UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
FACULDADE DE CIÊNCIAS/CAMPUS DE BAURU
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

Estudo de Materiais Supercondutores em Forma de SQUID com uma Constrição Usando Métodos de Paralelização Computacional

André Luiz Severino

Orientador:

Edson Sardella

BAURU
2015

André Luiz Severino

Estudo de Materiais Supercondutores em Forma de SQUID com uma Constrição Usando Métodos de Paralelização Computacional

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais da Universidade Estadual Paulista como parte dos pré-requisitos para a obtenção do título de Mestre.

BAURU
2015

Severino, André Luiz.
Estudo de materiais supercondutores em forma de SQUID com uma constrição usando métodos de paralelização computacional / André Luiz Severino, 2015
100 f.

Orientador: Edson Sardella

Dissertação (Mestrado)– Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências, Bauru, 2015

1. Supercondutividade. 2. Vórtices. 3. Equações de London. 4. Equações de Ginzburg-Landau. 5. Método psi-U. 6. Squid. 7. Paralelização. 8. CUDA. 9. Linguagem C. 10. Mesoscópico. I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências.

unesp UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
CAMPUS DE BAURU
FACULDADE DE CIENCIAS DE BAURU

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE ANDRÉ LUIZ SEVERINO, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DO(A) FACULDADE DE CIENCIAS DE BAURU.

Aos 28 dias do mês de julho do ano de 2015, às 09:00 horas, no(a) Anfiteatro do Prédio da Pos-graduação, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. EDSON SARDELLA do(a) Departamento de Física / Faculdade de Ciencias de Bauru, Prof. Dr. RAFAEL ZADOROSNY do(a) Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, Prof. Dr. PAULO NORONHA LISBOA FILHO do(a) Departamento de Física / Faculdade de Ciencias de Bauru, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de ANDRÉ LUIZ SEVERINO, intitulado "Estudos de materiais supercondutores em forma de SQUID com uma constrição usando métodos de paralelização computacional". Após a exposição, o discente foi arguido oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: Aprovado. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que, após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. EDSON SARDELLA

Prof. Dr. RAFAEL ZADOROSNY

Prof. Dr. PAULO NORONHA LISBOA FILHO

Dedicatória

Dedico este trabalho à pessoa que encheu minha vida de amor: Sandra Alves Pereira. Obrigado por apoiar-me.

Agradecimentos

Agradeço à toda minha família, e em especial, ao meu avô Agenor, que sempre compartilhou muitos momentos de sabedoria comigo.

Agradeço ao meu orientador, Professor Edson Sardella, que ensinou-me, além de Física e tantas outras coisas, também a ser sempre alegre, mesmo nas dificuldades. Tive confiança nele, e ele confiou em mim. Confiança recíproca.

Agradeço aos meus amigos de classe que, além de enfrentarem as dificuldades e desafios das disciplinas comigo, também alegraram minha vida. Tempos memoráveis.

Agradeço aos meus amigos de Jaú, minha cidade natal, e de Bauru. Cada um sabe o quanto os considero.

Agradeço aos meus professores da pós-graduação, Alexandre, Alexys, Pablo, Paulo e Vicente, pelo conhecimento que adquiri graças à excelente didática de todos.

Agradeço aos meus colegas de trabalho da EPC de Jaú pelas risadas e amizade.

Agradeço à Natureza por formar e desenvolver minha consciência - mesmo que de maneira possivelmente aleatória.

Resumo

É notável o desenvolvimento atual da Ciência e Tecnologia relacionada aos materiais supercondutores. Exemplos de utilização deste tipo de material, são o armazenamento de energia em forma de supercorrentes, trens do tipo Maglev, cujo uso das supercorrentes também proporciona a geração de altos valores de campo magnético que podem proporcionar levitação e propulsão. Aplicações desta natureza, dentre outras, requerem uma profunda compreensão do comportamento das propriedades físicas fundamentais dos supercondutores, tanto do ponto de vista macroscópico quanto microscópico. Como exemplo, podemos citar a formação da rede de vórtices em materiais supercondutores na presença de campos magnéticos aplicados e/ou de correntes de transporte, cujas magnitudes, quando ultrapassam determinados valores críticos, permitem a entrada quantizada de fluxo magnético.

