

# Desorden y defectos topológicos en la red de vórtices de un superconductor

Adrián Macía Rey

Directora del trabajo: M. Carmen Miguel López

## Resumen

Se ha estudiado la corriente crítica de un superconductor mediante métodos de dinámica molecular, considerando un sistema de vórtices bidimensional. Se ha observado la variación de la corriente crítica con el número de impurezas presentes en el sólido mostrando a la vez como este desorden induce en el sólido una fase policristalina. Se ha observado también el comportamiento de dicha corriente en el tránsito del régimen de *weak pinning* al de *strong pinning* encontrando diferencias cualitativas y cuantitativas en la forma de la curva resultante. Finalmente, se ha estudiado la variación de la corriente crítica hallando que ésta decrece al aumentar la temperatura.

## 1. Introducción

Desde el descubrimiento de los superconductores de alta temperatura el estudio de este tipo de sistemas ha sido un campo de activa investigación tanto teórico como experimental.

En un superconductor tipo II podemos diferenciar claramente dos fases o al menos eso se postuló en un principio: una fase superconductora normal con efecto Meisner y una fase mixta donde el campo magnético penetra en el superconductor de forma discontinua. Es en esta segunda fase donde centraremos el estudio de este tipo de materiales.

Es sabido desde los trabajos de Abrikosov [1], que en la fase mixta el campo magnético penetra en el superconductor en forma de vórtices. Estos son filamentos de radio  $\xi$ , la longitud de coherencia. Por ellos circulan las supercorrientes dando lugar a un campo magnético en el interior del material. Sin embargo, este campo es de decaimiento muy rápido [2] con una longitud  $\lambda$ , la longitud de penetración.

La interacción entre los vórtices es repulsiva debido a las mencionadas supercorrientes así que los vórtices se sitúan sobre los nodos de una red triangular. Sin embargo, como en la materia convencional podemos tener fluctuaciones en el sistema que destruyan el orden de largo alcance (fluctuaciones térmicas y fluctuaciones debidas al desorden

intrínseco presente en estos materiales) dando lugar a un líquido de vórtices así como a diversas fases desordenadas (policristales, *glass*) [2].

Las teorías más eficientes en la descripción de los sistemas de vórtices son teorías basadas en la elasticidad [2, 3]. En ellas se considera el sistema como un sólido elástico siendo particularmente adecuadas para la descripción de *grain boundaries* en este tipo de sistemas.

En el caso que nos ocupa abordaremos el problema desde la simulación numérica empleando métodos de dinámica molecular para modelizar el comportamiento dinámico de un sistema de vórtices. A partir de las simulaciones observaremos una serie de fenómenos relacionados con diferentes fases posibles del sistema.

En particular se estudiará una característica importante de los superconductores tipo II: la corriente crítica, que es aquella por encima de la cual los vórtices dejan de estar anclados y se mueven induciendo un campo eléctrico en el material de tal forma que, éste pierde su condición de superconductor y presenta una resistencia no nula [2].

Esta característica es de crucial importancia práctica ya que, los superconductores de alta temperatura se pueden enfriar únicamente con nitrógeno líquido (que es económico) abriendo numerosas opciones para la aplicación de estos mate-

riales en la industria.

## 2. Física de los vórtices

La metodología que se sigue en este trabajo está basada en la aproximación de que los vórtices son rígidos. Es decir, suponiendo que no puede haber fenómenos de entrelazado entre ellos, reduciremos en uno la dimensión del problema. Esta aproximación tiene pleno sustento experimental basado en la longitud de persistencia o correlación de los vórtices. Si esta longitud es mayor o del orden del grosor de la muestra a estudiar será válida, y es una condición experimental muy común [2]. Así considerando simetría respecto al eje  $z$ , estamos asumiendo que los defectos que se puedan presentar en la red también tienen esta simetría (desorden columnar).

Basándonos en esta aproximación debemos modelizar la dinámica de un sistema de  $N_v$  vórtices interactuando entre ellos y con  $N_p$  impurezas en la red cristalina del sólido que actuarán como trampas para los vórtices (*pinning points*). Las ecuaciones utilizadas son las siguientes [3, 4]:

$$\Gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{F}_{vv}(\{\mathbf{r}_i\}) + \mathbf{F}_{vp}(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{r}_j^p\}) \quad (1)$$

Tenemos un sistema de ecuaciones de dinámica sobreamortiguada (*overdamped*) que determina la evolución del sistema de vórtices.

