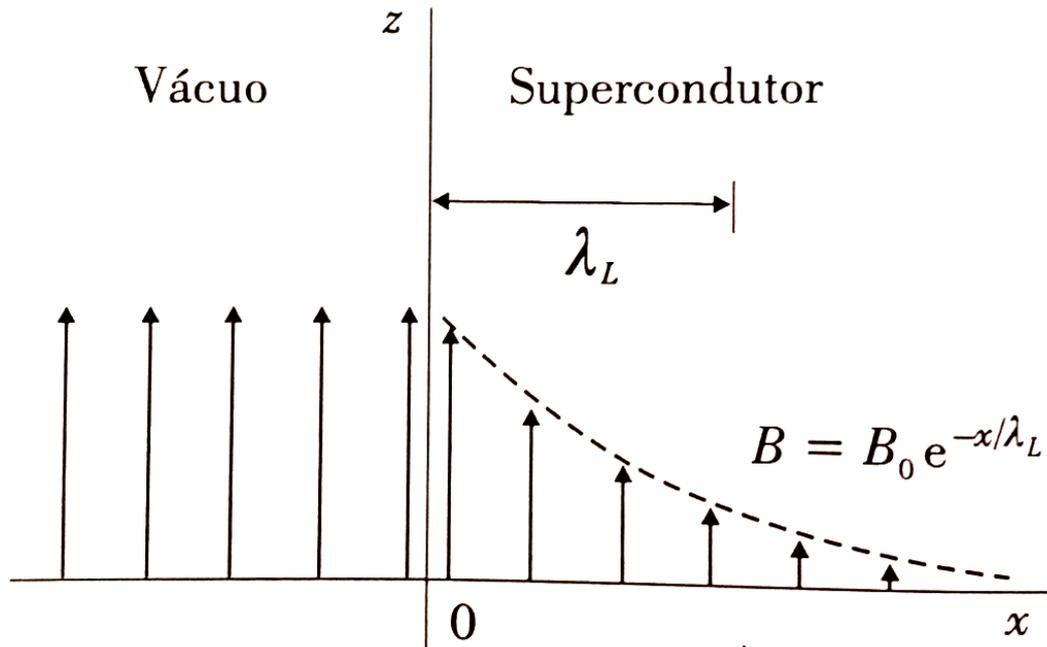


Figura 1.3: Representação do comprimento de penetração de London no interior de uma amostra supercondutor [5]

O comprimento de penetração de London λ mede a extensão da penetração do campo magnético dentro do supercondutor. De acordo com o efeito *Meissner* o campo magnético desaparece no interior do supercondutor, sendo que seu desaparecimento acontece dentro de um comprimento característico chamado de comprimento de penetração de London (λ).

1.3. Supercondutores Tipo II

A descoberta de supercondutores do tipo II deve-se à investigação feita por Abrikosov [6,7] em cima da teoria de Ginzburg–Landau. Em essência o parâmetro que determina se um supercondutor é tipo I ou II é a relação entre o comprimento de

penetração do campo magnético e o comprimento de coerência (será discutido com mais detalhes na seção 2.3), sou seja, $\kappa = \lambda/\xi$. Para supercondutores tipo II o parâmetro $\kappa > 1/\sqrt{2}$ e na presença de um campo magnético externo o mesmo penetra o interior do sistema formando vórtices magnéticos, cada vórtice carregando um quantum de fluxo (Φ_0).

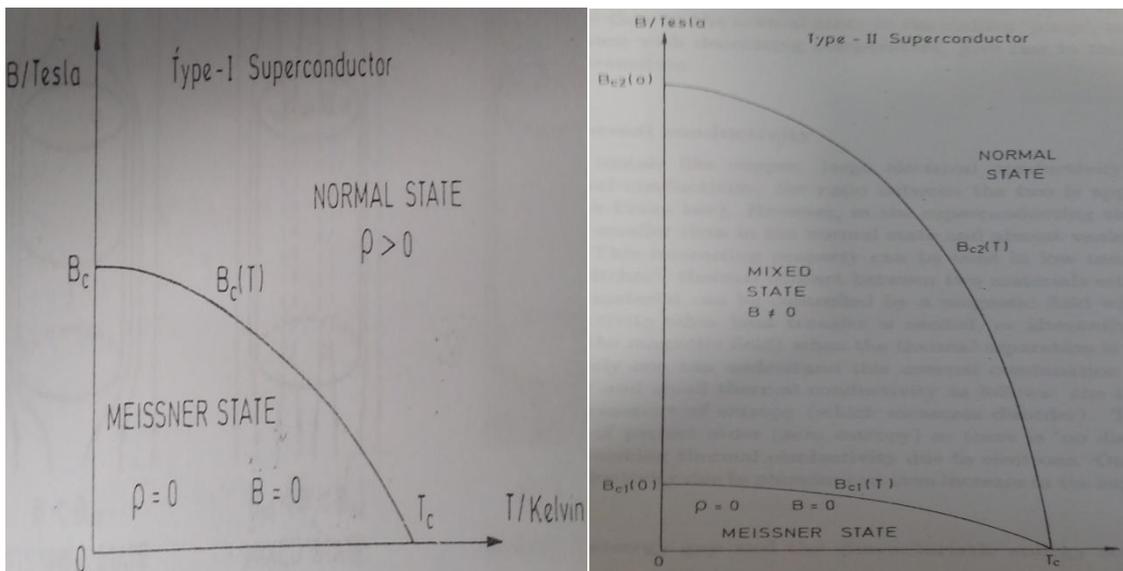


Figura 1.4: Transição para fase supercondutora do campo magnético em função da temperatura crítica. (a) Supercondutor tipo I. (b) Supercondutor tipo II [3]

Os supercondutores tipo II apresentam um diagrama de fases complexo onde merecem menção especial dois campos característicos, denominados H_{c1} e H_{c2} . Abaixo de H_{c1} o supercondutor expela completamente o fluxo enquanto que acima de H_{c2} a supercondutividade é destruída. O estado misto entre H_{c1} e H_{c2} foi outro resultado da análise de Abrikosov indicando que o fluxo penetrava como matrizes regulares de tubo de fluxo no qual cada uma com um fluxo quântico $\phi_0 = h/2e = 2,07 \times 10^{-15} \text{ Wb}$. Esta característica dos supercondutores do tipo II proporcionou o desenvolvimento de supercondutores com elevados campos críticos.

Como consequência das diferenças entre supercondutores tipo I e tipo II a resposta magnética de ambos os sistemas é bem diferente. Os supercondutores tipo I blindam o seu interior até um valor de campo em que o sistema transaciona abruptamente para o estado normal. Este campo crítico é identificado como H_c . Já

no tipo II existe uma resposta magnética característica entre os seus dois campos críticos cuja diferença é mostrada na Figura 1.5.

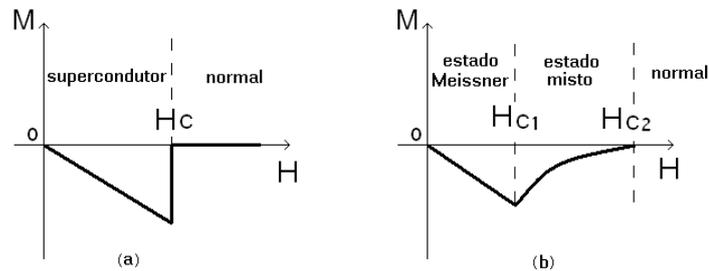


Figura 1.5: Gráfico da magnetização x campo magnético(a) Supercondutor tipo I (b) Supercondutor tipo II [8].

1.4. Teoria BCS

Com os avanços na pesquisa da supercondutividade e a descoberta da mecânica quântica, John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer [9,10] desenvolveram, em 1957, a teoria BCS que explicou o fenômeno da supercondutividade. A teoria BCS associa a supercondutividade à interação dos elétrons com os fônons. Os fônons são quanta de vibrações na rede cristalina de um material. Em temperaturas suficientemente baixas os elétrons supercondutores juntam-se em pares devido à interação com os fônons formando um estado ligado chamado pares de Cooper. Os pares de Cooper podem ser considerados como partículas de spin zero e, portanto, tem a possibilidade de ocupar o mesmo estado quântico não obedecendo necessariamente ao princípio de exclusão de Pauli.

A emissão ou absorção de energia dos elétrons no estado supercondutor ($T = 0$) está associada à dissolução dos pares de Cooper. A largura da banda proibida do estado supercondutor está relacionada com a energia necessária para desfazer um par de Cooper que no zero absoluto é dada por:

$$\Delta = 3,5k_B T_c \quad (1.17)$$

Os resultados experimentais juntamente com a teoria BCS previram que o fluxo magnético nas regiões normais dos supercondutores do tipo II é quantizado com o campo magnético crítico variando com a temperatura de acordo com:

$$\frac{B_c(T)}{B_c(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \quad (1.18)$$

Após a teoria BCS, as pesquisas em supercondutividade tiveram pouco avanço científico uma vez que a dificuldade estava em descobrir um material supercondutor com temperatura crítica alta. Este panorama mudou bastante com a descoberta de supercondutores em altas temperaturas feita por Bednorz e Muller [11] em 1986. Estes dois pesquisadores desenvolveram uma cerâmica do tipo perovskita supercondutora ($YBa_2Cu_3O_{7-y}$) com uma temperatura crítica acima de 90 K [11]. Com esta descoberta, viu-se que os maiores valores de temperatura crítica foram obtidos por cerâmicas formadas pela combinação de diferentes elementos (ex. BiSrCaCuO), então os trabalhos em supercondutividade foram retomados ou até iniciados por diversos pesquisadores. Dentre os objetivos das pesquisas atuais estão as tentativas de encontrar sistemas supercondutores com potencialidades tecnológicas (alta densidade de corrente crítica), ou aquelas com a finalidade de encontrar um material com o maior valor possível para a temperatura crítica. Muitos outros sistemas foram descobertos apresentando uma temperatura crítica bem mais elevada do que o recorde, até então pertencente ao sistema $YBaCuO123$. Atualmente o desenvolvimento de sistemas híbridos tem aberto outras janelas do ponto de vista das pesquisas nesta área.

1.5. Sistemas híbridos

A coexistência entre supercondutividade e ordem magnética num mesmo sistema tem sido estudada recentemente [12]. Em particular os sistemas híbridos supercondutor/ferromagnético (S/F) obtiveram uma considerável importância em razão da interação incomum entre a supercondutividade e o ferromagnetismo. Por algum tempo era colocado em questão a existência de uma estrutura híbrida formada por um material supercondutor e um material ferromagnético, uma vez que esses dois fenômenos são excludentes, veja, por exemplo o efeito Meissner. Contudo a introdução de tecnologias recentes na fabricação de filmes finos tem propiciado o desenvolvimento de sistemas híbridos compostos de materiais

magnéticos com diferentes estruturas magnéticas, em junção com sistemas supercondutores (ambos tipo I e tipo II) [13].

A modo de exemplo, as estruturas híbridas podem ser compostas por uma bicamada supercondutor/ferromagnético S/F; tricamadas S/F/S, F/S/F, S/F ou F/S, sendo que as duas últimas são compostas de duas camadas ferromagnéticas adjacentes polarizadas na mesma direção [14,15]; ou uma estrutura de multicamadas. A Figura (1.6) demonstra esses exemplos de sistemas híbridos [16,17]. O interesse no estudo de sistemas híbridos S/F está relacionado com o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos em escalas nanométricas. Por isso, é de extrema importância compreender os efeitos de proximidade entre o supercondutor e os sistemas magnéticos. Alguns exemplos a serem dados das aplicações de estruturas híbridas com três camadas: Corrente de tunelamento de pares de Cooper em estruturas S/F/S [16] cujo fenômeno é chamado de efeito Josephson, as propriedades de transporte dos spins dos elétrons polarizados em estruturas F/S/F [18–25], assim como também na reflexão de Andreev [24-25]. Como o objetivo deste trabalho são as estruturas híbridas com duas camadas como os mostrados na Figura 1.7, então não será dada ênfase às estruturas de três ou mais camadas [26].

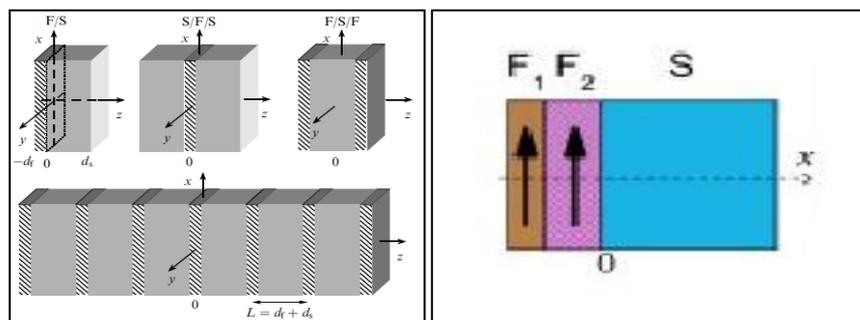


Figura 1.6: Exemplos de algumas estruturas híbridas: bicamada, tricamada e multicamada

Na interface entre os sistemas magnéticos e supercondutor o surgimento da ordem supercondutora é diretamente afetado pelo campo não homogêneo induzido pelo filme ferromagnético e como consequência disto, os sistemas híbridos S/F apresentam um exótico diagrama $T - H$ [27-31]. Em essência a supercondutividade é destruída por dois mecanismos físicos. O primeiro é a interação entre o parâmetro

de ordem supercondutor (será discutido com mais detalhes na seção 2.3) e o potencial vetor do campo magnético, efeito este chamado de efeito orbital. Este efeito é equivalente a uma saturação do espaço físico de um supercondutor tipo II por vórtices magnéticos. O outro mecanismo é determinado pela influência do campo de troca sobre os spins dos elétrons envolvidos na formação de pares de Cooper [16] (efeito chamado de paramagnético). As bicamadas S/F tornam possível investigar estes efeitos de uma forma controlada, uma vez que, diferentes parâmetros na heteroestrutura, por exemplo, espessura da camada S/F, fornecem resultados diferentes e situações físicas diferentes [32].

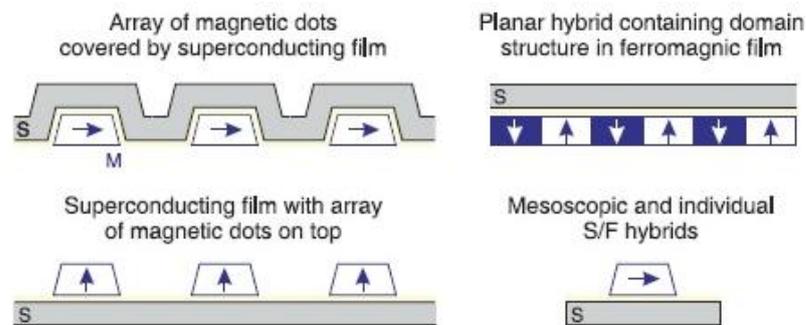


Figura 1.7: Exemplos de estruturas bicamadas [33]

As propriedades de um sistema híbrido na região próxima à interface podem ser alteradas. No caso de um sistema híbrido supercondutor/metal, os pares de Cooper podem penetrar alguma distância no metal sendo que se o movimento do elétron for difusivo esta distância é proporcional ao comprimento de difusão térmico $L_T \sim \sqrt{D/T}$ em que D é o coeficiente de difusão térmico. No caso de um metal normal a distância característica é calculada por $\xi_T \sim v_F/T$. Entretanto, as propriedades supercondutoras são induzidas no metal e este fenômeno é chamado de efeito de proximidade. Ao mesmo tempo a supercondutividade é enfraquecida na vizinhança da interface devido ao escoamento dos pares de Cooper, surgindo o efeito de proximidade inversa no qual resulta no decréscimo da temperatura de transição supercondutora [34,35].

Conforme destacado nos parágrafos anteriores, em um sistema híbrido os efeitos de proximidade por um lado, e os campos magnéticos da estrutura magnética do

sistema ferromagneto por outro lado, modificam as propriedades supercondutoras do sistema supercondutor. Contudo é possível construir sistemas híbridos onde o efeito de proximidade seja eliminado. Uma forma pode ser, por exemplo, a deposição de uma camada extremadamente fina isolante entre as camadas supercondutora e magnética. Nestes sistemas as propriedades físicas dependem inteiramente dos campos magnéticos gerados pela camada magnética. São estes os sistemas que pretendemos estudar do ponto de vista teórico neste trabalho. Eles oferecem muitas possibilidades tecnológicas, como por exemplo, o controle da nucleação da supercondutividade, a criação de canais de corrente controlados, e assim por diante [13,27]. Por este motivo este tema representa o objetivo central de estudo nesta dissertação de mestrado.

Sistemas híbridos apresentam uma oportunidade única de se estudar a inter-relação entre supercondutividade e outras formas de ordens a nível eletrônico. Em particular quando os sistemas físicos híbridos apresentam materiais magnéticos (usualmente na forma de filmes finos) surge uma excelente oportunidade para estudar a complexa relação entre supercondutividade e magnetismo. Deve-se destacar que muitos sistemas supercondutores mostram evidência de que o mecanismo de acoplamento que leva ao surgimento dos pares de Cooper é de natureza magnética. Do ponto de vista físico isto é essencial para entender a supercondutividade.

Por outro lado estes sistemas híbridos oferecem uma excelente oportunidade para controlar a própria supercondutividade, uma espécie de engenharia de supercondutores. Isto significa, por exemplo, controlar a nucleação do parâmetro de ordem supercondutor (ou seja, da supercondutividade), além de permitir o controle de propriedades físicas do supercondutor. Este último aspecto é relevante e muito importante para as possíveis aplicações tecnológicas de sistemas híbridos contendo supercondutores.

Neste sentido podem-se citar os trabalhos desenvolvidos por *A. Yu Aladyshkin* e colaboradores nos quais estruturas planas formadas por supercondutores e sistemas magnéticos mostram como o surgimento da supercondutividade pode ser controlada a nível espacial [27]. Por exemplo, a Figura 1.8 mostra microscopia a laser realizada em um filme de chumbo crescido sobre uma estrutura plana magnética com magnetização uniaxial ao longo do eixo perpendicular ao filme. O

filme magnético apresenta domínios magnéticos com magnetização alternada, sendo que a parede de domínios é mostrada na figura por linhas pontilhadas. Um campo magnético externo é aplicado sobre o filme de chumbo em ambos os sentidos perpendiculares ao plano da figura. A região clara sinaliza zonas com ausência de supercondutividade, enquanto os outros setores não demonstram dissipação, ou seja, são locais onde existe a supercondutividade [27].