Com relação aos métodos utilizados neste trabalho, estudamos o comportamento e as características de um material de dimensões mesoscópicas em formato de dispositivo supercondutor de interferência quântica - "SQUID", um tipo de magnetômetro muito sensível, capaz de realizar medidas de campos magnéticos muito tênues - usando um algoritmo de simulação computacional. A simulação basicamente atua no sentido de se aplicar campos magnéticos em passos de tempo determinados - a temperatura fixa - ao material modelado, o que permite o estudo das características deste tipo de material por meio dos dados de saída gerados pelo simulador, os quais permitem a construção de gráficos para estudo do comportamento do parâmetro de ordem, densidades de corrente, formação de vórtices, entre outros parâmetros relacionados. Assim, fazemos uma revisão das teorias fenomenológicas e desenvolvemos um algorítimo de solução numérica das equações envolvidas, as quais não possuem solução exata. Em seguida usamos a tecnologia CUDA

com a linguagem C para implementar este algoritmo e aplicamos à solução do problema de um SQUID com uma pequena constrição. Por fim, os gráficos são construídos utilizando os dados gerados pelo simulador para análise e interpretação do comportamento do material em estudo.

Palavras chave: Supercondutividade, vórtices, equações de London, equações de Ginzburg-Landau, método $\psi - U$, SQUID, paralelização, CUDA, linguagem C, mesoscópico.

Abstract

It is remarkable the current development of science and technology related to superconducting materials. Examples of using this type of material, such as storage of energy as supercurrents, the Maglev-type trains, which also provides use of supercurrents generating high values of magnetic field that can provide levitation and propulsion. Applications of this nature, among others, require a deep understanding of the behavior of the fundamental physical properties of superconductors, both from the macroscopic and microscopic point of view. As one example, the formation of vortex lattice in superconducting materials in the presence of applied magnetic fields and/or transport chains whose magnitudes when they exceed certain critical values allow the quantized magnetic flux entrance.

With respect to the methods used in this work, we studied the behavior and characteristics of a material with mesoscopic dimensions in a geometry of a superconducting quantum interference device - "SQUID". Such device is a kind of very sensitive magnetometer, able to perform very faint magnetic fields measures - using a computer simulation algorithm. The simulation basically acts to apply magnetic fields at certain time steps - with fixed temperature - to the modeled material, allowing the study of the characteristics of this type of material by means of output data generated by the simulator, which allows the construction of graphs to study the order parameter behavior, current densities, vortex formation, and other related parameters. Thus, we review the phenomenological theories and developed a numerical solution algorithm of the involved equations, which have no exact solution. Then we use the CUDA technology with the C language to implement this algorithm and apply it to solving the problem of a SQUID with a small constriction. Finally, the graphics are constructed using the data generated by the simulator for analysis

and interpretation of the behavior of the material under study.

Key words: Superconductivity, vortex, London equations, Ginzburg-Landau equations, $\psi - U$ method, SQUID, parallelization, CUDA, C language, mesoscopic.

Lista de Figuras

1.1 Gráfico histórico de Onnes: resistência do mercúrio sólido como função da temperatura. [1] 18

1.2 Experimentos ilustrando a diferença entre um supercondutor e um condutor perfeito. Experimento 1: amostras resfriadas sem a presença de um campo magnético aplicado. Experimento 2: amostras resfriadas na presença de um campo magnético aplicado. Fonte: Próprio autor. 19

1.3 (a) Gráfico geral da dependência do campo crítico $H_c(T)$ pela temperatura para diversos materiais. [1]. (b) Curva do calor específico em função da temperatura para um material supercondutor na ausência de campo magnético, onde verifica-se uma descontinuidade. [2] (Adaptada da fonte original). 20

2.1 (a) Perfil do campo magnético local em um supercondutor semi-infinito na presença de uma campo aplicado. Note que, na fronteira, $B_z(0) = H$. (b) Superfície curva demonstrando a penetração de campo na direção do eixo x. Fonte: Próprio autor. 25

2.2 Perfis da energia livre. Em (a), (b) e (c), esses perfis não satisfazem a teoria de Landau de transições de fase de segunda ordem, enquanto em (d), a teoria é satisfeita, com mínimo ocorrendo em $M \neq 0$, indicado pela seta apontada sobre a curva de cor verde. Fonte: Próprio autor. 28

2.3 Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem próximo à interface metal-supercondutor. Após o comprimento ξ, o material encontra-se no estado supercondutor com valor máximo de parâmetro de ordem. 33

2.4 Representação esquemática de perfis de campo e de parâmetro de ordem para supercondutores do tipo-I e II, onde a configuração em (b) permite a formação de um vórtice, enquanto a configuração em (a) não. Fonte: Próprio autor. 35

2.5 Diagrama de fase de um supercondutor do tipo-I. Fonte: Próprio autor. . . 36

2.6 Diagrama de fase de um supercondutor do tipo-II. Fonte: Próprio autor. . 37

2.7 (a) Magnetização de um supercondutor do tipo-I e (b) Magnetização de um supercondutor do tipo-II, ambos em função do campo aplicado H. A linha tracejada representa um supercondutor do tipo-I. Fonte: Dissertação de Mestrado de Mauro César Vieira Pascolati. Unesp Bauru/POSMAT - Ano 2010. 38