El valor  $\Gamma$  es el parámetro de fricción de los vórtices, y éste en general es mucho mayor que el término de inercia de los vórtices [2].

Los términos de interacción vienen dados por las siguientes expresiones:

$$\mathbf{F}_{vv}(\{\mathbf{r}_i\}) = \sum_{j=1}^{N_v} \mathbf{f}_{vv}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_{vp}(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{r}_j^p\}) = \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{f}_{vp}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j^p) \quad (3)$$

Que nos definen las fuerzas entre vórtices y *pinning points* como una interacción a parejas.

Los términos de interacción entre vórtices vienen dados por la siguiente expresión:

$$\mathbf{f}_{vv}(\mathbf{r}) = \frac{\Phi_0^2}{8\pi^2\lambda^3} K_1(|\mathbf{r}|/\lambda) \hat{r} \quad (4)$$

Donde  $\Phi_0$  es la unidad de flujo magnético cuantizado transportado por los vórtices,  $\lambda$  es la longitud de penetración de London y  $K_1$  es la función de Bessel modificada de primer orden. Esta interacción es válida en el modelo de London [8]. Este modelo supone que el parámetro de orden del sistema en la aproximación de Ginzburg-Landau sólo depende de la fase, es decir, el módulo es aproximadamente constante.

Por lo que respecta a la interacción de los vórtices con los *pinning points* la modelizamos como un pozo Gaussiano [3] a través del siguiente potencial:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}^p) = V_0 \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}^p)^2}{\xi^2}\right] \quad (5)$$

Donde  $V_0$  es un parámetro del problema dependiente del tipo de impurezas presentes en el sólido que llamaremos potencial de *pinning* y  $\xi$  es la longitud de coherencia. Con lo que la fuerza vendrá dada por el gradiente de este potencial.

A estas ecuaciones de movimiento se les puede añadir un término de fuerza externa que usualmente será una corriente eléctrica  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  repercutiendo en el sistema de vórtices a través de una fuerza de Lorentz dada por:

$$\mathbf{f}_L(\mathbf{r}) = \Phi_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}) \times \frac{\hat{z}}{c} \quad (6)$$

Siendo  $c$  la velocidad de la luz.

Si el sistema de vórtices se encuentra a temperatura cero estas son las ecuaciones que lo describen. Sin embargo, si el sistema se encuentra a temperatura finita deberá tenerse en cuenta que la temperatura afecta a la evolución dinámica del sistema de dos formas:

- La primera y más evidente es que si la temperatura no es cero tendremos en el sistema fluctuaciones térmicas (ruido térmico)
- La segunda, que no es tan evidente pero es más importante, es que las dos longitudes características del proceso tienen una cierta dependencia con la temperatura.

Así pues, si se quiere estudiar el sistema no solamente a temperatura igual a cero, se deberá explicitar esta dependencia con la temperatura de la longitud de penetración de London y de la longitud de coherencia.

Para ello se recurre a la teoría de Ginzburg-Landau, definiendo un parámetro de orden de la siguiente manera:

$$\psi(x) = \bar{n}_s^{-1/2}(x) e^{i\phi(x)} \quad (7)$$

Donde  $\phi$  es la fase del superconductor y  $\bar{n}_s$  es la densidad de pares de Cooper dada por:

$$\bar{n}_s = \frac{n_s}{2} \quad (8)$$

Y  $n_s$  es el número de electrones en estado superconductor.

A partir de estas consideraciones se construye el siguiente funcional de energía libre:

$$F[\psi] = \int d^3x \left[ \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \nabla\psi^* \nabla\psi + \alpha(T - T_c) \psi\psi^* + \frac{\beta}{2} (\psi\psi^*)^2 \right] \quad (9)$$

Donde  $\bar{m}$  es la masa de un par de Cooper, es decir,  $\bar{m} = 2m_e$ .