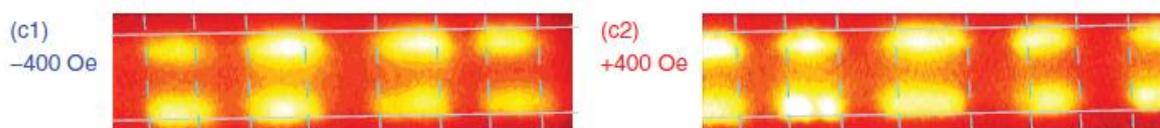


Figura 1.8: Nucleação controlada da supercondutividade em um sistema híbrido [27].

Nota-se que regiões no filme supercondutor localizadas em cima do mesmo domínio magnético podem ser supercondutoras ou não dependendo da direção do campo aplicado. Em outras palavras, a nucleação da supercondutividade pode ser controlada espacialmente. Isto abre possibilidades para desenvolver dispositivos eletrônicos com base em sistemas desta natureza, por exemplo, diodos ou transistor. De fato em um trabalho recente *Silaev* reporta estudos teóricos sobre como desenvolver um diodo supercondutor usando a possibilidade de que a nucleação da supercondutividade seja controlada devido à presença de domínios magnéticos no filme magnético de um sistema híbrido S/F [26]. Outro exemplo de como a temperatura crítica de um supercondutor pode ser alterado por uma heteroestrutura S/F pode ser observado também em [34].

Capítulo 2

Teoria de Ginzburg-Landau

2.1. Transições de fases

Sistemas físicos apresentam transições de fases para condições experimentais específicas. Dentro do critério contemporâneo de classificação de transições de fases, as mesmas podem ser classificadas como transição de primeira ordem e de segunda ordem também chamadas de contínuas. A transição de primeira ordem é caracterizada pela existência de calor latente para uma temperatura fixa, ou equivalentemente, a descontinuidade da primeira derivada da energia livre de Gibbs em função da temperatura. Já a transição de fase de segunda ordem tem como propriedades a ausência de calor latente, a presença de uma temperatura crítica T_c e apresentam singularidades em c_V , k_T e χ_T . Ambas transições apresentam continuidade na energia livre de Gibbs [36-38]. A Figura 2.1 mostram os gráficos do entropia em função da temperatura das transições de primeira e segunda [36].

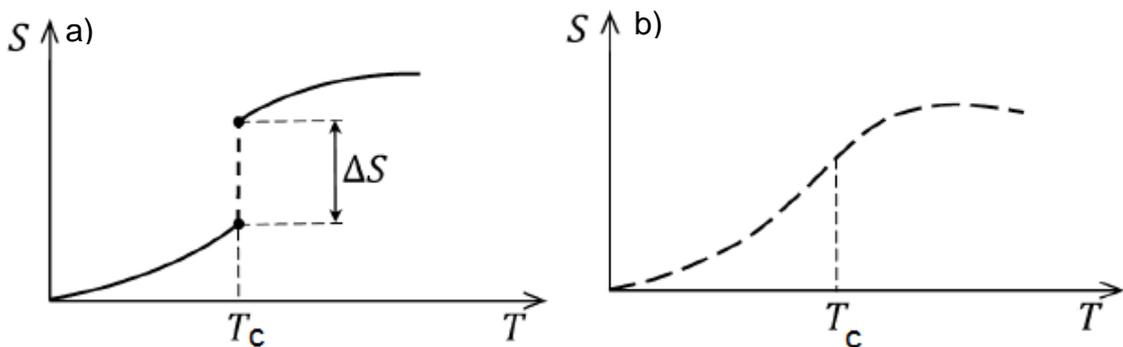


Figura 2.1: (a) Transição de fase de primeira ordem. (b) Transição de fase de segunda ordem [36]

Uma transição de fase acontece no momento em que a temperatura de uma substância atinge a temperatura crítica. Ao atingir esta temperatura crítica (ponto crítico), pode-se observar uma singularidade no calor específico. O comportamento das propriedades físicas perto do ponto crítico apresenta particularidades específicas que podemos chamar de criticalidade do sistema, sendo que muitas grandezas físicas divergem, ou tem comportamento assintótico, em forma de lei de potências. Estas leis de potências são caracterizadas, do ponto de vista matemático, pelos expoentes críticos. A conveniência de usar os expoentes críticos está em sua universalidade, fato embasado empiricamente, que consiste em encontrar os

mesmos expoentes críticos para diferentes sistemas físicos, os quais apesar de naturezas diferentes apresentam o mesmo comportamento perto de pontos críticos.

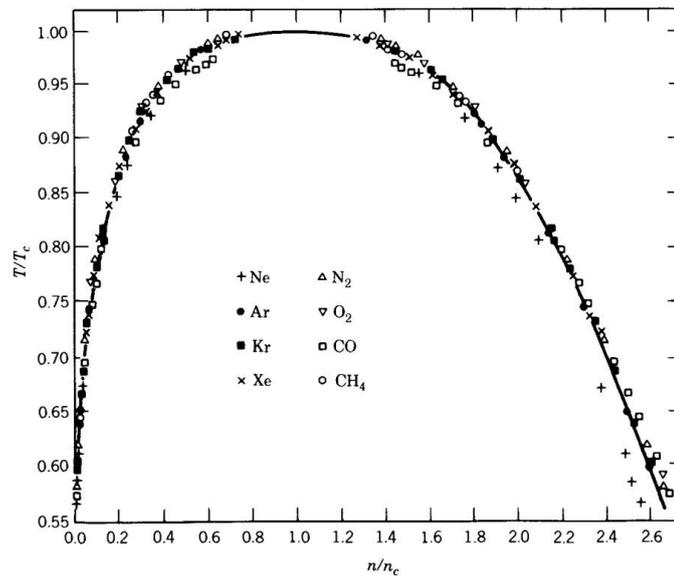


Figura 2.2: Gráfico temperatura reduzida x densidade reduzida de oito substâncias [38]

2.2. Modelo de Landau de transições de fases

Landau [37] desenvolveu em 1937 uma formulação unificada para transições de fases de segunda ordem. Ele postulou a existência de um funcional energia livre do sistema, chamado de energia livre de Landau, o qual contém os parâmetros que representam a estrutura do sistema. Em essência ele postulou a existência de um parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fases e cujo funcional energia livre depende em essência deste parâmetro de ordem. A teoria de Landau introduz a ideia de parâmetro de ordem [38] como um parâmetro essencial que descreve uma ordem específica na fase de baixa temperatura, causado pela quebra de simetria no sistema.

Conforme apontado acima, perto de um ponto crítico expande-se a energia livre como uma série de Taylor do parâmetro de ordem do sistema em questão. Esta teoria pode ser extrapolada ao caso de um sistema supercondutor conforme desenvolvido por Ginzburg no ano 1957. Resumindo, para um sistema

supercondutor Ginzburg adaptou a teoria de Landau transformando ela no que hoje tem por conhecimento a teoria de Ginzburg-Landau [39-41]. É importante ressaltar a importância desta ferramenta neste trabalho, logo a mesma será denominada em capítulos posteriores como teoria GL, além de que seus principais pontos serão abordados neste capítulo.

2.3. Teoria de Ginzburg–Landau

Ginzburg e Landau [39] introduziram uma pseudofunção de onda complexa ψ como um parâmetro de ordem dentro da teoria geral de Landau de transição de fase de segunda ordem. Esta pseudofunção de onda descreve a ordem na fase supercondutora e a mesma representa o parâmetro de ordem supercondutor em um sistema qualquer. Podemos interpretar esta pseudofunção como a densidade local de elétrons supercondutores (ou seja, pares de Cooper) e é dada pela equação seguinte.

$$n_s = |\psi|^2 \quad (2.1)$$

Conforme discutido anteriormente, em termos deste último parâmetro, o funcional de energia livre de Landau pode ser escrito:

$$f = f_{n0} + \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{h^2}{8\pi} \quad (2.2)$$

em que h é o campo total na amostra supercondutora, \mathbf{A} é o potencial vetor do campo, f_{n0} é a energia livre no estado normal, ψ é a pseudofunção de onda, m^* e e^* são a massa e a carga dos pares de Cooper, $\alpha = a(T - T_c)$, β é uma constante positiva independente de T [46]. A equação (2.1) leva em consideração as variações espaciais do parâmetro de ordem supercondutor.

No início, a teoria de Ginzburg–Landau não recebeu a devida importância sendo considerada uma teoria fenomenológica. Foi Gor'kov [41], no ano de 1959, quem mostrou que a teoria GL representada uma situação particular da teoria BCS, com validade na vizinhança do ponto crítico (temperatura crítica), em que ψ pode ser

interpretado como a função de onda do movimento do centro de massa dos pares de Cooper.

A teoria de Ginzburg-Landau é uma teoria não linear em que os efeitos não lineares podem ser estudados, ao contrário da teoria de London. De fato, o tratamento dado por Ginzburg e Landau tornou possível abordar os efeitos não lineares devido à dependência espacial tanto do campo magnético quanto do parâmetro de ordem supercondutor. Isto representa uma diferença essencial com relação à teoria de London [2]. Este tratamento permitiu prever um estado intermediário em que existe a coexistência de regiões supercondutoras e outras normais formadas por vórtices magnéticos. O surgimento destes vórtices é consequência da competição entre a diminuição de energia do sistema devido à presença de pares de Cooper por um lado (caracterizado pela distância ξ), e o aumento de energia devido à presença do campo magnético (caracterizado espacialmente por λ) conforme ilustrado na Figura 2.3 [1]. Isto leva ao surgimento de uma energia superficial negativa que propicia o surgimento de vórtices magnéticos no estado supercondutor.

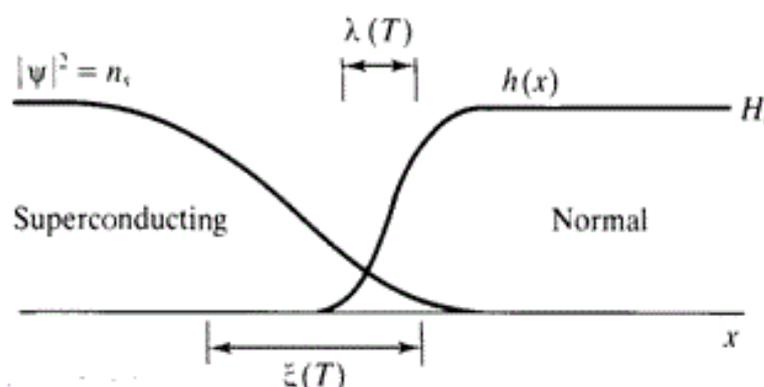


Figura 2.3: Interface entre os domínios supercondutor e normal no estado intermediário de uma amostra supercondutora.

A teoria de GL incluiu o comprimento de coerência de Ginzburg-Landau [1] que compreende a distância em que o parâmetro de ordem ψ pode variar significativamente dentro do material supercondutor. Este comprimento de coerência é calculado por (2.3) e é mostrado na Figura 2.4 [15].

$$\xi(T) = \frac{\hbar}{|2m^* \alpha(T)|^{1/2}} \quad (2.3)$$

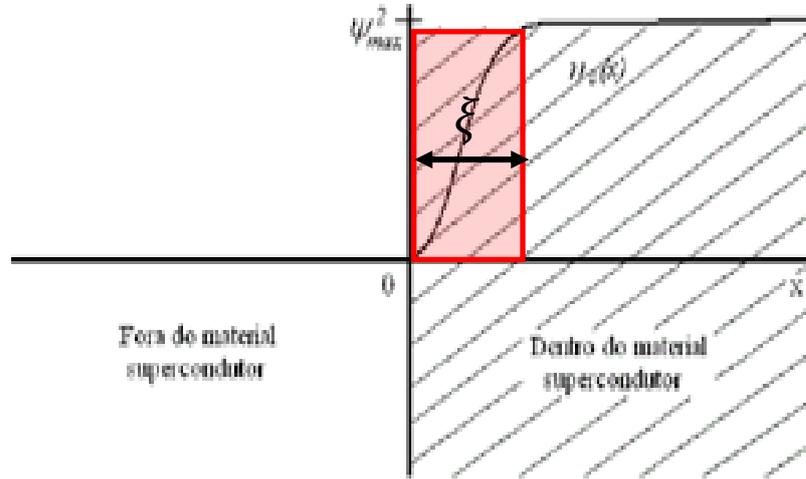


Figura 2.4: Comprimento de coerência de Ginzburg-Landau dentro do material supercondutor [15].

2.4. Linearização da primeira equação de Ginzburg-Landau

Na transição de fase do estado normal para o estado supercondutor, o parâmetro de ordem é muito pequeno ($|\psi| \ll 1$) e com isso, a densidade de pares de Cooper ($|\psi|^2$) torna-se desprezível. Sendo assim, o termo não linear em (A.4) e as correções causadas pelas correntes de blindagem no potencial vetor A (A.5) são desprezadas. A nucleação da supercondutividade será verificada através da equação de GL linearizada [1,43,44].

$$-\left(\nabla - i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\right)^2 \psi = \frac{1}{\xi^2} \psi \quad (2.4)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{j}_{ext}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' + \int \frac{\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (2.5)$$

Deve-se destacar que a equação (2.4) será essencial a este trabalho já que a análise da mesma é suficiente para encontrar a nucleação supercondutora, ou seja, encontrar T_c assim como também o parâmetro de ordem supercondutor. Deve ser

ênfatizado que esta equação linear é válida para campos magnéticos da ordem do segundo campo crítico para um supercondutor tipo II, ou seja, na iminência do surgimento do estado supercondutor no sistema.

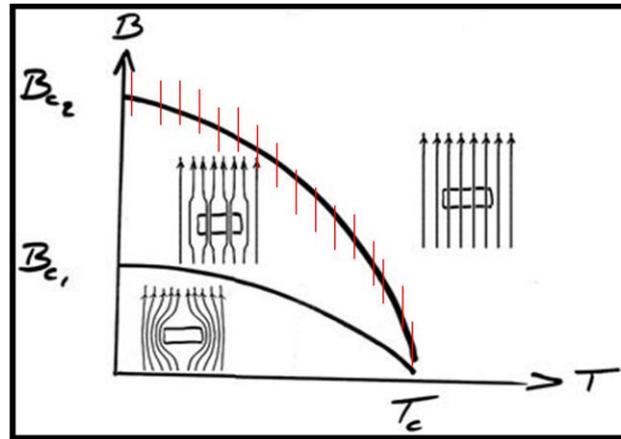


Figura 2.5: Diagrama de fases de um supercondutor tipo II e a região de validade da equação linearizada de Ginzburg - Landau.

A região de validade da equação linearizada de Ginzburg - Landau encontra-se marcada em vermelho na Figura 2.5.

2.5.Exemplos de aplicações da equação de Ginzburg – Landau linearizada

Nesta seção alguns exemplos ilustrativos de aplicações das equações GL são mostrados. Estes exemplos mostram como estas equações podem ser usadas para obter-se informações sobre sistemas supercondutores.

2.5.1. Nucleação supercondutora em *bulk* simples

A equação de Ginzburg – Landau linearizada permite resolver diversos problemas de nucleação do parâmetro de ordem em amostras supercondutoras. Nesta seção, o

problema da nucleação em um modelo *bulk* simples será abordado. Supõe-se um campo magnético ao longo do eixo z (2.6) e um potencial vetor conveniente escolhido na aproximação de calibre de London (2.7).

$$\mathbf{H} = H_0 \mathbf{z}_0 \quad (2.6)$$

$$A_y = x H_0 \quad (2.7)$$

Note que o potencial magnético reproduz a configuração de campo magnético dada pela equação (2.6). Para calcular o parâmetro de ordem ψ , substituem-se as equações (2.6) e (2.7) em (2.4). Como resultado surge uma equação diferencial não homogênea e com coeficientes que dependem da variável x . Busca-se a solução na forma:

$$\psi = f(x)e^{i(k_y y + k_z z)} \quad (2.8)$$

$$-\left(\nabla - i \frac{2\pi}{\Phi_0} x H_0\right)^2 f(x)e^{i(k_y y + k_z z)} = \frac{1}{\xi^2} f(x)e^{i(k_y y + k_z z)}$$

$$\left[-\nabla^2 + \frac{4\pi i}{\Phi_0} x H_0 \frac{\partial}{\partial y} + \left(\frac{2\pi H_0}{\Phi_0}\right)^2 x\right] f(x)e^{i(k_y y + k_z z)} = -\frac{1}{\xi^2} f(x)e^{i(k_y y + k_z z)}$$

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi H_0}{\Phi_0}\right)^2 (x - x_0)^2 f(x) = \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2\right) f(x) \quad (2.9)$$

$$x_0 = \frac{k_y \Phi_0}{2\pi H_0} \quad (2.10)$$

Através de um algebrismo matemático, multiplicando (2.9) por $\hbar^2/2m$, obtém-se justamente a equação de Schrodinger para uma partícula de massa m ligada ao potencial do oscilador harmônico com constante de força $(2\pi\hbar H_0/\Phi_0)^2/m$ e com frequência de oscilação ω .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f''(x) + \frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi\hbar H_0}{\Phi_0}\right)^2 (x - x_0)^2 f(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2\right) f(x) \quad (2.11)$$

$$-\hbar^2 f''(x) + \left(\frac{2\pi\hbar H_0}{\Phi_0}\right)^2 (x - x_0)^2 f(x) = \hbar^2 \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2\right) f(x) \quad (2.12)$$

Comparando a equação (2.11) com a equação de Schrodinger [45] para o oscilador harmônico podemos fazer uma analogia a fim de resolver a equação (2.11).

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (2.13)$$

$$\omega = \frac{1}{m} \frac{2\pi\hbar H_0}{\Phi_0} \quad (2.14)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2\right) \quad (2.15)$$

Pela analogia com os resultados para o oscilador harmônico podemos concluir que a frequência fundamental é dada pela equação (2.14), enquanto que os autovalores são dados pela equação (2.15). Igualando as expressões (2.13) e (2.15) encontra-se o campo crítico superior H_{c2} .

$$H_0 = \frac{\Phi_0}{2\pi(2n+1)} \left(\frac{1}{\xi^2} - k_z^2\right) \quad (2.16)$$

O menor autovalor de energia corresponde a $n = 0$ e $k_z = 0$ e, conseqüentemente, ao campo crítico da transição supercondutora.

$$H_{c2}(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2(T)} \quad (2.17)$$

Levando em conta a dependência com a temperatura do comprimento de coerência tem-se:

$$H_{c2}(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

$$H_{c2}(T) = H_{c2}(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \quad (2.18)$$

Ou em termos da temperatura reduzida $t = 1 - \frac{T}{T_c}$

$$H_{c2}(T) = H_{c2}(0)(1 - t) \quad (2.19)$$

2.5.2. Nucleação Supercondutora em Superfícies

O comportamento da nucleação próximo à superfície de uma amostra supercondutora deve ser levado em consideração como um caso separado. Saint – James e de Gennes [47] demonstrou que pode ocorrer uma nucleação da supercondutividade em uma interface metal – isolante com um campo H_{c3} paralelo à superfície e maior que o campo normal H_{c2} . A relação entre H_{c3} e H_{c2} é dada através da equação (2.20) [1,47].

$$H_{c3} = 1,695 H_{c2} \quad (2.20)$$

Para um campo H entre H_{c2} e H_{c3} , existe um revestimento supercondutor em torno da amostra. Esse revestimento tem espessura, aproximadamente, da mesma dimensão de $\xi(T)$ enquanto $\psi \rightarrow 0$ no interior da amostra.