La introducción del campo magnético se hace a través de un potencial vector adecuado teniendo en cuenta la invarianza bajo transformaciones *gauge*. La prescripción para esto consiste en sustituir los gradientes por derivadas covariantes de la siguiente forma:

$$\nabla \rightarrow D = \left( \nabla - i \frac{e^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \quad (10)$$

A partir de esto se minimiza la energía libre para obtener las dos ecuaciones siguientes:

$$-i \frac{\hbar}{2\bar{m}} D^2 \psi + \alpha(T - T_c) \psi + \beta \psi |\psi|^2 \quad (11)$$

$$\frac{c}{4\pi} \nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{J} \quad (12)$$

Donde la corriente  $\mathbf{J}$  viene dada por:

$$\mathbf{J} = -i \frac{e^* \hbar}{2\bar{m}} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^{*2}}{\bar{m}c} |\psi|^2 \mathbf{A} \quad (13)$$

La ecuación (11) es la ecuación de Schrödinger no lineal y la ecuación (12) es la ecuación para la supercorriente.

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau dan dos escalas de longitud distintas,  $\xi$  que caracteriza las variaciones de  $\psi$  y  $\lambda$  que caracteriza las variaciones de  $\mathbf{B}$ . Del mismo modo, también dan la variación

de la temperatura de ambas longitudes, dada por las siguientes expresiones:

$$\xi(T) = \frac{\hbar}{|2\bar{m}\alpha(T - T_c)|^{1/2}} \quad (14)$$

$$\lambda(T) = \frac{c}{e^*} \left[ \frac{\bar{m}\beta}{4\pi\alpha|T - T_c|} \right]^{1/2} \quad (15)$$

Ambas longitudes divergen en  $T_c$  lo que quiere decir que, al aproximarnos a la temperatura crítica, los vórtices se hacen más grandes y el campo es capaz de penetrar más profundamente en el medio, perdiendo éste su estado superconductor al alcanzar  $T_c$ .

Se emplearán en adelante estas expresiones para la dependencia de las longitudes del sistema con la temperatura, con lo que se estará haciendo una descripción de campo medio.

### 3. La simulación

Como ya se ha comentado, el tratamiento del problema se llevará a cabo mediante simulación numérica. Para ello se emplean métodos de dinámica molecular modelizando el sistema de vórtices del superconductor como un conjunto de partículas interaccionando entre ellas y con las impurezas son columnares realizando así la simulación en dos dimensiones.

Las ecuaciones de movimiento de los vórtices vienen dadas en (1) con las interacciones de la forma explicitada en (4) y (5).

Las consideraciones técnicas del programa desarrollado son las típicas de un código de dinámica molecular. Es decir se supone que la caja de simulación es un cuadrado de lado  $36\lambda$  con condiciones de contorno periódicas en  $x$  e  $y$ . El parámetro de viscosidad  $\Gamma$  se toma igual a uno. Se introduce un *cut off* en las interacciones por motivos de eficiencia computacional. La interacción entre vórtices y *pinning points* es de muy corto alcance y se puede cortar para distancias mayores que  $\lambda$ , mientras que la interacción entre vórtices se corta para una distancia de  $12\lambda$ .

Se utiliza como unidad de longitud de la simulación  $\lambda(T = 0) = 1$  y, dado que se estudian superconductores de tipo II, se escogerá  $\xi(T = 0) = 0,2$ , ya que lo más común en estos materiales es que

$\lambda \gg \xi$ . La unidad de tiempo elemental de la simulación será  $8\pi^2\Gamma\lambda^4/\Phi_0^2$  mientras que la unidad de energía es  $\Phi_0^2/(8\pi^2\lambda^2)$ .

El estudio de la corriente crítica con este programa tiene dos partes. En primer lugar, se inicializa el sistema dando posiciones aleatorias a los vórtices y *pinning points*. Hecho esto, se deja que el sistema relaje por completo en ausencia de corriente aplicada hasta que llegue a equilibrarse (*pinning*). Es en este punto, cuando se aplica una corriente externa y se estudia si el sistema abandona el estado de equilibrio o permanece en él. Si el sistema permanece en equilibrio, la corriente aplicada será menor que la corriente crítica y si se alcanza un estado estacionario con velocidad media de los vórtices diferente de cero, la corriente aplicada será superior a la crítica.