Para confirmar a veracidade de (2.20), duas ressalvas são feitas sobre a amostra: a primeira que $\xi(T)$ seja muito pequeno com relação às dimensões do *bulk* e a segunda é que a superfície seja grande o suficiente para permitir que a nucleação em torno dela leve a uma diminuição da energia do sistema [47]. Com essas duas hipóteses, torna-se apropriado surgir um núcleo supercondutor quando o campo H for paralelo à superfície.

Para entender este efeito supõe-se uma amostra com o campo aplicado paralelo à superfície da amostra, o plano yz . A amostra supercondutora ocupando a metade do espaço ($x > 0$) enquanto que em $x < 0$ existe o vácuo ou um isolante. As dimensões transversais são consideradas infinitas. Na borda deve se levar em consideração as condições de contorno apropriadas à equação que descreve a nucleação supercondutora.

$$\left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{2eAx}{c} \right) \psi \right]_{x=0} = 0 \quad (2.21)$$

Novamente, com uma conveniente escolha do potencial vetor, $A_x = A_z = 0$, e $A_y = Hx$ (calibre de London) encontra-se a solução geral.

$$\psi = f(x)e^{ik_y y} \quad (2.22)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (2.23)$$

Com a solução (2.22) juntamente com as condições de contorno (2.23), obtém-se mais uma vez tem-se a equação de Schrodinger [46] para um oscilador harmônico de frequência angular $\omega = 2eH/mc$, com o potencial mínimo encontrado em x_0 .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\hbar k - \frac{2e}{c} Hx \right)^2 f = -\alpha f \quad (2.24)$$

$$x_0 = \frac{\hbar ck}{2eH} \quad (2.25)$$

A equação de Schrodinger toma a forma (2.24) enquanto o valor x_0 é dado pela equação (2.25). Qualitativamente a função de onda é centralizada na região de dimensão de $\xi(T)$ ao redor de x_0 . Pode-se procurar uma solução usando uma função de teste do tipo (2.26). Esta solução (2.26) satisfaz a equação (2.24) com os autovalores similares aos encontrados para nucleação no bulk do supercondutor (2.27) para valores extremos do parâmetro x_0 , $x_0 \gg \xi(T)$ ou $x_0 = 0$.

$$f = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - x_0}{\xi(T)} \right)^2 \right] \quad (2.26)$$

$$-\alpha = \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{e \hbar H}{mc} \quad (2.27)$$

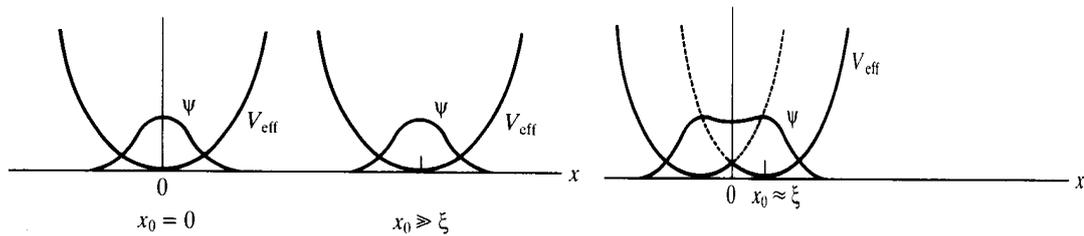


Figura 2.6: Potencial para a nucleação na superfície e interior da amostra no campo crítico H_{c2} (esquerda) e a nucleação na superfície da amostra em H_{c3} (direita)

Na situação em que x_0 possui valores intermediários, os autovalores são menores que (2.27). Para entender isto se considera uma equação de Schrodinger aplicada para $-\infty < x < \infty$ cujo potencial $V(x)$ é dado da seguinte forma:

$$V(x) = \frac{2e^2H^2}{mc^2}(x - x_0)^2 \quad (x > 0) \quad (2.28)$$

$$V(x) = V(-x) \quad (x < 0) \quad (2.29)$$

Este potencial é simétrico e tem por uma solução uma função simétrica e que satisfaz também a condição de contorno (2.23) conforme mostrado na Figura 2.5. Basta então encontrar esta solução e considerar só a parte para $x > 0$ que tem sentido físico. Agora os autovalores para esta solução devem ser menores do que os encontrados anteriormente já que o potencial é mais largo e de menor valor do que aquele que seria sem considerar a parte imaginária do lado esquerdo. Isto pode se apreciar melhor comparando o potencial esquerdo (nucleação no *bulk*) ao direito (nucleação na borda) na Figura 2.5.

Capítulo 3

Solução de Equações Diferenciais por Métodos Numéricos

3.1. Métodos numéricos

O método de solução por funções ondas planas é um dos mais utilizados para a solução de equações diferenciais em diversas áreas da física. Entretanto, este método torna-se um pouco trabalhoso em diversos problemas por sua função de base não situar-se no espaço real, dando origem a uma densa matriz Hamiltoniana [48]. Outra desvantagem do método das ondas planas diz respeito à necessidade de transformações de Fourier [49] de difícil execução para encontrar sua solução. As técnicas de solução de problema pelo método das ondas planas vêm aumentando como os pseudopotenciais ultramacios [50], pseudopotenciais otimizados [51,52] e transformações de coordenada adaptáveis [53-59].

Outros métodos numéricos de resolução de equações diferenciais foram criados a fim de suprir as dificuldades impostas pelo método de ondas planas. Dentre estes métodos numéricos estão o método de diferenças finitas (MDF) [60-70], método do elemento finito (MEF) [71-81] e o método *wavelet* [82-85], além e outros. Atualmente muitos destes métodos são implementados em pacotes computacionais disponíveis em universidades e centros de pesquisas. Nesta dissertação pretende-se fazer uma análise do fenômeno da nucleação da supercondutividade em sistemas bicamadas onde a estrutura magnética é bem complexa. A análise será feita a partir da primeira equação de GL o que levará a uma equação diferencial muito difícil de ser resolvida analiticamente. Por este motivo enfrentou-se o problema de resolver uma equação diferencial visando encontrar uma solução numérica. Por isso, será dada uma ênfase maior no MDF no qual possui uma discretização do domínio do problema proposto como a sua principal característica [88]. Conseqüentemente, o espaço da variável independente é discretizado e posteriormente as derivadas são substituídas por diferenças finitas nos elementos das partições. Isto leva à substituição da equação diferencial por uma série de equações algébricas nos diferentes pontos da partição do domínio de estudo.

3.2. Diferenças finitas. Definições básicas

Considere um domínio que é dividido em N partições ou malhas igualmente espaçadas, $\Delta x = x_{i+1} - x_i$ no qual $i = 1, \dots, N$ conforme mostrado na figura abaixo [88].

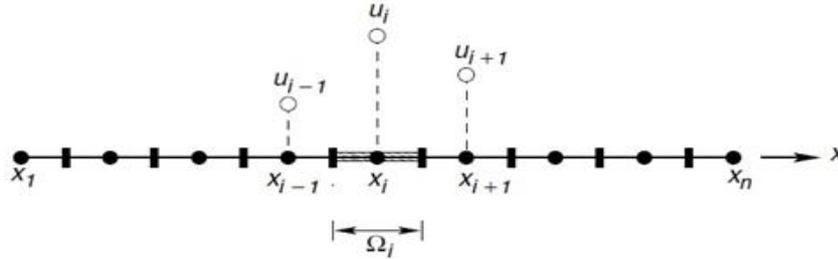


Figura 3.1: Discretização de um domínio em intervalos igualmente espaçados

Neste contexto pode-se definir as derivadas nos pontos do domínio x_i como aproximações em diferenças finitas. Existem diversas formas para fazer isto dependendo da forma escolhida para fazer a aproximação.

$$u_x|_i \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + o(\Delta x) \quad (3.1)$$

$$u_x|_i \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + o(\Delta x) \quad (3.2)$$

$$u_x|_i \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + o(\Delta x^2) \quad (3.3)$$

Define-se diferença finita adiantada, diferença finita atrasada e diferença finita centrada, as equações (3.1), (3.2) e (3.3) respectivamente. Estas aproximações em diferenças finitas coincidem com as derivadas no limite $\Delta x \rightarrow 0$ conforme

$$u_x|_i = u_x(x_i) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} \quad (3.4)$$

$$u_x|_i = u_x(x_i) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_i) - u(x_i - \Delta x)}{\Delta x} \quad (3.5)$$

$$u_x|_i = u_x(x_i) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (3.6)$$

Nas expressões anteriores $U_x|_i = U(x_i)$ representa a derivada no ponto x_i . Expressões similares às anteriores podem ser extrapoladas para aproximar as segundas derivadas em pontos específicos, e assim sucessivamente para outras derivadas de ordem maior. Para demonstrar estas aproximações desenvolve-se uma função em série de Taylor na vizinhança de um ponto x_i conforme

$$u_{i+1} = u_i + u_x|_i \Delta x + u_{xx} \frac{\Delta x^2}{2} + \dots + \frac{d^n u}{dx^n}|_i \frac{\Delta x^n}{n!} + \frac{d^{n+1} u}{dx^{n+1}}(x^*) \frac{\Delta x^{n+1}}{(n+1)!} \quad (3.7)$$

Esta aproximação pode ser usada para escrever duas expressões úteis

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x u_x|_i + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}|_i + \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx}|_i + \dots \quad (3.8)$$

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x u_x|_i + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}|_i - \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx}|_i + \dots \quad (3.9)$$

A partir das equações (3.8) e (3.9) pode-se chegar às equações (3.1), (3.2) e (3.3) respectivamente. Note que existem outras aproximações de ordem maior. Neste contexto discutido nesta seção a segunda derivada pode ser aproximada por:

$$u_{xx}|_i \approx \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{\Delta x^2} + o(\Delta x^2) \quad (3.10)$$

Estas aproximações em diferenças finitas são usadas para resolver numericamente equações diferenciais de interesse. Note também que o método trunca as séries de Taylor o qual introduz um erro de truncamento na aproximação usada para as derivadas

3.3. Método de diferenças finitas (MDF)

O método de resolução numérica da equação diferencial por diferenças finitas consiste em particionar o intervalo de validade da equação diferencial conforme mostrado na Figura 3.1 e aplicar sucessivamente as aproximações em diferenças finitas em cada ponto da malha obtida com a partição. Como as derivadas são

substituídas por diferenças finitas nos pontos específicos este processo fornece um sistema de equações algébricas cuja solução representa a solução da equação diferencial aproximada em cada ponto da partição.

A modo de exemplo considere a equação diferencial a ser resolvida do tipo Schrodinger, similar à que será usada posteriormente no capítulo de resultados.

$$-f''(x) + V(x)f(x) = Ef(x) \quad (3.11)$$

Considere o intervalo particionado em N partes com o mesmo comprimento Δ conforme discutido na seção anterior. O ponto esquerdo da partição corresponde ao mínimo do intervalo (x_0) enquanto o máximo x_N representa o extremo direito do intervalo. Substituindo (3.10) na equação diferencial (3.11) e aplicando as aproximações para cada nó da partição obtém-se, por exemplo, para o nodo n .

$$-\frac{f(x_{n+1})}{\Delta^2} - \frac{f(x_{n-1})}{\Delta^2} + \frac{2f(x_n)}{\Delta^2} + V(x_n)f(x_n) = Ef(x_n) \quad (3.12)$$

As equações anteriores quando estendidas a toda a malha fornecem uma equação matricial que pode ser resolvida numericamente. A introdução de condições de bordas ajuda a finalizar o problema. Por exemplo, para o problema anterior e usando condições de bordas periódicas obtém-se:

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + V & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ \dots & -\frac{1}{\Delta^2} & \left(\frac{2}{\Delta x^2} + V\right) & -\frac{1}{\Delta^2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -\frac{1}{\Delta^2} & \left(\frac{2}{\Delta x^2} + V\right) & -\frac{1}{\Delta^2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \dots & \dots & \dots & -\frac{1}{\Delta^2} & \left(\frac{2}{\Delta x^2} + V\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(x_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} f(x_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

A equação matricial anterior representa uma equação de autovalores que pode fornecer os autovalores e autovetores correspondentes.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1. Estudo de um filme supercondutor/ferromagnético com magnetização uniaxial na ausência de domínio

O primeiro sistema estudado é um sistema ideal simples formado por um sistema híbrido supercondutor/ferromagneto, em que um filme fino supercondutor do tipo II é depositado em cima de um filme ferromagnético espesso, com magnetização uniaxial uniforme. Ambos os sistemas estão separados por uma camada desprezível e isolante. O objetivo desta camada é sinalizar que o efeito de proximidade não interfere nas análises conforme discutido na parte introdutória. A escolha do supercondutor como do tipo II é consequência de que muitos sistemas híbridos são desenvolvidos usando-se Nb, que é um supercondutor tipo II. Deve-se destacar que esta é uma situação ideal e a mesma é equivalente a um supercondutor na presença de um campo magnético uniforme. Por exemplo, são desprezados efeitos de distorção do campo magnético nas bordas do sistema assim como possíveis influências do supercondutor sobre a estrutura magnética.

O objetivo secundário deste ponto é verificar um resultado conhecido das equações de GL e comparar os resultados numéricos com os padrões esperados para esta situação física. A configuração física deste sistema hipotético é representada na figura abaixo.

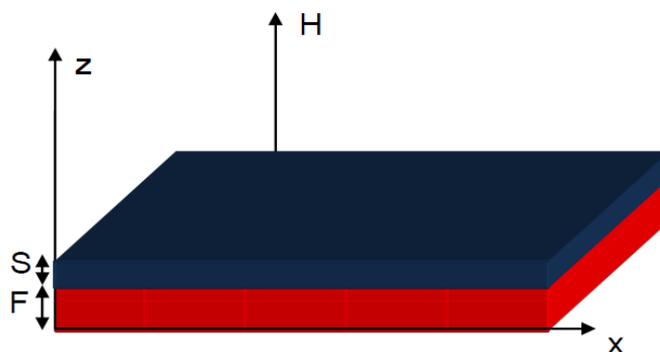


Figura 4.1: Campo magnético perpendicular a um filme supercondutor ferromagnético

Sendo o filme supercondutor extremamente fino ($D_{sup.} \ll$ todas as outras grandezas relevantes ao problema) podem-se desprezar as variações espaciais do parâmetro de ordem supercondutor ao longo do eixo z . Também o campo magnético efetivo é considerado uniforme ao longo deste eixo. Para tratar esta situação física, e dentro

da escolha de calibre de London, o potencial magnético pode ser expresso por $\mathbf{A} = Bx \mathbf{y}$, ou seja, o potencial vetor magnético está na direção y e depende somente da variável x . Nesta situação a solução procurada pode ser escrita como um produto entre uma função dependente de x e uma onda plana na direção y [1].

$$\Psi(x, y) = f(x)e^{iky} \quad (4.1)$$

Como o foco principal neste caso é o fenômeno da nucleação do parâmetro de ordem superconductor, precisa-se resolver a equação de Ginzburg-Landau linearizada, no qual foi discutida com maiores detalhes no capítulo 2 (2.10).

$$\xi^2(T) \left(-i\nabla - \frac{2e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \Psi(x, y) = \Psi(x, y) \quad (4.2)$$

$$\xi^2(T) = \frac{\xi_0^2}{(1-t)} \quad (4.3)$$

$$\xi_0^2 \left\{ \left[-f''(x) + \left(k - \frac{2\pi A_y}{\phi_0} \right)^2 f(x) \right] \right\} = (1-t)f(x) \quad (4.4)$$

$$-\xi_0^2 f''(x) + \left(\xi_0 k - \xi_0 \frac{2\pi A_y}{\phi_0} \right)^2 f(x) = (1-t)f(x) \quad (4.5)$$

Substitui-se o potencial vetor magnético e o comprimento de coerência em função da temperatura (4.3), e chega-se à equação (4.5).

Com a mudança de variável $(x', y', z') = \left(\frac{x}{\xi_0}, \frac{y}{\xi_0}, \frac{z}{\xi_0} \right)$, definindo $x_0 = \xi_0 k$ e $A' = \xi_0 \frac{2\pi A}{\phi_0}$, obtém-se a equação:

$$-f''(x') + (x_0 - A'_y)^2 f(x') = (1-t)f(x') \quad (4.6)$$

Esta equação representará a equação de análises para as diferentes situações que serão abordadas nesta dissertação. Deve se destacar que toda esta abordagem é valida para $H \approx H_{c2}$. Em essência as diferentes situações estudadas em esta tese correspondem a diferentes potenciais magnéticos, logo sempre se voltará a ela como equação de partida para analisar uma situação específica. Neste caso em

particular a componente A'_y do potencial magnético é dada por $A'_y = \xi_0^2 2\pi B x' / \phi_0$. Para este caso específico, ao substituir A'_y em (4.6) chega-se à equação:

$$-f''(x') + \left(\frac{\xi_0^2}{\phi_0} 2\pi B x' - x_0 \right)^2 f(x') = (1 - t)f(x') \quad (4.7)$$

Definindo $B_{c2}(0) = \phi_0 / 2\pi \xi_0^2$, $h = B / B_{c2}(0)$ e substituindo em (4.7):

$$-f''(x') + (hx' - x_0)^2 f(x') = (1 - t)f(x') \quad (4.8)$$

A equação (4.8) representa uma equação de autovalores tipo Schroedinger na variável normalizada $x' = \frac{x}{\xi_0}$ cujo potencial efetivo é dado por $V(x') = hx' - x_0$ e com autovalores $(1 - t)$. Esta equação foi resolvida usando-se o método de diferenças finitas discutido no Capítulo 3. Para este fim foi construído um algoritmo no MATLAB visando encontrar o valor de x_0 que fornece o menor autovalor $(1 - t)$ para um valor de campo h fixo. Nesta situação o menor autovalor representa o maior valor de $t = T_c / T_{c0}$, ou seja, a temperatura crítica equivalente à nucleação da supercondutividade. Claro que como o autovalor depende de h então $t = T_c / T_{c0}$ dependerá também do campo h . A ideia proposta no algoritmo explicitado aqui será usada ao longo desta dissertação para encontrar temperaturas críticas em diversas situações físicas correspondendo a diferentes potenciais efetivos. A Figura 4.2 mostra o fluxograma, demonstrando a maneira como o problema foi abordado. Finalmente, o problema matemático exposto necessita de condições de borda sendo que estas condições, se modificadas, alteram o resultado do problema [92].