En lo referente al código, únicamente decir que las ecuaciones de evolución se resuelven mediante un método de *Runge-Kutta-Fehlberg* de 4°-5° orden [5] con adaptación del paso de tiempo. El programa desarrollado en *Fortran 90* está basado en una aplicación previa desarrollada por M. Carmen Miguel.

## 4. Resultados de las simulaciones

En esta sección se estudiará la corriente crítica para dos situaciones diferentes. En primer lugar, se analizará el caso  $T = 0$  empleando dos valores diferentes para el potencial de *pinning*. En segundo lugar se verá como afecta una temperatura diferente de cero a la corriente crítica.

### 4.1. Análisis de la corriente crítica para $T = 0$

En este apartado se analizará el comportamiento de la corriente crítica para temperatura igual a cero con dos valores del potencial de *pinning*.

#### 4.1.1. Potencial de *pinning* $V_0 = 0,01$

Este valor del potencial queda encuadrado en lo que se conoce como *weak pinning*. Para realizar estas simulaciones se han utilizado los siguientes valores para los parámetros del problema:

- $N_v = 1032$ .
- $N_p$  variando de 1032 a 6192.
- $V_0 = 0,01$ .
- $T = 0$ .

En primer lugar, se observa con cierto detalle la relajación del sistema dejándolo evolucionar hasta que la velocidad media de las vórtices sea menor o del orden de precisión que requiere el integrador ( $10^{-6}$  en el presente caso). Si se observa como es la configuración relajada del sistema, se encontrará lo que se muestra en la figura 1. En ella se puede ver que los defectos topológicos, que se dan durante la relajación del sistema, se agrupan formando *grain bounddaries* [3, 7]. Se evidencia así mismo, que el número de defectos aumenta con el número de *pinning points*.

Después de la relajación del sistema se aplica la perturbación estudiándose nuevamente la relajación del sistema y comprobando si alcanza un estado estacionario o regresa al estado de equilibrio. Procediendo de esta manera se encuentra la curva para la corriente crítica que se muestra en la figura 2.

Se aprecia en la mencionada figura 2 que la evolución de la corriente crítica con el número de impurezas tiene dos regímenes claramente diferenciados, el intervalo en que la curva es lineal (*grain boundary depinning* individual [9]) y un intervalo para  $N_p$  grande ( $\gtrsim 4128$ ) en que se da el *grain boundary depinning* colectivo [9].

Se verá en la siguiente sección como afecta la intensidad del potencial de *pinning* a la corriente crítica.

#### 4.1.2. Potencial de *pinning* $V_0 = 0,1$

En esta sección se procede como en la anterior pero con un valor superior para la amplitud del potencial de *pinning* evidenciando como ello afecta a la corriente crítica.

Antes de exponer el resultado se pueden hacer dos consideraciones: es de suponer que la relajación del sistema será mucho más rápida en este caso que en el anterior. También habrá más desorden en el sistema equilibrado ya que ahora las interacciones entre los vórtices y los *pinning points* son de mayor alcance.