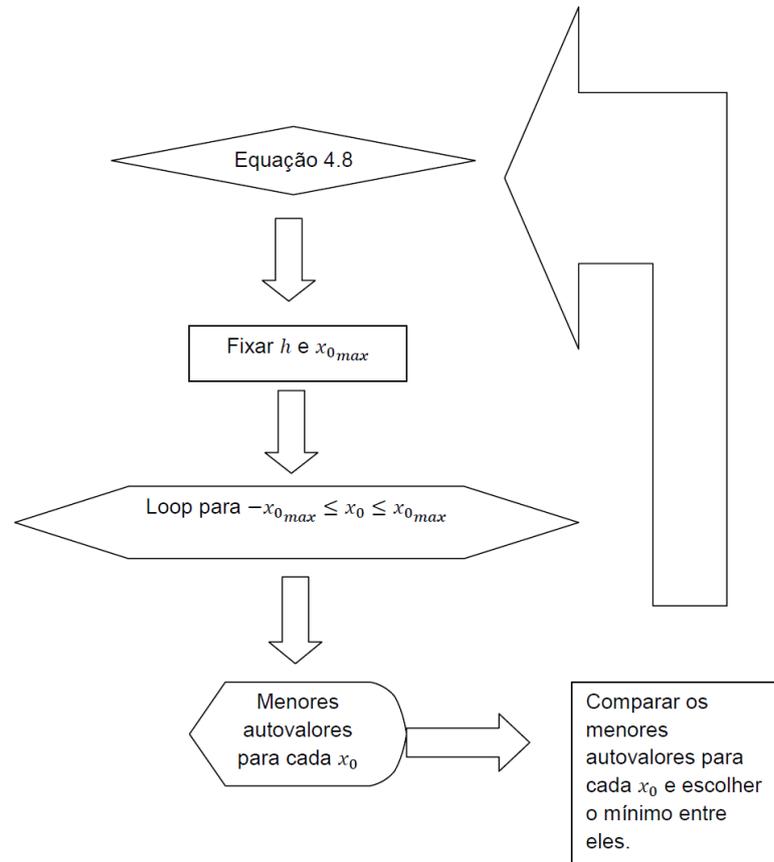


Figura 4.2: Fluxograma do algoritmo do MATLAB para encontrar x_0 fornecendo, deste modo, o menor autovalor de $(1 - t)$ com um valor fixo de h .

4.1.1. Condições de bordas periódicas

Os primeiros resultados para a equação (4.8) foram obtidos através de condições de borda periódicas. Esta situação representa do ponto de vista físico, a nucleação da supercondutividade para um modelo *bulk*, ou seja, um filme infinito. Sabendo que $B_{c2}(T) = \phi_0/2\pi \xi^2(T)$, e dada a dependência $\xi^2(T)$ é de se esperar que nesta situação os autovalores calculados correspondam ao próprio valor de h , dado que, em amostras *bulk* a nucleação deve corresponder com o valor do segundo campo crítico. Seguindo o algoritmo, diferentes autovalores foram encontrados para valores distintos de h cujos resultados são mostrados na tabela abaixo. Na tabela, os valores do segundo campo crítico em função da temperatura foram invertidos a fim de atribuir temperaturas críticas em função de campo magnético. Também aparecem mencionados os valores de x_0 em que os autovalores são mínimos.

Tabela 4.1: Resultados obtidos pelo MATLAB com condições de bordas periódicas

$h = B/B_{c2}(0)$	x_0	$(1 - t)$	$t = T_c/T_{c0}$
0,1	-5,33	0,10000	0,90000
0,2	-11,60	0,20000	0,80000
0,3	-18,07	0,30000	0,70000
0,4	-24,6	0,40000	0,60000
0,5	-31,01	0,49999	0,50001
0,6	-37,79	0,59999	0,40001
0,7	-44,49	0,69999	0,30001
0,8	-51,00	0,79998	0,20002
0,9	-57,68	0,89998	0,10002
1,0	-64,55	0,99997	2,50006E-5

Conforme destacado no início desta seção deve-se notar que estudar este problema com as condições de bordas periódicas é o equivalente a estudar um modelo *bulk*, em que a nucleação supercondutora na borda não é relevante e, portanto, a nucleação é esperada em H_{c2} e não em H_{c3} . lembre-se que $B_{c2}/B_{c2}(0) = 1 - (T/T_c)$ e $h = B_{c2}/B_{c2}(0)$, logo pode-se escrever $h = (1 - t)$ para esta situação em particular. Então os autovalores da equação (4.8) devem corresponder a h conforme demonstrado na tabela 4.1. Note também que invertendo estas análises podemos obter temperaturas críticas para valores de campos efetivos $h = B/B_{c2}(0)$.

Resumindo, pode-se dizer que para esta situação a conclusão alcançada é que o valor de h deve ser justamente o autovalor procurado. Por exemplo, segundo o raciocínio exposto no parágrafo anterior, para o caso em que $h = 0,1$ a equação (4.8) assume a forma $-f''(x') + (0,1x' - x_0)^2 f(x') = (1 - t)f(x')$ e o autovalor deve ser também $(1 - t) = 0,1$. Tal suposição é comprovada numericamente conforme dados da tabela (4.1) em que os valores de h e o autovalor $(1 - t)$ são iguais. Nota-se na tabela que os valores mencionados para os autovalores apresentam divergências com relação aos valores esperados somente na quinta casa decimal após a vírgula o que de maneira qualitativa valida o método numérico de resolução usado no algoritmo.

O comando do MATLAB usado para calcular os autovalores fornece também o valor do autoestado correspondente ao mínimo autovalor reportado. Deve-se destacar que este autoestado está modificado pelo próprio comando do MATLAB de tal forma que a área embaixo da curva seja equivalente a uma unidade, o que dificulta ou impossibilita uma comparação quantitativa entre diferentes nucleações para diferentes campos. Apesar disso os aspectos qualitativos do fenômeno da nucleação como posição do parâmetro de ordem e largura do mesmo podem ser comparados.

Para este fim mostra-se na Figura (4.3) o comportamento da nucleação do parâmetro de ordem supercondutor. É pouco provável fazer uma previsão do local específico em que surge um núcleo supercondutor precisamente por se tratar de um modelo *bulk*. Como esperado o mesmo acontece no interior da amostra. De acordo com a Figura (4.3), na situação em que $h = 0,1$ o núcleo supercondutor aparece em uma região relativamente mais extensa do *bulk* correlacionado com o fato da temperatura crítica ser maior para este valor de campo. À medida que o valor de h aumenta chegando até o seu máximo ($h = 1,0$) percebe-se que a largura do parâmetro de ordem diminui conforme esperado. Repare que a posição da transição de fase está limitada a uma pequena região da amostra. É importante ressaltar que não ocorre nucleação do parâmetro de ordem na borda, uma vez que o *bulk* é infinito e portanto, as bordas são inexistentes.

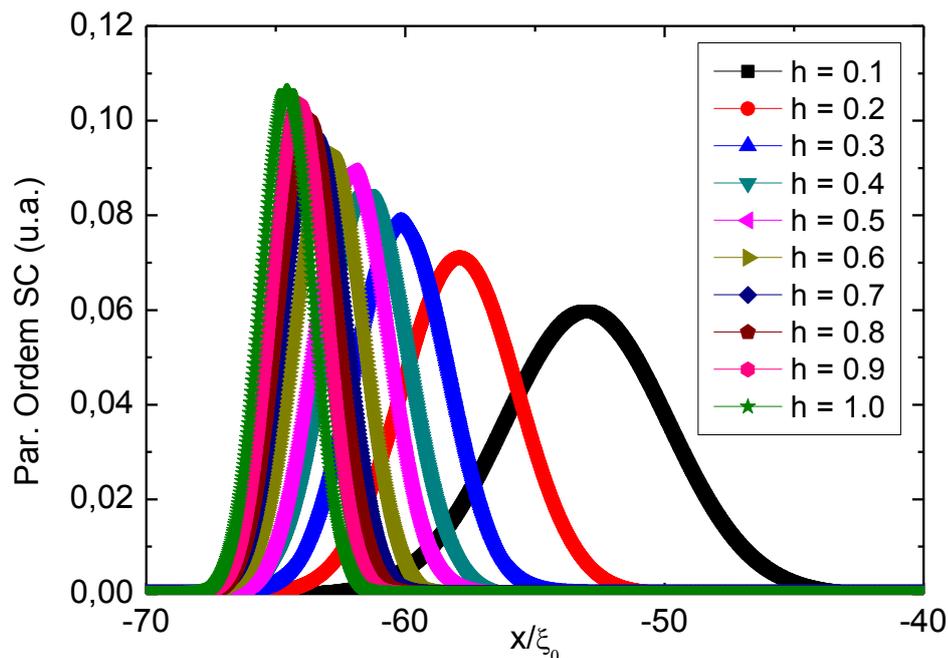


Figura 4.3: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem com condições de borda periódicas

4.1.2. Condições de borda de Ginzburg–Landau. Nucleação na superfície e terceiro campo crítico

As condições de borda de GL levam em consideração o fato de que não existe fluxo de corrente através da superfície [1]. Em essência, condições de borda deste tipo de alguma maneira introduzem no problema os possíveis efeitos de tamanho finito da amostra. Para este fim a nucleação na amostra é esperada acontecer em H_{c3} , o chamado terceiro campo crítico. As condições de borda na equação de GL podem ser escritas como:

$$\left(-i\nabla - \frac{2\pi A}{\Phi_0}\right)\psi(x,y)\Big|_{\mathbf{n}} = 0 \quad (4.9)$$

Na expressão anterior \mathbf{n} representa um vetor normal à superfície. Estas condições devem ser adaptadas ao nosso caso em particular em que a amostra tem a geometria destacada na Figura (4.1), ou seja, um filme retangular com espessura D (muito menor que todos os outros comprimentos relevantes ao problema), infinita na dimensão lateral e com comprimento finito $2L$ na direção x .

$$\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|_{-D/2} = \frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|_{D/2} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{-L} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{L} = 0 \quad (4.10)$$

Usando também as condições de calibre London, as condições de borda são transformadas em:

$$\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{-L} = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{L} = 0 \quad (4.11)$$

As condições (4.10) referentes ao eixo z não inserem nenhuma mudança significativa do ponto de vista físico no problema, uma vez que o campo magnético e o parâmetro de ordem são constantes ao longo deste eixo. Já as condições (4.11) modificam a matriz da Hamiltoniana efetiva conforme discutida no capítulo 3. Os mesmos cálculos (para os mesmos valores de h) foram repetidos, porém desta vez introduzindo as condições de borda (4.11). O algoritmo discutido anteriormente foi

executado para encontrar os autovalores menores para os diferentes valores do parâmetro x_0 . Nesta situação e dada à simetria das condições de borda em $-L$ e em L existe uma degenerescência, pois dois valores simétricos de x_0 devem fornecer o mesmo mínimo autovalor. Fisicamente isto significa a nucleação simultânea do parâmetro de ordem supercondutor nas duas bordas. Um exemplo disto pode ser observado na Figura 4.4 que mostra como o mínimo autovalor em função do parâmetro x_0 . Repare o surgimento de dois mínimos simétricos correspondentes às duas nucleações do parâmetro de ordem supercondutor em cada borda.

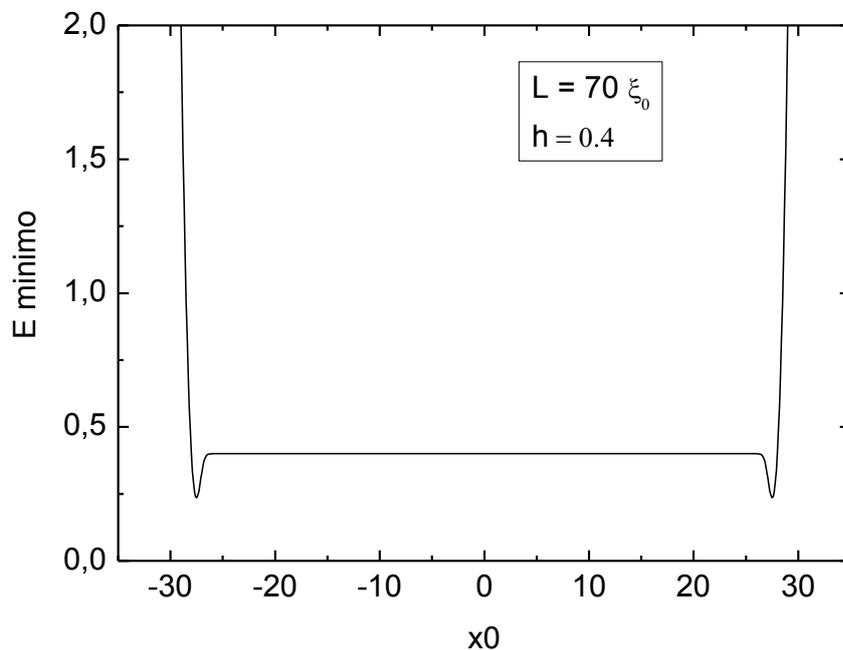


Figura 4.4: Dependência dos autovalores como função do parâmetro x_0 para o sistema com $L = 70 \xi_0$ e $h = 0,1$ e condições de borda GL.

A tabela 4.2 mostra os resultados obtidos para os autovalores e as temperaturas críticas para cada valor de h .

Tabela 4.2: Resultados obtidos pelo MATLAB com condições de bordas de Ginzburg-Landau

$h = B/B_{c2}(0)$	x_0	$(1 - t)$	$t = T_c/T_{c0}$	$R = h/(1 - t)$
0,1	-6,76	0,0590	0,9410	1,6949
0,2	-13,66	0,1180	0,8820	1,6949
0,3	-20,58	0,1770	0,8230	1,6949
0,4	-27,51	0,2361	0,7639	1,6942
0,5	-34,46	0,2951	0,7049	1,6943
0,6	-41,40	0,3541	0,6459	1,6944
0,7	-48,36	0,4131	0,5869	1,6945
0,8	-55,31	0,4721	0,5279	1,6946
0,9	-62,27	0,5311	0,4689	1,6946
1,0	-69,23	0,5901	0,4099	1,6946

Com a mesma análise teórica feita na seção anterior, a conclusão alcançada fundamenta-se na igualdade entre h e o autovalor $(1 - t)$. Mas o resultado obtido não condiz com esta igualdade. Mais uma vez, a análise da tabela será iniciada com o caso $h = 0,1$. Para esta situação obtém-se a mesma equação $-f''(x') + (0,1x' - x_0)^2 f(x') = (1 - t)f(x')$, contudo o autovalor obtido é $(1 - t) = 0,0590$ e a razão $R = h/(1 - t)$ é 1,6949. Repare que existe um padrão no valor de R para todos os valores de h e esta razão $R = h/(1 - t)$ tem uma importante relevância.

Considerando uma temperatura fixa T , a nucleação acontece em um campo h específico que chamaremos de h_N . Levando em consideração que $h_{NUC} = B_{NUC}/B_{c2}(0)$ pode-se escrever então $(B_{NUC}/B_{c2}(0))/(1 - t) \approx 1,695$. Esta última expressão significa $B_{NUC} \approx 1,695 B_{c2}(T)$, ou seja, conclui-se que B_{NUC} corresponde ao terceiro campo crítico B_{c3} como esperado! [1] Isto garante a validação do método de diferenças finitas com as condições de borda GL que levam em consideração as bordas no material, já que o campo crítico B_{c3} representa a nucleação do parâmetro de ordem na borda.

Todos os valores de h demonstram uma nucleação na região da borda da amostra, de acordo com as curvas do gráfico (4.4). A desigualdade entre as curvas deve-se ao local da nucleação, as curvas mais espalhadas indicam uma região maior na

ocorrência do parâmetro de ordem. Em contrapartida, as curvas mais estreitas indicam uma região mais restrita, neste caso a borda da amostra. Portanto, as condições de bordas periódicas apresentam um modelo de tamanho infinito e nucleação na região mais favorável energeticamente. As condições de bordas normais GL apresentam um modelo finito com a condição de contorno na própria borda $[(df/dx) = 0]$, garantindo o surgimento da nucleação na região da borda da amostra. A condição de contorno de GL (derivada igual a zero na borda) garante que não há densidade de corrente do filme supercondutor para fora da borda.

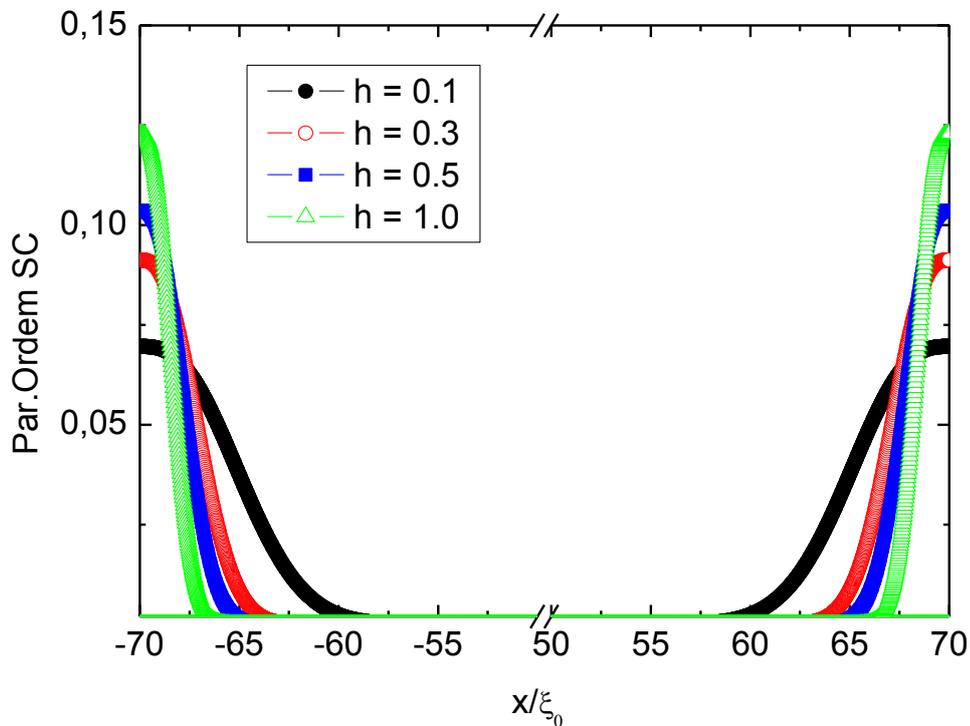


Figura 4.5: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem com condições normais de borda

4.2. Estrutura magnética com magnetização *steplike*

Outro problema estudado nesta dissertação corresponde a um sistema híbrido S/F em que a camada ferromagnética apresenta uma estrutura chamada de magnetização *steplike* [12]. O sistema híbrido planar é composto de uma camada supercondutora de espessura muito fina ($D_S \ll \lambda$) depositada sobre uma camada ferromagnética com uma magnetização uniaxial perpendicular ao plano, além de possuir uma espessura muito maior do que aquela da camada supercondutora ($D_M \gg D_S$). A estrutura de domínio na camada magnética é formada por dois

domínios cujos tamanhos são menores do que a espessura da camada magnética ($w \ll D_M$). Os domínios magnéticos apresentam magnetização na mesma direção, porém em sentidos opostos, sendo que a largura da parede de domínio é desconsiderada neste estudo assim como também o efeito de proximidade. A Figura 4.5 mostra esquematicamente o sistema proposto para estudo aqui. No presente caso são considerados somente dois domínios..

Antes de abordar este problema deve-se observar que as configurações consideradas no parágrafo acima são viáveis de serem obtidas experimentalmente. Por exemplo, Yang e colaboradores [91] estudaram experimentalmente o sistema NbBaFe₁₂O₁₉, onde o sistema ferromagnético (monocristal) apresenta uma magnetização para fora do plano com espessura da camada magnética $D_M \approx 90\mu m$ e tamanho de domínio $w \approx 2\mu m$. Repare que o tamanho de domínio é muito maior que o comprimento de coerência do sistema supercondutor (tipo II) usado neste experimento ($\xi_0 \approx 10nm$).

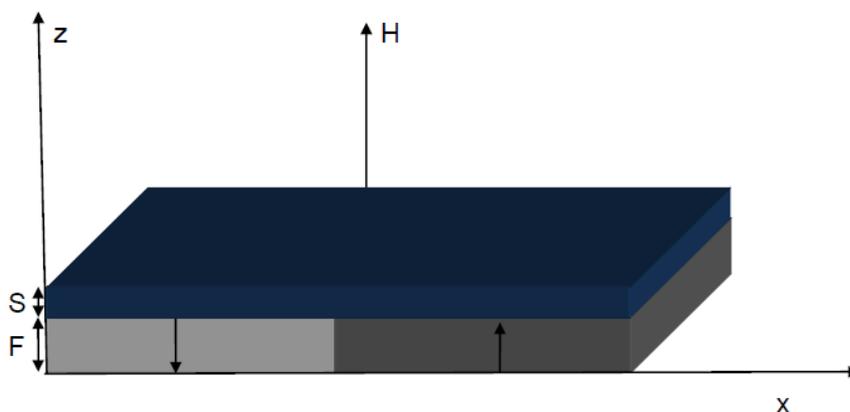


Figura 4.6. Sistema híbrido bicamada S/F com o ferromagneto apresentando uma estrutura *steplike*

Esta situação foi tratada por A. Yu. Aladyshkin e colaboradores em uma série de trabalhos publicados recentemente [12,92-94] e por este motivo a estrutura magnética é identificada como magnetização *steplike* nesta dissertação. Conforme destacado pelos autores, a relevância destes estudos está em que sistemas híbridos deste tipo representam uma tentativa viável do ponto de vista experimental para controlar, ou até manipular, o fenômeno da nucleação da supercondutividade [93]. De fato, atualmente existem resultados na literatura de sistemas híbridos com

características e parâmetros similares em configuração aos considerados nesta seção conforme discutido no parágrafo anterior. Não obstante, os trabalhos citados nesta dissertação não abordaram a possibilidade de nucleação nas bordas do sistema em estudo, conforme destacado em [91]. Por este motivo este caso específico foi incluído como um ponto a ser abordado durante este trabalho.

4.2.1. Nucleação da supercondutividade para uma estrutura magnética *steplike*

Na estrutura *steplike* considera-se que a camada magnética produz uma magnetização uniaxial ao longo do eixo z da forma $M_z(x) = M_0 \operatorname{sgn}(x)$. O tamanho da amostra na dimensão lateral é suposto infinito inicialmente. Considerando um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo z , o potencial vetor magnético no calibre de London é expresso por $\mathbf{A} = (Bx + B_0|x|) \mathbf{y}$, ou seja, o potencial magnético tem só componente na direção y e depende da variável x . Com esta configuração do potencial magnético, começa-se a incluir a ideia de domínio magnético, uma vez que parte da amostra tem componente da magnetização ao longo do eixo z positiva e a outra, negativa.

A solução procurada é expressa pela equação (4.6) decorrente da equação de Ginzburg-Landau linearizada (4.2). Substitui-se o potencial magnético *steplike* na equação (4.5) a fim de encontrar uma equação equivalente à equação (4.6), logo:

$$-\xi_0^2 f''(x) + \left(\xi_0 k - \xi_0 \frac{2\pi A_y}{\phi_0} \right)^2 f(x) = (1 - t)f(x)$$

Com a mudança de variável $(x', y', z') = \left(\frac{x}{\xi}, \frac{y}{\xi}, \frac{z}{\xi} \right)$, $x_0 = \xi_0 k$ e $A'_y = \xi_0 \frac{2\pi A}{\phi_0}$, obtém-se a equação:

$$-f''(x') + (x_0 - A'_y)^2 f(x') = (1 - t)f(x') \quad (4.12)$$

A componente A'_y do potencial magnético equivale a $Bx + B_0|x|$, e com isso $A'_y = \frac{\xi_0^2 2\pi}{\phi_0} (Bx' + B_0|x'|)$. Ao substituir A'_y em (4.6), chega-se à equação:

$$-f''(x') + \left(\frac{2\pi\xi_0^2}{\phi_0} Bx' + \frac{2\pi\xi_0^2}{\phi_0} B_0|x'| - x_0 \right)^2 f(x') = (1-t)f(x') \quad (4.13)$$

Definindo $B_{c2}(0) = \phi_0/2\pi \xi_0^2$, $h = B/B_0$, $h_0 = B_0/B_{c2}(0)$ e substituindo em (4.13):

$$\begin{aligned} -f''(x') + \left[\frac{B_0}{B_{c2}(0)} \left(\frac{B}{B_0} x' + |x'| \right) - x_0 \right]^2 f(x') &= (1-t)f(x') \\ -f''(x') + [h_0(hx' + |x'|) - x_0]^2 f(x') &= (1-t)f(x') \end{aligned} \quad (4.14)$$

4.2.2. Solução analítica do problema

O fenômeno da nucleação na estrutura *steplike* e a solução de (4.14) foram resolvidos analiticamente em [17]. De fato, o potencial da equação (4.14) é simétrico, $V(x') = V(-x')$ no caso em que $h = 0$ e o problema de autovalor é resolvido apenas para $x > 0$ com condições normais de contorno ($f'_k(x = 0) = 0$) e $f_k(x = \infty) = 0$. Para este caso específico, a energia mínima corresponde a $x_0^2 = E_{min} = 0,59010$. As funções de Weber [12] foram usadas com a finalidade de resolver analiticamente a equação (4.14). Para a situação em que $h \neq 0$ ocorre uma quebra de simetria do potencial $V(x)$ e, conseqüentemente, a nucleação da supercondutividade na parede entre domínios pode desaparecer com o campo. Como o potencial diverge em $|x| \rightarrow \infty$, *Aladyshkin and Moshchalkov* [12] usaram a condição de contorno $f(|x| \rightarrow \infty) = 0$ procurando uma possível localização do núcleo supercondutor de (4.14). Contudo, os autores não levaram em consideração uma possível influência dos efeitos causados pelas dimensões da amostra ao longo da direção x , em outras palavras, uma provável nucleação supercondutora da borda não foi levada em conta.

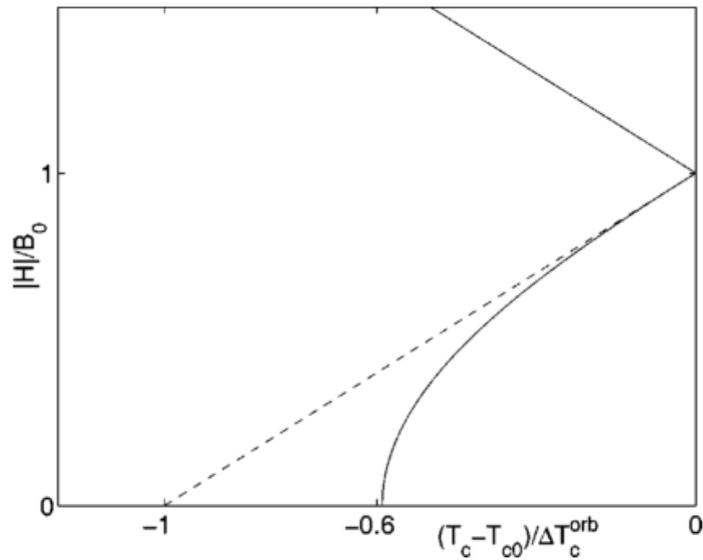


Figura 4.7: A linha pontilhada mostra o resultado para a nucleação na parede do domínio enquanto a linha sólida representa os resultados clássicos

A Figura 4.7 mostra a dependência da temperatura crítica com o campo magnético normalizada por um fator ΔT_c^{orb} [12]. Logo, como um primeiro ponto, estes resultados foram reproduzidos neste trabalho com o propósito de mostrar uma curva de T_c/T_{c0} em função do campo externo aplicado, mais viável de ser comparados com resultados experimentais. O software *Mathematica* foi utilizado como ferramenta para encontrar estes cálculos numéricos.

Primeiramente foi encontrado as soluções da equação diferencial em ambos os lados da fronteira em $x = 0$. Por exemplo, no caso em que $x > 0$, tem-se a seguinte solução.

$$\begin{aligned}
 & \text{DSolve}[-y''[x] + (L - s \star (h + 1) \star x)^2 \star y[x] - e \star y[x] == 0, y, x] \\
 & \left\{ \left\{ y \rightarrow \text{Function} \left[\{x\}, C[2] \text{ParabolicCylinderD} \left[\frac{-e - s - hs}{2(1+h)s}, \frac{\sqrt{2} L}{\sqrt{1+h} \sqrt{s}} + \sqrt{2} \sqrt{1+h} \sqrt{s} x \right] \right. \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. \left. + C[1] \text{ParabolicCylinderD} \left[\frac{e - s - hs}{2(1+h)s}, -\frac{\sqrt{2} L}{\sqrt{1+h} \sqrt{s}} + \sqrt{2} \sqrt{1+h} \sqrt{s} x \right] \right] \right\} \right\}
 \end{aligned}$$

Com uma condição de contorno apropriada ($f(|x| \rightarrow \infty) = 0$) a primeira solução pode ser eliminada. A solução da parte em que $x < 0$ é encontrada de forma similar. Sendo assim, chega-se à seguinte solução:

$$\text{solesquerda}[e, s, h, x_0, x] := \begin{cases} \text{ParabolicCylinderD}\left[\frac{-1+e+h}{2(1-h)}, -\sqrt{2} \sqrt{1-h} x - \frac{\sqrt{2} x_0}{\sqrt{1-h}}\right] & h < 1 \\ h e^{x \sqrt{-e+x_0^2}} & h = 1 \\ \text{ParabolicCylinderD}\left[\frac{1+e-h}{2(-1+h)}, -\sqrt{2} \sqrt{-1+h} x - \frac{\sqrt{2} x_0}{\sqrt{-1+h}}\right] & h > 1 \end{cases}$$

$$\text{soldireita}[e, s, h, x_0, x] := \text{ParabolicCylinderD}\left[\frac{-(1+h)+e}{2(1+h)}, \sqrt{2} \sqrt{1+h} x - \frac{\sqrt{2} x_0}{\sqrt{1+h}}\right];$$

Nas equações descritas acima, as constantes numéricas não foram indicadas. Deve-se destacar que *solesquerda* e *soldireita* representam as soluções da equação (4.14) com as condições $f(|x| \rightarrow \infty) = 0$ e com as respectivas equivalências; $s \leftrightarrow h_0$; $e \leftrightarrow (1 - t)$. Finalmente usando a condição de continuidade da função e na sua primeira derivada em $x = 0$ obtém-se,

$$\text{solesquerda}[e, s, h, x_0, 0] = \text{soldireita}[e, s, h, x_0, 0]$$

$$\frac{d}{dt}(\text{solesquerda}[e, s, h, x_0, 0]) = \frac{d}{dt}(\text{soldireita}[e, s, h, x_0, 0]) \quad (4.15)$$

Este procedimento elimina as constantes numéricas e permite que as duas equações sejam resolvidas simultaneamente. Para isso, foi fixado inicialmente o parâmetro $s = h_0 = 0,1$. Então um ciclo foi realizado de forma que para cada valor de campo magnético h , diferentes valores de x_0 foram testados procurando-se sempre o menor autovalor possível dentre todas as soluções acima. Posteriormente dentro de todas essas soluções foi achado o menor valor de e , ou seja, a maior temperatura crítica para o valor de campo h . O algoritmo construído para encontrar estes valores é mostrado a seguir.

```

Emin = {};
t0min = {};
hmin = 0;
hmax = 1.782;
steph = 0.054;
autoval = {};
Do[ valores = {};
  Do[ ev = 0;
    ec = 0;
    vl = e /. Quiet[FindRoot[solesquerda[e, h, 0.1, t0, 0] == 0, {e, 0}]];
    While[(((f1[ev, h, 0.1, t0, 0] > f3[ev, h, 0.1, t0, 0]) && (ev ≤ 1)),
      ec = ev;
      ev = ev + 0.001;
      If[ev >= vl, Break[]];
      (*Print[ec];*)
      If[ec < 0.98, valores = Append[valores, {t0, e /. Quiet[FindRoot[
        f1[e, h, 0.1, t0, 0] == f3[e, h, 0.1, t0, 0], {e, ec}]]}],
        {t0, 0, 1.0, 0.001}];
      minimoE = Quiet[Min[valores[[All, 2]]]];
      Print[h];
      autoval = Append[autoval, {h, valores[[Position[valores[[All, 2]], minimoE][[1, 1]], 1]], minimoE}],
        {h, hmin, hmax, steph}];
  Export["dados.dat", autoval];

```

A última sequência foi desenvolvida de modo a evitar um resultado falso do comando *FindRoot* do *Mathematica*, uma vez que o resultado depende do valor inicial usado neste comando para encontrar a solução numérica de uma equação. A Figura 4.8 mostra os resultados obtidos para $s = h_0 = 0,1$.

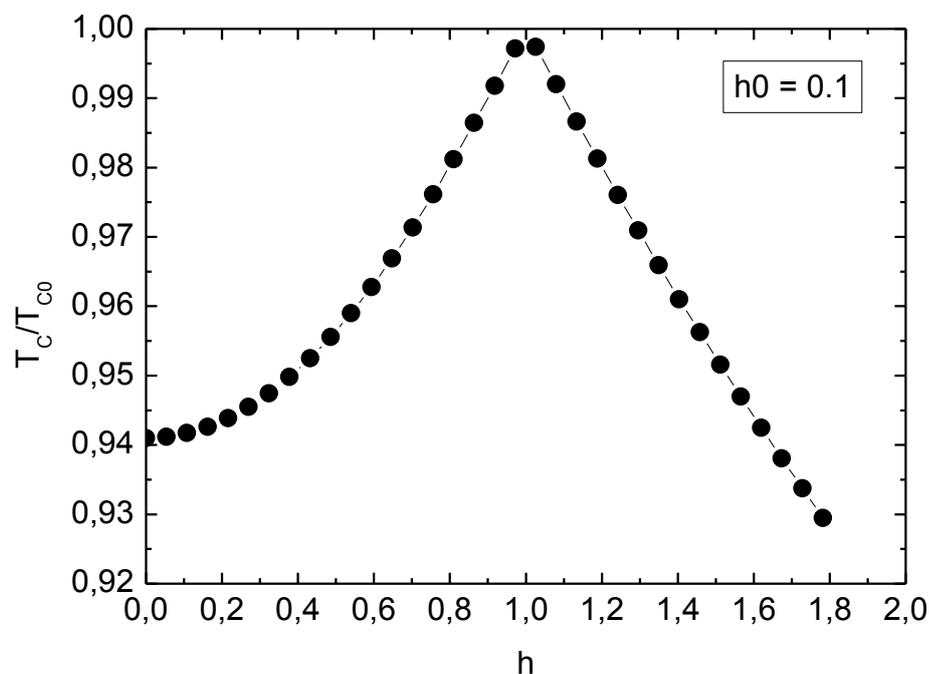


Figura 4.8: Curva T_c/T_{c0} em função de h para um sistema híbrido S/F com magnetização steplike considerando a amostra infinita.

Comparando a Figura (4.8) com a Figura (4.7), observa-se que em ambos gráficos percebeu-se o acréscimo da temperatura crítica com o campo aplicado, regime chamado na referência [12] como *domain wall superconductivity*. Neste caso (Figura 4.8) os dados numéricos foram transformados em uma relação de $T_c(B)$. A maior temperatura crítica T_c está em torno de $h = 1$. O valor encontrado em $h = 0$ reproduz o resultado encontrado pelos autores na referência [12] para $h = 0$.

4.2.3. Efeitos de tamanho finito na solução do problema *steplike*

A equação (4.14) representa a nucleação do parâmetro de ordem supercondutor para um sistema híbrido bicamada simples, formado por uma camada supercondutora muito fina a qual experimenta uma estrutura magnética do tipo *steplike* devida à camada magnética. Este problema tem uma solução analítica mostrada no item 4.2.2 em que é considerado o limite $f(|x| \rightarrow \infty) = 0$. Neste ponto o procedimento adotado foi estudar o mesmo problema no limite mesoscópico, ou seja, quando as dimensões das amostras são da ordem dos comprimentos relevantes ao problema. Nesta situação as condições de borda na forma usual de Ginzburg-Landau eq. (4.9) devem ser usadas.

A equação (4.14) representa uma equação tipo Schroedinger em uma dimensão com potencial efetivo dado por $V(x') = hx' + h_0|x'| - x_0$. Nesta analogia a energia do sistema é dada por $(1 - t)$. Esta equação deve ser solucionada utilizando as condições de borda apropriadas ao problema $[(i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})\psi]\mathbf{n} = 0$. Condições esta que podem ser simplificadas quando aplicadas a uma camada supercondutora com espessura fina D , tamanho $2L$ ao longo do eixo x e dentro da escolha de calibre de London $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_{-D/2} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_{D/2} = 0 \quad (4.16)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{-L} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_L = 0 \quad (4.17)$$

Desconsiderando um parâmetro de ordem com variações ao longo do eixo z as equações (4.16) são automaticamente satisfeitas. Logo, são as condições (4.17) as relevantes ao problema. Este problema deve ser resolvido de forma que para um h fixo deve-se encontrar a mínima energia $(1 - t)$ no qual corresponde a um valor específico do parâmetro x_0 . Este problema foi abordado usando o método numérico de diferenças finitas (mais exatamente a diferença centrada) e implementado através de um algoritmo construído no MATLAB. Deve ser notado que o uso deste método numérico transforma a equação tipo Schroedinger (4.14) em um problema de autovalores e autovetores $H(x_0, h, h_0)f(x) = Ef(x)$ em que as condições de borda apropriadas podem ser incluídas dentro da matriz $H(x_0, h, h_0)$. Posteriormente fixam-se h e h_0 procurando para diferentes valores de x_0 o mínimo autovalor. Este o mesmo procedimento realizado na seção 4.1 para outra situação. O comando “*eigs*” do MATLAB resolve esta situação e fornece também os autovetores para um autovalor específico.