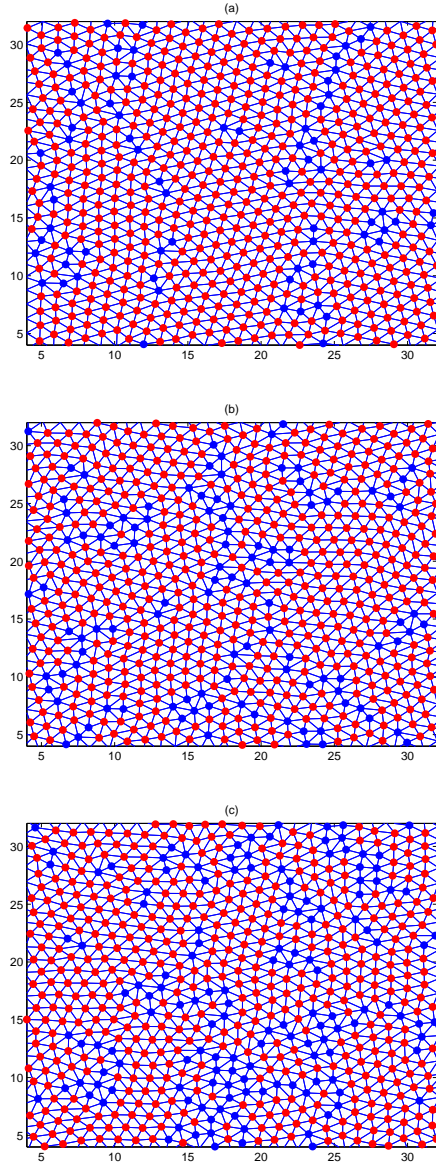


Figura 1: Se muestran en la figura configuraciones relajadas de un sistema de  $N_v$  vórtices para diferente número de *pinning points*: (a)  $N_p = 1032$ , (b)  $N_p = 3096$ , (c)  $N_p = 6192$ . Se aprecia con claridad como las dislocaciones de la red se agrupan dando lugar a *grain boundaries*. Así mismo se observa también como el número de dislocaciones crece al aumentar el número de *pinning points*.

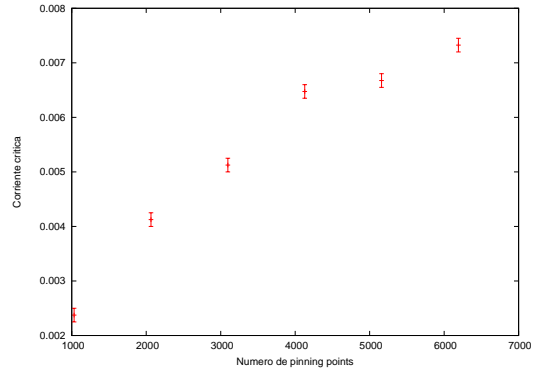


Figura 2: Curva de dependencia de la corriente crítica con el número de *pinning points*, se puede ver que para  $N_p \lesssim 4128$  el perfil es muy aproximadamente lineal mientras que para  $N_p$  mayores la forma de la curva cambia dando lugar a un crecimiento mucho más lento

Vemos en la figura 3 alguna de las configuraciones finales del sistema de vórtices.

Los resultados del estudio se muestran en la figura 4, en ella se aprecia que la curva es diferente para esta situación. Tiene un perfil mucho más parabólico y con cambios menos abruptos.

Las diferencias en la curva de la corriente crítica con el caso anterior se deben principalmente a que el mecanismo que produce el *depinning* es diferente. En aquel caso lo producía el *depinning* de las *grain boundaries* mientras que al ir pasando al régimen de *strong pinning* el mecanismo responsable es el *depinning* de vórtices individuales [9].

## 4.2. Análisis de la corriente crítica para $T \neq 0$

En esta sección se estudiará el efecto de la temperatura sobre la corriente crítica, para ello se tendrá en cuenta todo lo expuesto en la sección 2.

Se considera el efecto de la temperatura sobre las longitudes características del problema negligiendo el efecto del ruido térmico. En la escala de temperaturas en la que el medio se comporta como superconductor estas fluctuaciones son despreciables frente a la energía de *pinning*, esto es frente a la energía típica de confinamiento de los vórtices. Por este motivo solo se tendrá en cuenta el efecto sobre las longitudes.

En el programa desarrollado, la temperatura se da en unidades de la temperatura crítica, luego las

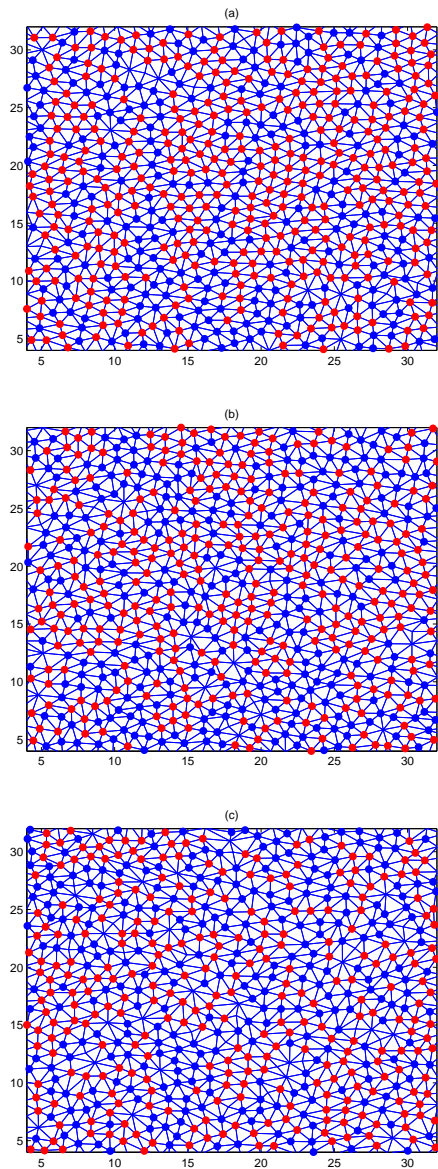


Figura 3: Se muestran en la figura configuraciones relajadas de un sistema de  $N_v = 1032$  vórtices para diferentes valores de  $N_p$ : (a)1032, (b)3096, (c)6192. Se puede apreciar que la masiva proliferación de defectos minimiza cada vez más la aparición de *grain boundaries*.

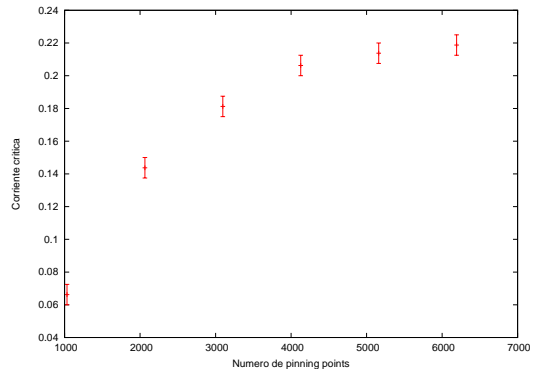


Figura 4: Curva de dependencia de la corriente crítica en función del número de *pinning points*. Se ve en este caso como la curva es suave y no muestra ningún cambio sustancial de pendiente, consecuencia de la mayor intensidad del potencial de *pinning*.

longitudes características vendrán dadas por:

$$\lambda(T) = \frac{\lambda_0}{\sqrt{1-T}} \quad (16)$$

$$\xi(T) = \frac{\xi_0}{\sqrt{1-T}} \quad (17)$$

Donde los valores  $\lambda_0$  y  $\xi_0$  son los siguientes  $\lambda_0 = 1$  y  $\xi_0 = 0,2$ .

Una última consideración sería concerniente a los *cut off* de las interacciones, pues esto deberán depender de la temperatura, de modo que éstos se harán más grandes al aumentar  $T$ .

Se muestran en la figura 5 las curvas correspondientes a  $T = 0,1$  y  $T = 0,2$ , en ellas podemos ver un comportamiento fluctuante pese a que se mantiene la tendencia observada para el caso  $T = 0$ .

Se puede ver también en la figura 6 que, como se podría esperar, la corriente crítica desciende al disminuir la temperatura.

## 5. Conclusiones

Se han realizado simulaciones numéricas para modelar el comportamiento de los vórtices en diferentes situaciones.

Se ha explorado el tránsito del régimen de *weak pinning* ( $V_0 \ll 1$ ) al de *strong pinning* ( $V_0 \gtrsim 1$ ) encontrando una dependencia cualitativa y cuantitativamente diferente para la variación de la corriente crítica en función del número de impurezas.