A Figura 4.9 mostra a solução pelo método de diferenças finitas da equação (4.14) usando as condições de borda (4.17) e com parâmetros $L = 70\xi_0$ e $h_0 = 0,1$. Na mesma figura foram incorporados os dados da Figura 4.8 que diz respeito das nucleações da supercondutividade (cálculos analíticos com as condições $f(|x| \rightarrow \infty) = 0$) para diferentes campos (mesmos valores em ambos conjuntos de dados) e para o mesmo valor $h_0 = 0,1$. Ou seja, a única diferença está no fato de que numa situação em particular os efeitos do tamanho da amostra foram levados em consideração enquanto na outra não.

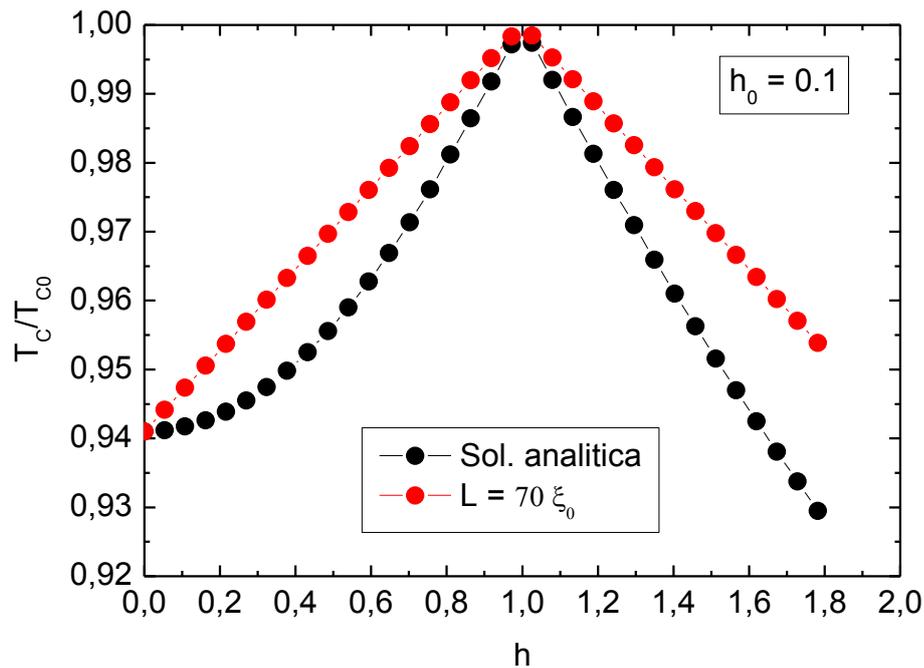


Figura 4.9: Dependência de T_c/T_{c0} com o campo magnético para uma estrutura magnética *steplike*, resolvida pelo método analítico e numérico.

A solução analítica na Figura 4.9 corresponde à curva de T_c/T_{c0} em função de h de um modelo de sistema híbrido infinito com magnetização *steplike*. Logo, pode-se concluir que o comportamento qualitativo reentrante de $T_c/T_{c0} = f(h)$ é o mesmo para valores de campos $h \leq 1$, enquanto que para valores superiores do campo magnético a temperatura crítica decai com o campo. A comparação entre as curvas mostra que para um valor de campo fixo a temperatura crítica da amostra com tamanho finito é sempre maior do que a amostra considerada infinita [12]. É importante ressaltar que para a comparação da Figura 4.9 foi estudada um modelo com $L = 70\xi_0$ com um modelo infinito porque nesta configuração de tamanho o computador usado nos cálculos consegue calcular os autovalores em um tempo razoável, de fato que, valores maiores de L requer um gasto de memória acima das possibilidades computacionais disponíveis no momento. Para compreender qualitativamente este comportamento a próxima figura auxilia no entendimento.

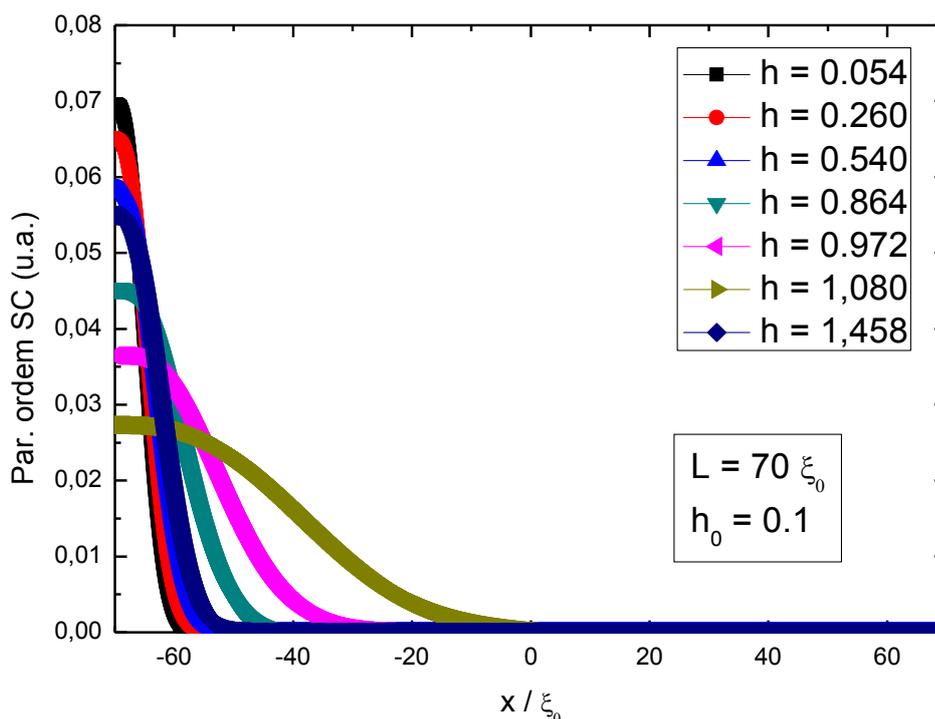


Figura 4.10: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem em uma magnetização *steplike* para um modelo com tamanho finito $L = 70\xi_0$

A Figura 4.10 mostra a nucleação do parâmetro de ordem supercondutor, ou seja, o autovetor correspondente ao menor autovalor (T_c/T_{c0}) encontrado no algoritmo para amostra com $L = 70\xi_0$. Repare que na Figura 4.10 existe uma tendência do parâmetro de ordem nuclear em uma única borda do modelo. Na seção 4.2.2 foi estudada a situação em que não tinha a presença dos domínios magnéticos, e deste modo a nucleação ocorria nas duas bordas. Nesta seção, a inclusão dos domínios magnéticos apresentou uma alteração na localização do núcleo supercondutor fazendo com que o núcleo surja na borda do domínio cuja magnetização é oposta ao campo magnético aplicado, ou seja, se o campo aplicado for para cima, o núcleo surgirá na borda no qual a magnetização é apontada para baixo, como foi considerado nesta dissertação. Isto garante que o campo efetivo (soma do campo magnético aplicado com o campo magnético produzido pela magnetização do domínio ferromagnético) na borda do modelo seja o menor possível e, portanto, o aparecimento do núcleo supercondutor.

Conforme mostrado na seção 4.2 este efeito levaria a um aumento da temperatura crítica do sistema em comparação com a T_c correspondente ao mesmo campo

externo aplicado, porém com nucleação num modelo *bulk* (infinito). Logo em princípio para campos maiores, este efeito deveria provocar a discordância observada na dependência $T_c/T_{c0} = f(h)$ mostrada na Figura 4.9. Também tem de se notar que a nucleação acontece na borda onde o valor do campo resultante é menor.

Após o estudo anterior o próximo passo consiste em verificar como varia a dependência de T_c/T_{c0} em função do campo magnético para sistemas com diferentes dimensões são longo do eixo x . Para este fim os mesmos cálculos como descrito acima foram estendidos para outros valores do parâmetro L . Estes resultados aparecem resumidos na Figura 4.11.

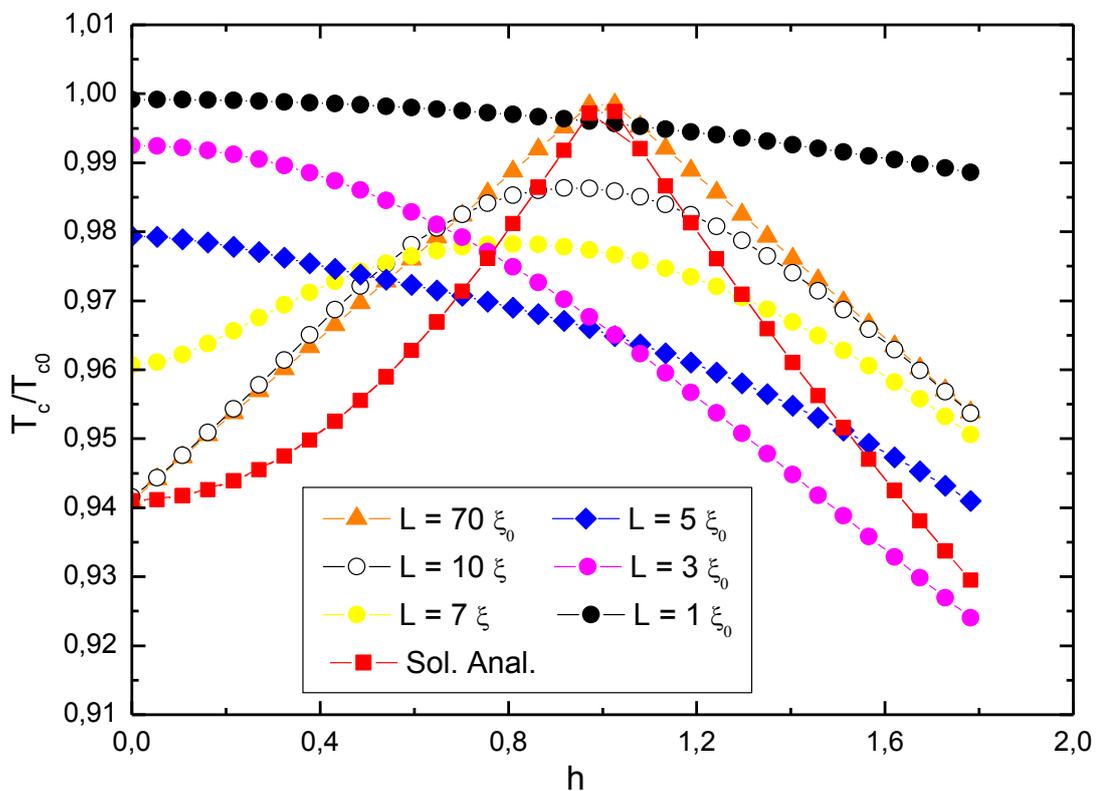


Figura 4.11: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem em uma magnetização *steplike* para amostras com tamanhos diferentes.

Observa-se que o comportamento visto na Figura 4.10 de reentrada da supercondutividade com o campo não se verifica para qualquer comprimento. Nota-se na Figura 4.11 que até valores do parâmetro L abaixo de entorno $7\xi_0$ a temperatura crítica diminui com o campo magnético, porém não na forma linear

clássica esperada. Só para valores acima desse limiar aparece o comportamento reentrante da supercondutividade, sendo que o comportamento se aproxima daquele obtido de forma analítica com parâmetro de ordem localizado conforme o tamanho do sistema é aumentado.

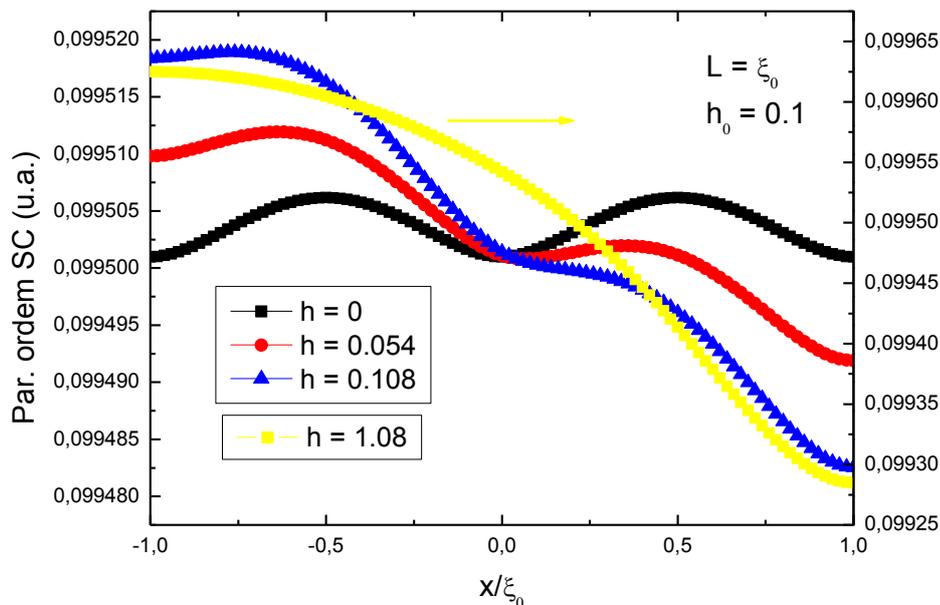


Figura 4.12: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem em uma magnetização *steplike* para amostra com $L = \xi_0$.

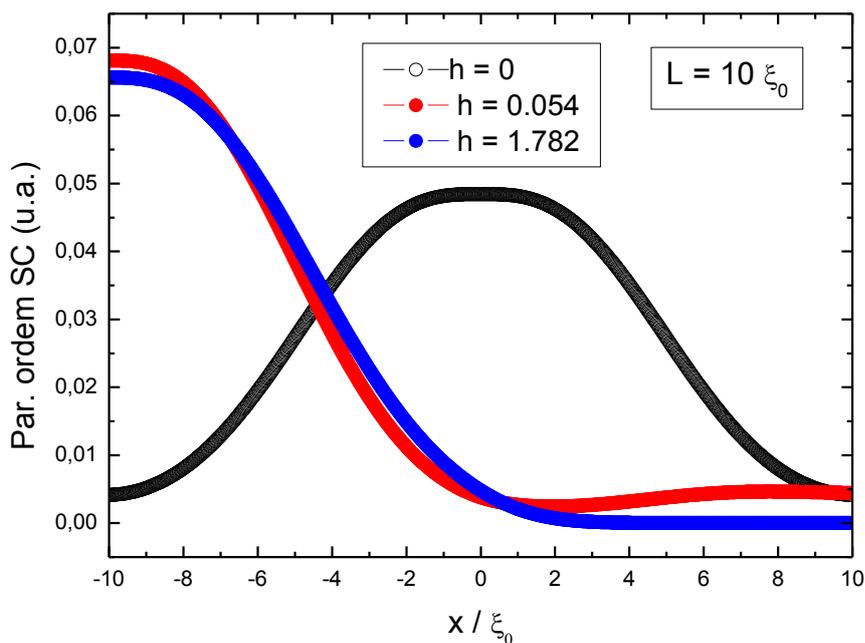


Figura 4.13: Nucleação supercondutora do parâmetro de ordem em uma magnetização *steplike* para amostra com $L = 10\xi_0$.

O fenômeno da nucleação supercondutora depende das dimensões da amostra conforme esperado. Nas Figuras 4.12 e 4.13 são mostradas nucleações para alguns campos selecionados e para amostras com duas dimensões $L = \xi_0$ e $L = 10\xi_0$ respectivamente. Os campos selecionados ilustram o comportamento qualitativo do sistema. De acordo com a Figura 4.12, para dimensões pequenas a nucleação do parâmetro de ordem supercondutor não sofreu uma variação significativa do local de seu surgimento, podendo afirmar que a nucleação ocorre de forma mais homogênea.

Já a Figura 4.13 mostra que para o campo nulo a tendência é que apareça um núcleo no centro do modelo supercondutor. Valores maiores de campo leva a nucleação para a borda da amostra. A localização de um núcleo supercondutor bem definido na amostra para campos pequenos e supercondutividade superficial na borda para campos maiores começa a padronizar conforme as dimensões da amostra são aumentadas, como observado na Figura 4.10.

4.2.4. Magnetização *steplike* com largura da parede entre domínios

Até o momento a parede do domínio foi considerada muito fina a ponto de não interferir na nucleação supercondutora. Nesta seção a espessura da parede do domínio interfere no campo magnético sendo que, ao passar de um domínio para o adjacente, o campo magnético vai mudando o seu valor gradativamente. No caso em que a parede tem dimensões desprezíveis, o campo magnético mudava a sua direção repentinamente de um domínio para o outro. Na região dentro do domínio ferromagnético, o potencial vetor em questão assume a forma (4.19), já no caso em que o campo magnético varia no interior da parede entre domínios, o potencial vetor assume a forma (4.18). A Figura 4.14 ilustra a situação descrita em que o filme ferromagnético possui uma parede de espessura a separando um domínio de outro.

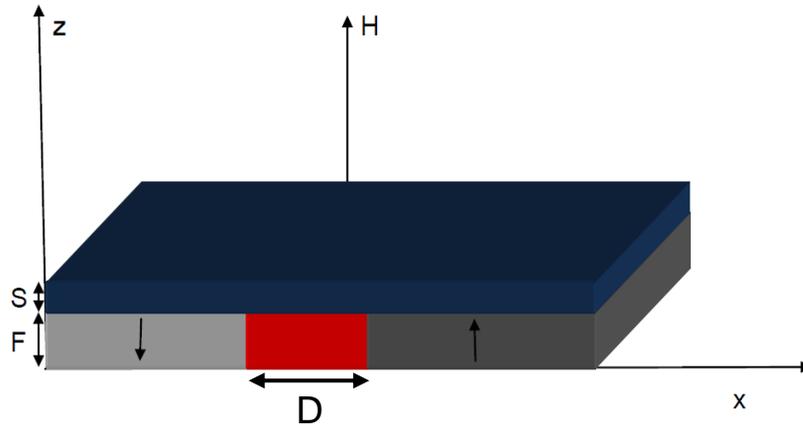


Figura 4.14: Filme supercondutor ferromagnético com parede de domínio de espessura a . No texto o parâmetro a é identificado por D .

$$A_y = \left(Bx + B_0 \frac{x^2}{D} \right); \quad |x| \leq \frac{D}{2} \quad (4.18)$$

$$A_y = (Bx + B_0|x| - B_0D/4); \quad |x| \geq \frac{D}{2} \quad (4.19)$$

A Figura 4.15 mostra o potencial magnético e o campo magnético correspondente $\mathbf{B} = \nabla_x \mathbf{A}$ na aproximação de calibre de London sem considerar campo magnético externo. Deve-se destacar que o potencial escolhido representa uma aproximação muito simples para uma situação bem complexa como a tratada aqui. No obstante o objetivo é verificar como a nucleação supercondutora pode mudar em função da largura da parede entre domínios, pelo menos qualitativamente.