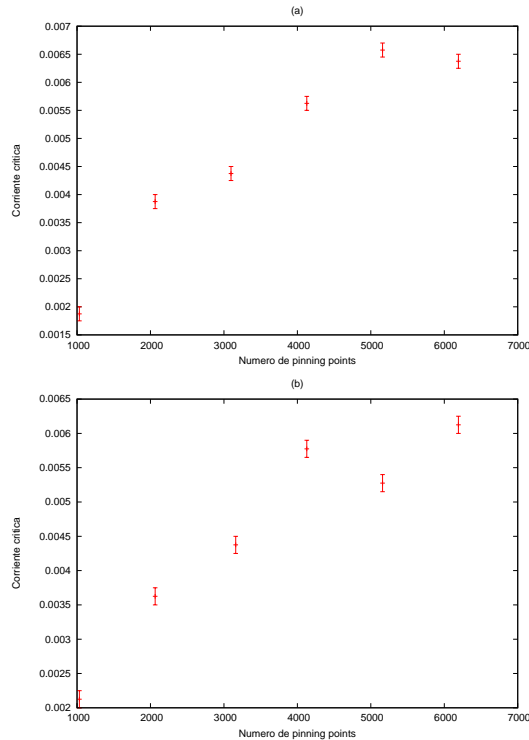


Figura 5: Se muestra en la figura la curva de dependencia de la corriente crítica con el número de *pinning points* para dos temperaturas diferentes: (a)  $T = 0,1$ , (b)  $T = 0,2$ .

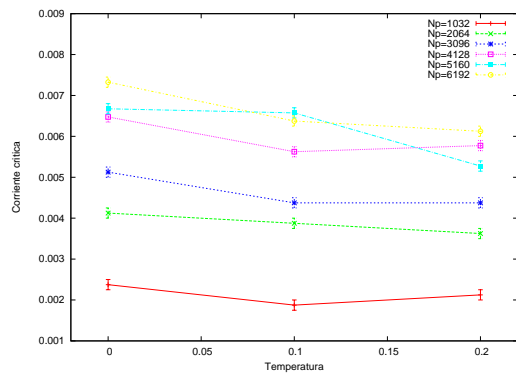


Figura 6: Se muestra en la figura la variación de la corriente crítica con la temperatura para diferentes valores del número de *pinning points*. Se aprecia con claridad que la corriente crítica tiene una tendencia a disminuir con el aumento de la temperatura pero de forma irregular.

Se ha comprobado una tendencia de disminución de la corriente crítica como respuesta al aumento de la temperatura sin evidenciarse la forma concreta. Sería interesante en futuras investigaciones un análisis exhaustivo que permitiera explicar las irregularidades observadas.

## Agradecimientos

Finalmente me gustaría expresar mi agradecimiento a diversas personas por haberme facilitado la realización de este trabajo.

En primer lugar a la Dra. Carmen Miguel y al Dr. Paolo Moretti por sus múltiples orientaciones y facilidades que me han dado para hacer este trabajo.

Me gustaría también mencionar al Dr. David Reguera por facilitarme el trabajo puramente computacional y por resolver mis dudas de forma desinteresada.

A Isabel Corominas por facilitarme un lugar en el que poder llevar a cabo mi trabajo de la mejor forma posible.

A Adrián Hernando por su colaboración en la realización de las simulaciones y por útiles sugerencias para el trabajo en si mismo.

Me gustaría también darle mi más sincero agradecimiento a mis padres por los ánimos y el apoyo moral que me han dado.

Finalmente, pero no por ello menos importante, agradecer a Silvia Cabrera por toda la ayuda que me ha brindado tanto en lo personal, como en la redacción del trabajo.

Muchas gracias a todos

## Referencias

- [1] A. A. Abrikosov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 32, 1442 (1957).
- [2] T. Giamarchi, S. Bhattacharya, arXiv:cond-mat/0111052v1, (2001).
- [3] P. Moretti, M. Carmen Miguel, S. Zapperi, Phys. Rev. 71, 1 (2005).
- [4] M. Benkraouda, I. M. Obaidat, U. A. I. Khawaja, N. M. J. Mulaa, Supercond. Sci. Technol. 19 (2006).

- [5] Numerical recipes in fortran, William H. Press et al ISBN 0-521-43064-X.
- [6] P. Chaddah, S. B. Roy Current science, Vol. 80 NO. 8 (2001).
- [7] P. Moretti, M. Carmen Miguel, M. Zaiser, S. Zapperi arXiv: cond-mat/0312382v1.
- [8] M. Carmen Miguel, M. Kardar, Phys. Rev. 62, 9 (2000).
- [9] P. Moretti, M. Carmen Miguel, Artículo en preparación.