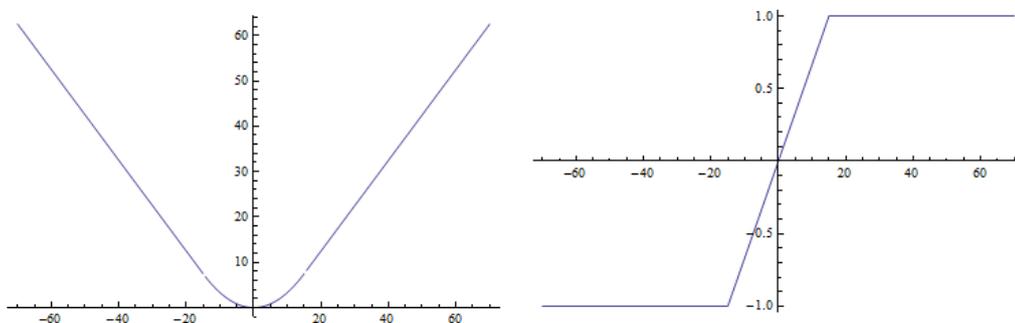


Figura 4.15. Potencial magnético e campo magnético para um estrutura *steplike* com largura de parede entre domínios.

Seguindo o procedimento repetido nas seções anteriores chega-se às seguintes equações

$$-f'' + \left[h_0 \left(hx' + \frac{x'^2}{D'} \right) - x_0 \right]^2 f = (1 - t)f \quad (4.20)$$

$$-f'' + [h_0(hx' + |x'| - D'/4) - x_0]^2 f = (1 - t)f \quad (4.21)$$

O potencial magnético foi escolhido de forma que em $x = 0$ seja zero e contínuo nas bordas das paredes entre domínios.

4.2.5. Resultados e efeitos de tamanho finito na solução do problema *steplike* com parede entre domínios

Assim como na seção 4.2.2 em que chegou-se em uma solução analítica para o problema em questão a intenção aqui foi encontrar uma solução fechada para este problema. A equação encontrada dentro da parede de domínio foi uma equação diferencial ordinária não linear denominada equação de *Ricatti* [94]. Demandou-se muito tempo deste trabalho com o interesse de encontrar uma solução analítica para este tipo de equação e com as condições de borda apropriadas. Porém, após inúmeras tentativas em solucionar o problema de forma analítica e não obter êxito direcionou-se o problema para uma solução numérica.

Para resolver este problema pelo método de diferenças finitas seguiu-se a mesma ideia explicada no algoritmo representado pelo fluxograma da seção 4.1. De forma geral para cada valor fixo do campo aplicado $h = B/B_0$ variou-se o parâmetro x_0 em um intervalo significativo de valores. Para cada valor de x_0 foi encontrado um mínimo autovalor. Subsequentemente dentre todos os autovalores para os diferentes x_0 foi encontrado o menor deles, ou seja, a maior temperatura crítica. A Figura 4.16 mostra a dependência $T_c/T_{c0}(h)$ na região dos campos estudados e para valores de $L = 70 \xi_0$. Na Figura 4.16 foram incluídos também os resultados analíticos e numéricos para o mesmo sistema ($L = 70 \xi_0$) mostrados na Figura 4.9.

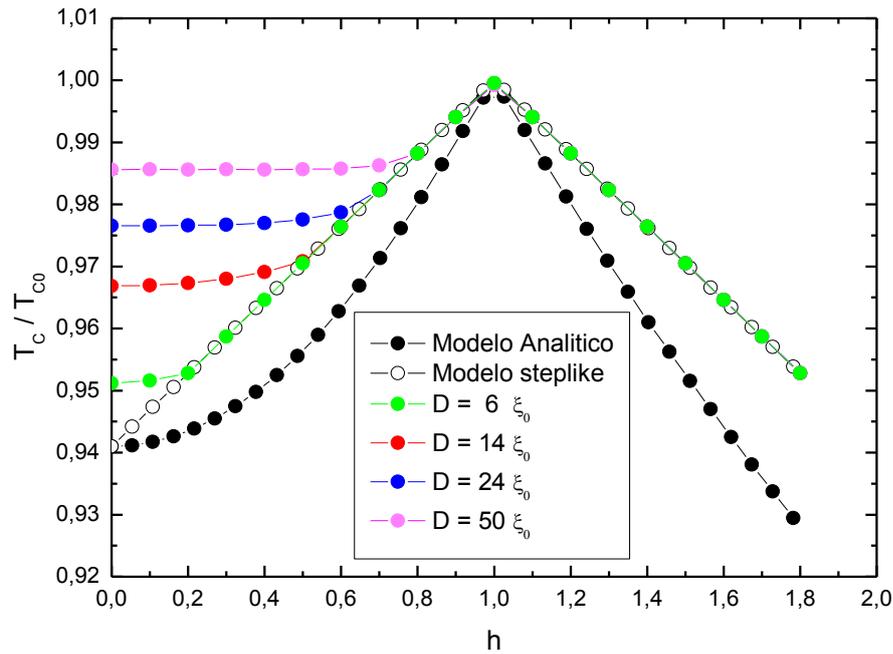


Figura 4.16: Temperatura crítica em função do campo h para diferentes espessuras da parede entre domínios

Nota-se que à medida que a espessura da parede D diminui, a dependência $t = t(h)$ começa a reproduzir os resultados obtidos para o modelo *steplike*, ou seja, quando a largura da parede entre domínios é desprezível. Para maiores valores do parâmetro D percebe-se um distanciamento do comportamento para $D \cong 0$ mostrando uma quase saturação da temperatura crítica para campos pequenos. Este comportamento de saturação para T_c/T_{c0} verificados em campos pequenos (e altos valor de D) sugere a existência de um mecanismo de nucleação diferente do padrão esperado na borda, e no qual é esperado uma dependência linear de T_c/T_{c0} em função de h .

Este comportamento pode ser entendido ao observar que sempre na parede entre domínios o campo magnético experimentado pelo supercondutor é menor que B_0 devido à sua estrutura magnética. Portanto, a princípio é possível obter uma região dentro da parede em que o campo externo aplicado anule o campo provocado pelo ferromagneto, dando lugar a um $B_{efetivo}$ nulo, e com isso a nucleação deveria acontecer nessa região. Valores de D maiores propiciam a existência destas regiões com campo efetivo quase nulo para valores maiores do campo externo aplicado. Isto explicaria porque as regiões com platôs de T_c/T_{c0} são maiores conforme D aumenta.

A Figura 4.17 mostra como ocorre a nucleação do parâmetro de ordem supercondutor para o sistema com $L = 70 \xi_0$ enfatizada pela curva vermelha na Figura 4.16. Os resultados são mostrados para alguns campos específicos. A figura foi adquirida com uma parede de largura $D = 14 \xi_0$ cuja região sombreada corresponde justamente à parede entre domínios.

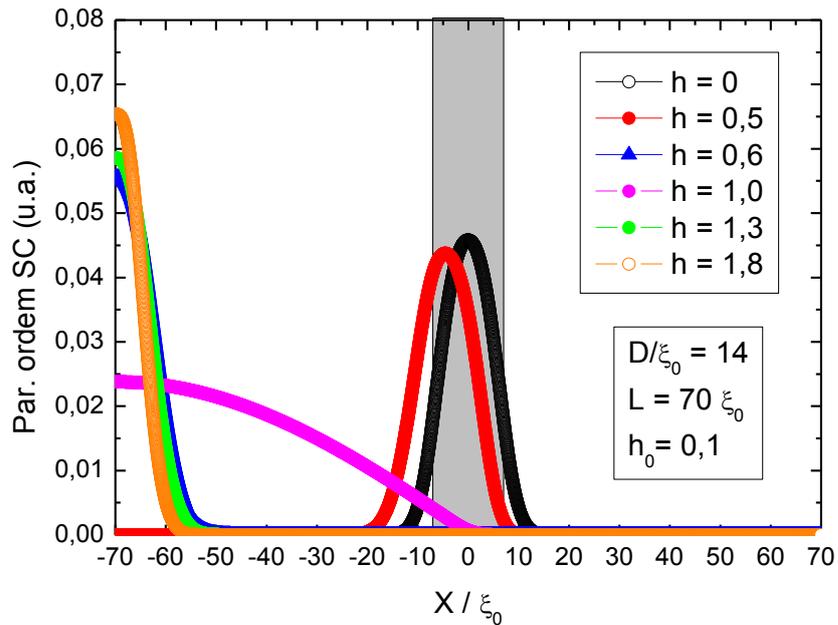


Figura 4.17: Nucleação supercondutora em um domínio ferromagnético com parede entre domínio espessa

Levando-se em consideração as direções e sentidos (ao longo do eixo z) dos campos envolvidos na situação física, o campo efetivo experimentado pelo supercondutor com espessura desprezível é a soma algébrica do campo externo com o campo devido ao ferromagneto, ou seja, $B_{efetivo} = B_{ext.} + B_{ferr.}$. Do lado esquerdo da parede existe alguma região em que o campo $B_{efetivo} \cong 0$ para $h = B/B_0 < 1$. Em princípio a nucleação deveria acontecer nesta região para campos $h < 1$ já que nas bordas da amostra o campo efetivo é diferente de zero. Entretanto, os resultados mostram que até $h = 0,5$ efetivamente acontece a nucleação dentro da parede entre domínios. No obstante, para valores de $h \geq 0,6$ a nucleação vai para a borda mesmo que o campo efetivo na borda seja diferente de zero.

4.2.6. Comparação com resultados experimentais

Uma última questão a ser destacada neste trabalho é uma comparação entre alguns dos resultados teóricos apresentados nesta dissertação e resultados experimentais na literatura sobre o tema. A nucleação na superfície de supercondutores e a existência do terceiro campo crítico B_{c3} é um tema recorrente neste trabalho e amplamente verificado na literatura. Por exemplo, a referência [107] mostra um diagrama de fases para o sistema $\text{In}(6\%)\text{Pb}$ no qual podem-se apreciar os campos críticos $B_{c1}(T)$, B_{c1} e $B_{c2}(T)$ obtidos a partir de medidas de magnetização, assim como também a dependência $B_{c3}(T)$. Outros trabalhos têm explorado resultados similares em outros sistemas supercondutores.

Por sua vez a Figura 4.18 mostra o diagrama de fases para uma bicamada $\text{Nb}/\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ [106]. As temperaturas críticas foram obtidas a partir de três diferentes critérios nas curvas $R(T)$. Pode se observar um aumento de T_c com o campo externo até um valor de aproximadamente 5,25 kOe, conforme melhor identificado no interior da figura, a qual representa um ampliação dessa região de campos. A partir desse valor de campo, T_c começa a diminuir, sendo que para campos acima de aproximadamente 6 kOe esta diminuição segue o clássico comportamento linear. Este valor de 5,25 kOe é aproximadamente igual ao campo B_0 da estrutura magnética. Este comportamento é qualitativamente semelhante aos resultados mostrados nas Figuras 4.16 e 4.9 neste trabalho.

$\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ é um ferromagneto com anisotropia uniaxial. Os autores deste trabalho atribuíram um tamanho de domínio magnético da ordem de 1,9 μm . Este valor é muito maior que o comprimento de coerência do Nióbio e como consequência a nucleação deve ser localizada bem em cima de um domínio magnético isolado e com campo B_0 da ordem $\approx 5,4$ kOe. Por este motivo os autores explicaram seus dados usando o modelo de estrutura magnética *steplike*. No entanto, os autores fizeram também uma ressalva a respeito de que a largura da parede entre domínios é da ordem de 200 nm e não deveria ser desconsiderada nas análises. Neste sentido acredita-se que os resultados analisados na seção 4.2.5 deveriam reproduzir melhor estes resultados experimentais, desde que o tamanho do sistema (parâmetro L) seja aumentado a fim de diminuir possíveis efeitos da superfície.

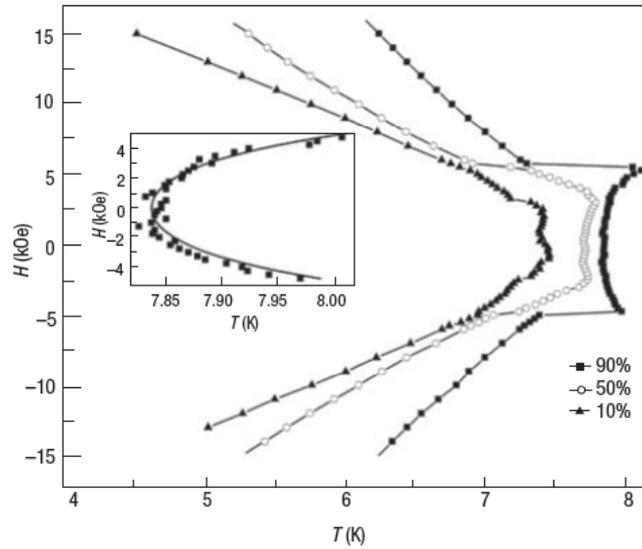


Figura 4.18: Diagrama de fases experimental do sistema híbrido Nb/BaFe₁₂O₁₉.

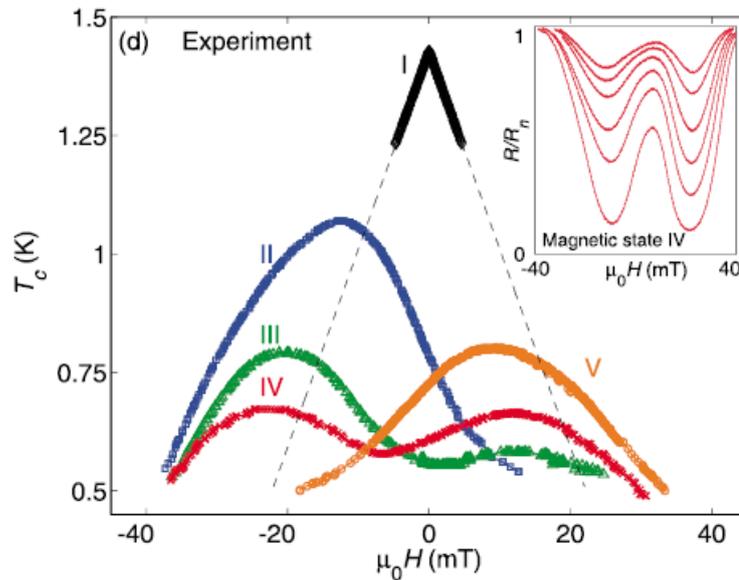


Figura 4.19. $T_c(H)$ diagrama de fase para um sistema híbrido Al/[CoPt]_n.

Todos os sistemas estudados nas referencias anteriores foram supercondutores tipo II. Também para supercondutores tipo I esta problemática pode ser verificada experimentalmente conforme mostrado na figura 4.19. A figura mostra o diagrama de fases para um sistema Al/[CoPt]₁₅ com magnetização para fora do plano. Na figura a curva preta significa ausência de domínios magnéticos e $T_c(H)$ mostra o comportamento original estudado na seção 4.1 para um filme com magnetização homogênea. Nesse caso condições de borda periódicas permitiram simular a

estrutura *bulk*. As outras curvas mostram o caráter reentrante da supercondutividade na presença de domínios magnéticos conforme discutido ao longo desta dissertação [92]. Novamente esta situação foi estudada nesta dissertação, porém incorporando os efeitos de superfície, além dos possíveis efeitos devidos à largura não desprezível da parede de domínios magnéticos.

Por último deve-se destacar que a problemática abordada nesta dissertação é muito variada e ampla, tanto teórica quanto experimentalmente. Por um lado o grande número de parâmetros dimensionais envolvidos na configuração do sistema, assim como os diferentes comprimentos característicos do sistema ($\xi(T)$, $\lambda(T)$, largura da parede entre domínios, etc.) oferece toda uma série de possibilidades para serem abordados em estudos futuros. Por exemplo, uma questão interessante poderia ser o estudo de tricamadas F/S/F com estruturas magnéticas diferentes nas camadas magnéticas adjacentes ao supercondutor.

Capítulo 5

Conclusão

As principais metas alcançadas e conclusões deste trabalho são as seguintes:

1) Foi estudado e verificado o uso da técnica de diferenças finitas para a resolução da primeira equação de Ginzburg-Landau linearizada.

- Foi estudada a nucleação supercondutora em sistemas *bulk* verificando a dependência linear esperada de T_c em função do campo magnético.
- Foi estudada a nucleação da supercondutividade na superfície ou na borda para amostras com dimensões mesoscópicas. Foi verificada a existência do terceiro campo crítico B_{c3} conforme esperado.

2) Foi estudada a nucleação da supercondutividade em um sistema S/F em que o filme magnético apresentou uma estrutura de domínios magnéticos do tipo *steplike*, conforme identificado na literatura do tema de pesquisa.

- Os resultados *analíticos* sobre a dependência $T_c(B)$ mencionados na literatura foram reproduzidos para o caso de um modelo *bulk*.
- A inclusão de dimensões nas amostras simuladas permitiu estabelecer a prioridade da nucleação supercondutora na borda do sistema para campos externos não nulos.
- Foi verificado que a prioridade do sistema de nuclear a supercondutividade inicialmente na superfície da amostra depende das dimensões do sistema simulado.
- Foram comparadas as dependências da temperatura crítica T_c em função do campo magnético externo para todos os casos abordados apontados aqui. Foi verificado que as dimensões do sistema modificam os resultados obtidos.

3) Foi estudado um sistema híbrido S/F apresentando uma estrutura magnética no filme magnético do tipo *steplike*, porém com uma largura da parede entre domínios finita. Para esta situação foi comprovado o seguinte:

- Foi verificado que a dependência $T_c(B)$ é influenciada pela largura da parede entre domínios presente no sistema, conforme a largura da parede aumenta com relação ao tamanho da amostra a dependência $T_c(B)$ se afasta mais rápido do comportamento esperado sem largura da parede.
- A nucleação do parâmetro de ordem supercondutor de fato acontece na parede para campos inferiores a certo valor, a partir do qual o sistema passa a nuclear a supercondutividade na borda.

REFERÊNCIAS

- [1] THINKHAM, M. *Introduction to superconductivity*. 2nd ed. Mineola, N.Y.: Dover Publ., 2004.
- [2] ROSE-INNES, A. C.; RHODERICK, E. H. *Introduction to superconductivity*. 2. ed. - Oxford: Pergamon, 1978.
- [3] CYROT, Michel. **Introduction to superconductivity and high-Tc materials**. World Scientific, 1992.
- [4] VAN DELFT, Dirk. History and significance of the discovery of superconductivity by Kamerlingh Onnes in 1911. **Physica C: Superconductivity**, v. 479, p. 30-35, 2012.
- [5] REZENDE, Sergio Machado. **Materiais e dispositivos eletrônicos**. Editora Livraria da Física, 2004.
- [6] H. LONDON e F. LONDON, Proc. Roy. Soc. (London) **A149**, 71 (1935); *Physica* **2**, 341 (1945)
- [7] MOURACHKINE, Andrei. **Room-temperature superconductivity**. Cambridge Int Science Publishing, 2004.
- [8] PIUMBINI, Cleiton K. *Relação entre o transporte elétrico e a estrutura de poros no sistema YBa2Cu3O7*. UFES, 2013
- [9] BARDEEN, John; COOPER, Leon N.; SCHRIEFFER, J. Robert. Microscopic theory of superconductivity. **Physical Review**, v. 106, n. 1, p. 162-164, 1957.
- [10] BARDEEN, John; COOPER, Leon N.; SCHRIEFFER, J. Robert. Theory of superconductivity. **Physical Review**, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957.
- [11] BEDNORZ, J. George; MÜLLER, K. Alex. Possible highT c superconductivity in the Ba- La- Cu- O system. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, v. 64, n. 2, p. 189-193, 1986.
- [12] ALADYSHKIN, A. Yu et al. Domain-wall superconductivity in hybrid superconductor-ferromagnet structures. **Physical Review B**, v. 68, n. 18, p. 184508, 2003.
- [13] ALADYSHKIN, A. Yu et al. Nucleation of superconductivity and vortex matter in superconductor-ferromagnet hybrids. **Superconductor Science and Technology**, v. 22, n. 5, p. 053001, 2009.
- [14] AVDEEV, M. V.; PROSHIN, Yu N. The influence of an external magnetic field on the triplet proximity effect in ferromagnet/superconductor trilayers. **Superconductor Science and Technology**, v. 27, n. 3, p. 035006, 2014.
- [15] PEREIRA, S. H.; FÉLIX, Marcelo G. 100 anos de supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 35, n. 1, p. 1313, 2013.

- [16] ANDERSON, Philip W.; ROWELL, John M. Probable observation of the Josephson superconducting tunneling effect. **Physical Review Letters**, v. 10, n. 6, p. 230, 1963.
- [17] BULAEVSKII, L. N. et al. Coexistence of superconductivity and magnetism theoretical predictions and experimental results. **Advances in Physics**, v. 34, n. 2, p. 175-261, 1985.
- [18] MESERVEY, Robert; TEDROW, P. M. Spin-polarized electron tunneling. **Physics Reports**, v. 238, n. 4, p. 173-243, 1994.
- [19] PRINZ, Gary A. Spin-Polarized Transport. **Physics Today**, v. 48, n. 4, p. 58-63, 2008.
- [20] ZHANG, Xiangdong et al. Spin-polarized tunneling and magnetoresistance in ferromagnet/insulator (semiconductor) single and double tunnel junctions subjected to an electric field. **Physical Review B**, v. 56, n. 9, p. 5484, 1997.
- [21] GOLUBOV, A. A. Interface resistance in ferromagnet/superconductor junctions. **Physica C: Superconductivity**, v. 326, p. 46-52, 1999.
- [22] GOLUBOV, Alexander; TAFURI, Francesco. Andreev reflection in layered structures: implications for high-T_c grain-boundary Josephson junctions. **Physical Review B**, v. 62, n. 22, p. 15200, 2000.
- [23] TAKAHASHI, S.; IMAMURA, H.; MAEKAWA, S. Spin imbalance and magnetoresistance in ferromagnet/superconductor/ferromagnet double tunnel junctions. **Physical review letters**, v. 82, n. 19, p. 3911, 1999.
- [24] ZHENG, Zhiming et al. Andreev reflection effect on spin-polarized transport in ferromagnet/superconductor/ferromagnet double tunnel junctions. **Physical Review B**, v. 62, n. 21, p. 14326, 2000.
- [25] MOODERA, Jagadeesh Subbaiah et al. Large magnetoresistance at room temperature in ferromagnetic thin film tunnel junctions. **Physical Review Letters**, v. 74, n. 16, p. 3273, 1995.
- [26] SILAEV, M. A. et al. The diode effect induced by domain-wall superconductivity. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 26, n. 9, p. 095702, 2014.
- [27] ALADYSHKIN, A. Yu et al. Crossover between different regimes of inhomogeneous superconductivity in planar superconductor-ferromagnet hybrids. **Physical Review B**, v. 84, n. 9, p. 094523, 2011.
- [28] GINZBURG, V. L, *J. Exp. Theor. Phys.* **4**, 153 (1956)
- [29] ANDERSON, P. W.; SUHL, H. Spin alignment in the superconducting state. **Physical Review**, v. 116, n. 4, p. 898, 1959.

- [30] LARKIN, A. I.; OVCHINNIKOV, I. U. N. Inhomogeneous state of superconductors(Production of superconducting state in ferromagnet with Fermi surfaces, examining Green function). **Soviet Physics-JETP**, v. 20, p. 762-769, 1965.
- [31] FULDE, Peter; FERRELL, Richard A. Superconductivity in a strong spin-exchange field. **Physical Review**, v. 135, n. 3A, p. A550, 1964.
- [32] HOUZET, M.; BUZDIN, Alexandre I. Theory of domain-wall superconductivity in superconductor/ferromagnet bilayers. **Physical Review B**, v. 74, n. 21, p. 214507, 2006.
- [33] CHEN, Qinghua; CARBALLEIRA, Carlos; MOSHCHALCOV, Victor V. Symmetry-breaking effects and spontaneous generation of vortices in hybrid superconductor-ferromagnet nanostructures. **Physical Review B**, v. 74, n. 21, p. 214519, 2006.
- [34] ZHU, L. Y.; CHEN, T. Y.; CHIEN, C. L. Altering the superconductor transition temperature by domain-wall arrangements in hybrid ferromagnet-superconductor structures. **Physical review letters**, v. 101, n. 1, p. 017004, 2008.
- [35] BUZDIN, Alexandre I. Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures. **Reviews of modern physics**, v. 77, n. 3, p. 935, 2005.
- [36] VALENTI, Roser. Institut für Theoretische Physik Universität Frankfurt.
- [37] PATHRIA, R. K. Statistical mechanics, **Butter worth**. 1996
- [38] HUANG, K. Statistical Mechanics, 18.3. 1987.
- [39] V.L. GINZBURG and LD LANDAU, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950)
- [40] GINZBURG, V. L, *J. Exp. Theor. Phys.* **4**, 153 (1956)
- [41] . P. GOR'KOV, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **36**. 1918 (1959) [Sov. Phys. – JETP **9**, 1364 (1959)]
- [42] GORKOV, Lev Petrovich. Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau equations in the theory of superconductivity. **Sov. Phys. JETP**, v. 9, n. 6, p. 1364-1367, 1959.
- [43] ABRIKOSOV, A. A. *Fundamentals of the Theory of Metals* (Vol. 1). Amsterdam: North-Holland.1988
- [44] SCHMIDT, Vadim Vasil'evich. **The physics of superconductors: introduction to fundamentals and applications**. Springer Science & Business Media, 1997.
- [45] COHEN - Tannoudji, CLAUDE; DIU, Bernard; LALOE, Franck. *Quantum mechanics*. New York: J. Wiley; Paris: Hermann, c1977. 2v.

- [46] SUZUKI, Masatsugu; SUZUKI, Itsuko S. Lecture Note on Solid State Physics Ginzburg-Landau Theory for Superconductivity. Department of Physics, State University of New York at Binghamton, Binghamton, New York, p. 13902-6000, 2007.
- [47] SAINT-JAMES, Daniel; GENNES, PG de. Onset of superconductivity in decreasing fields. **Physics Letters**, v. 7, n. 5, p. 306-308, 1963.
- [48] KING, J.; DHAKAL, P. *Finite Difference Schemes and the Schrodinger Equation*. 2014
- [49] ABRAMOWITZ, Milton et al. **Handbook of mathematical functions**. New York: Dover, 1965.
- [50] VANDERBILT, David. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. **Physical Review B**, v. 41, n. 11, p. 7892, 1990.
- [51] RAPPE, Andrew M. et al. Optimized pseudopotentials. **Physical Review B**, v. 41, n. 2, p. 1227, 1990.
- [52] LIN, J. S. et al. Optimized and transferable nonlocal separable ab initio pseudopotentials. **Physical Review B**, v. 47, n. 8, p. 4174, 1993.
- [53] GYGI, François. Electronic-structure calculations in adaptive coordinates. **Physical Review B**, v. 48, n. 16, p. 11692, 1993.
- [54] GYGI, François. Ab initio molecular dynamics in adaptive coordinates. **Physical Review B**, v. 51, n. 16, p. 11190, 1995.
- [55] GYGI, Francois. Adaptive Riemannian metric for plane-wave electronic-structure calculations. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 19, n. 7, p. 617, 1992.
- [56] DEVENYI, A. et al. Adaptive Riemannian metric for all-electron calculations. **Physical Review B**, v. 49, n. 19, p. 13373, 1994.
- [57] HAMANN, D. R. Application of adaptive curvilinear coordinates to the electronic structure of solids. **Physical Review B**, v. 51, n. 11, p. 7337, 1995.
- [58] HAMANN, D. R. Band structure in adaptive curvilinear coordinates. **Physical Review B**, v. 51, n. 15, p. 9508, 1995.
- [59] HAMANN, D. R. Adaptive-coordinate electronic structure of 3 d bands: TiO 2. **Physical Review B**, v. 56, n. 23, p. 14979, 1997.
- [60] CHELIKOWSKY, James R.; TROULLIER, N.; SAAD, Y. Finite-difference-pseudopotential method: electronic structure calculations without a basis. **Physical review letters**, v. 72, n. 8, p. 1240, 1994.

- [61] CHELIKOWSKY, James R. et al. Higher-order finite-difference pseudopotential method: An application to diatomic molecules. **Physical Review B**, v. 50, n. 16, p. 11355, 1994.
- [62] CHELIKOWSKY, James R. Structural and electronic properties of neutral and charged silicalike clusters. **Physical Review B**, v. 57, n. 6, p. 3333, 1998.
- [63] BRIGGS, E. L.; SULLIVAN, D. J.; BERNHOLC, J. Large-scale electronic-structure calculations with multigrid acceleration. **Physical Review B**, v. 52, n. 8, p. R5471, 1995.
- [64] BRIGGS, E. L.; SULLIVAN, D. J.; BERNHOLC, J. Real-space multigrid-based approach to large-scale electronic structure calculations. **Physical Review B**, v. 54, n. 20, p. 14362, 1996.
- [65] BERNHOLC, J. et al. Real-space multigrid methods for large-scale electronic structure problems. **International journal of quantum chemistry**, v. 65, n. 5, p. 531-543, 1997.
- [66] MODINE, N. A.; ZUMBACH, Gil; KAXIRAS, Efthimios. Adaptive-coordinate real-space electronic-structure calculations for atoms, molecules, and solids. **Physical Review B**, v. 55, n. 16, p. 10289, 1997.
- [67] GYGI, Francois; GALLI, Giulia. Real-space adaptive-coordinate electronic-structure calculations. **Physical Review B**, v. 52, n. 4, p. R2229, 1995.
- [68] BECK, Thomas L.; IYER, Karthik A.; MERRICK, Michael P. Multigrid methods in density functional theory. **International journal of quantum chemistry**, v. 61, n. 2, p. 341-348, 1997.
- [69] BECK, Thomas L. Real-space multigrid solution of electrostatics problems and the Kohn–Sham equations. **International journal of quantum chemistry**, v. 65, n. 5, p. 477-486, 1997.
- [70] HOSHI, Takeo; ARAI, Masao; FUJIWARA, Takeo. Density-functional molecular dynamics with real-space finite difference. **Physical Review B**, v. 52, n. 8, p. R5459, 1995.
- [71] BURNETT, David S. **Finite element analysis: from concepts to applications**. Reading, MA: Addison-Wesley, 1987.
- [72] ZIENKIEWICZ, Olgierd Cecil; MORICE, P. B. **The finite element method in engineering science**. London: McGraw-hill, 1971.
- [73] BATHE, Klaus-Jürgen. **Finite element procedures**. Klaus-Jurgen Bathe, 2006.
- [74] STRANG, Gilbert; FIX, George J. **An analysis of the finite element method**. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1973.

- [75] ERIKSSON, Kenneth (Ed.). **Computational differential equations**. Cambridge University Press, 1996.
- [76] REDDY, B. Dayanand. **Introductory functional analysis: with applications to boundary value problems and finite elements**. Springer, 1998.
- [77] HERMANSSON, Björn; YEVICK, David. Finite-element approach to band-structure analysis. **Physical Review B**, v. 33, n. 10, p. 7241, 1986.
- [78] WHITE, Steven R.; WILKINS, John W.; TETER, Michael P. Finite-element method for electronic structure. **Physical Review B**, v. 39, n. 9, p. 5819, 1989.
- [79] TSUCHIDA, Eiji; TSUKADA, Masaru. Electronic-structure calculations based on the finite-element method. **Physical Review B**, v. 52, n. 8, p. 5573, 1995.
- [80] TSUCHIDA, Eiji; TSUKADA, Masaru. Adaptive finite-element method for electronic-structure calculations. **Physical Review B**, v. 54, n. 11, p. 7602, 1996.
- [81] PASK, J. E. et al. Real-space local polynomial basis for solid-state electronic-structure calculations: A finite-element approach. **Physical Review B**, v. 59, n. 19, p. 12352, 1999.
- [82] CHO, K. et al. Wavelets in electronic structure calculations. **Physical Review Letters**, v. 71, n. 12, p. 1808, 1993.
- [83] WEI, Siqing; CHOU, M. Y. Wavelets in self-consistent electronic structure calculations. **Physical review letters**, v. 76, n. 15, p. 2650, 1996.
- [84] TYMCZAK, C. J.; WANG, Xiao-Qian. Orthonormal wavelet bases for quantum molecular dynamics. **Physical Review Letters**, v. 78, n. 19, p. 3654, 1997.
- [85] LIPPERT, Ross A.; ARIAS, T. A.; EDELMAN, Alan. Multiscale computation with interpolating wavelets. **Journal of Computational Physics**, v. 140, n. 2, p. 278-310, 1998.
- [86] PEIRÓ, Joaquim; SHERWIN, Spencer. Finite difference, finite element and finite volume methods for partial differential equations. In: **Handbook of materials modeling**. Springer Netherlands, 2005. p. 2415-2446.
- [87] CHENEY, E.; KINCAID, David. **Numerical mathematics and computing**. Cengage Learning, 2012.
- [88] KING, J.; DHAKAL, P. *Finite Difference Schemes and the Schrodinger Equation*. 2014

- [89] GRIFFITHS, David Jeffrey; HARRIS, Edward G. **Introduction to quantum mechanics**. New Jersey: Prentice Hall, 1995.
- [90] BEZOTOSNYI, P. I. et al. On the role of the boundary conditions in the Ginzburg-Landau theory. **Bulletin of the Lebedev Physics Institute**, v. 41, n. 6, p. 153-159, 2014.
- [91] YANG, Zhaorong et al. Domain-wall superconductivity in superconductor–ferromagnet hybrids. **Nature materials**, v. 3, n. 11, p. 793-798, 2004.
- [92] GILLIJNS, Werner et al. Magnetic confinement of the superconducting condensate in superconductor-ferromagnet hybrid composites. **Physical Review B**, v. 76, n. 6, p. 060503, 2007.
- [93] ALADYSHKIN, A. Yu et al. Crossover between different regimes of inhomogeneous superconductivity in planar superconductor-ferromagnet hybrids. **Physical Review B**, v. 84, n. 9, p. 094523, 2011.
- [94] ALADYSHKIN, A. Yu et al. Hybridization and interference effects for localized superconducting states in strong magnetic field. **Physical Review B**, v. 85, n. 18, p. 184528, 2012.
- [95] SILAEV, M. A. et al. The diode effect induced by domain-wall superconductivity. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 26, n. 9, p. 095702, 2014.
- [96] ZWILLINGER, Daniel. **Handbook of differential equations**. Gulf Professional Publishing, 1998
- [97] BUZDIN, A. I.; MEL'NIKOV, A. S. Domain wall superconductivity in ferromagnetic superconductors. **Physical Review B**, v. 67, n. 2, p. 020503, 2003.
- [98] YANG, Zhaorong et al. Domain-wall superconductivity in superconductor–ferromagnet hybrids. **Nature materials**, v. 3, n. 11, p. 793-798, 2004.
- [99] GILLIJNS, Werner et al. Domain-wall guided nucleation of superconductivity in hybrid ferromagnet-superconductor-ferromagnet layered structures. **Physical review letters**, v. 95, n. 22, p. 227003, 2005.
- [100] HOUZET, M.; BUZDIN, Alexandre I. Theory of domain-wall superconductivity in superconductor/ferromagnet bilayers. **Physical Review B**, v. 74, n. 21, p. 214507, 2006.
- [101] BERGERET, F. S.; VOLKOV, A. F.; EFETOV, K. B. Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures. **Reviews of modern physics**, v. 77, n. 4, p. 1321, 2005.
- [102] FULDE, Peter; FERRELL, Richard A. Superconductivity in a strong spin-exchange field. **Physical Review**, v. 135, n. 3A, p. A550, 1964.

[103] GILLIJNS, Werner et al. Domain-wall guided nucleation of superconductivity in hybrid ferromagnet-superconductor-ferromagnet layered structures. **Physical review letters**, v. 95, n. 22, p. 227003, 2005.

[104] IZYUMOV, Yurii A.; PROSHIN, Yurii N.; KHUSAINOV, Mensur G. Competition between superconductivity and magnetism in ferromagnet/superconductor heterostructures. **Physics-Uspekhi**, v. 45, n. 2, p. 109, 2002.

[105] LYUKSYUTOV*, I. F.; POKROVSKY, V. L. Ferromagnet–superconductor hybrids. **Advances in Physics**, v. 54, n. 1, p. 67-136, 2005.

[106] YANG, Zhaorong et al. Domain-wall superconductivity in superconductor–ferromagnet hybrids. **Nature materials**, v. 3, n. 11, p. 793-798, 2004.

[107] GYGAX S.; KROPSCHOT R. H. Surface currents in type II Superconductors. *Phys. Lett.* v. 9, n. 2, p. 91, 1964.