2.8 Estrutura de um vórtice. Fonte: Dissertação de Mestrado de Mauro César Vieira Pascolati. Unesp Bauru/POSMAT - Ano 2010. 40

2.9 Rede de vórtices de Abrikosov: perfil do campo local. Experimento com material supercondutor, onde partículas ferromagnéticas foram aplicadas à superfície deste material, permanecendo nesta configuração. As regiões mais escuras correspondem aos valores mais altos de campo (região normal), enquanto as regiões mais claras, aos valores mais baixos de campo (região supercondutora)[1]. 42

3.1 Representação da caixa de simulação com o supercondutor no seu interior. Fonte: Próprio autor. 50
3.2 Malha de discretização: a legenda indica os pontos onde cada quantidade física é calculada. Fonte: Próprio autor. 53
3.3 A figura ilustra a aproximação (3.35) para a primeira derivada [3]. 55

4.1 Hardware básico para computação paralela com CUDA: Com a implementação da placa de vídeo (device), o programa, antes escrito para ser executado apenas no host ((a) Memória principal e (b) CPU), agora também pode ser executado no device ((c) Memória e (d) GPU). Fonte: Próprio autor. 65
4.2 Estrutura básica de processamento em paralelo. Fonte: Próprio autor. . . . 66
4.3 Esquema simplificado de alocação dinâmica de memória em C/C++. Os cubos em (a), (b) e (c) representam regiões de memória que armazenam o endereço de outras regiões de memória (por isso são denominados de ponteiros). Em (d) encontra-se o espaço alocado para ser utilizado pelos dados processados. Fonte: Próprio autor. 68
4.4 Achatamento de índice. Em (a), temos o vetor tridimensional antigo, e em (b), o novo vetor unidimensional, ambos com quantidades idênticas de memória alocada. Após esse processo, o acesso às posições do novo vetor em (b) - o qual está relacionado com as posições do vetor tridimensional em (a) - é feito por meio de um índice unidimensional. Fonte: Próprio autor. 69
4.5 A linha 1 cria um ponteiro para memória do tipo específico que se quer trabalhar, enquanto na linha 2, além da quantidade e tamanho desses espaços de memória, o comando retorna um ponteiro da memória alocada no device para vetor3D. Fonte: Próprio autor. 70

4.6 (a) Transferência *HostToDevice*. (b) Transferência *DeviceToHost*. Fonte: Próprio autor. 70
4.7 Código de execução serial. Fonte: Próprio autor. 71
4.8 Dimensionamento em 3D do processo paralelizado. Fonte: Próprio autor. 73
4.9 Código de execução paralela para o antigo laço "for". Fonte: próprio autor. 74
4.10 Ilustração da geometria do supercondutor em forma de geometria SQUID com uma constrição na lateral direita da fenda. Fonte: Próprio autor. . . . 75
4.11 Função básica para cálculo de exponencial de número do tipo cuDoubleComplex. 77
4.12 Exemplo de alocação de memória: o vetor F, utilizado para guardar o valor do parâmetro de ordem, e a variável VX, variável de ligação, são alocadas no host, enquanto dev_F e dev_VX, no device. 77
4.13 Cópia dos dados do vetor localizado no host para o respectivo vetor no device. 77
4.14 Declaração de variáveis do tipo dim3. 78
4.15 Chamada de kernel. 78
4.16 Corpo do kernel referido. 78

5.1 Magnetização versus campo aplicado. 83
5.2 Energia versus campo aplicado. 84
5.3 (a)-(c) Intensidade ψ do parâmetro de ordem; (d) Fase ϕ do parâmetro de ordem; (e) A paleta de cores ilustra a intensidade do parâmetro de ordem variando de 0 a 1. 86
5.4 (a)-(b) Perfil do campo local para os campos aplicados indicados nos painéis; (c)-(d) Respectivas densidades de correntes. 87
5.5 Intensidade do parâmetro de ordem para campos intermediários (painéis (a)-(c)) e para campo alto (painel (d)). 88

Lista de Tabelas

4.1 Tempos de execução do código para alguns valores de campo aplicado H. 79

Sumário

1 Introdução **14**
1.1 Revisão Histórica 14
1.2 O Fenômeno da Supercondutividade 18

2 Teorias Fenomenológicas da Supercondutividade **21**
2.1 Teoria Fenomenológica de London 21
2.1.1 Introdução 21
2.1.2 Primeira Abordagem da Teoria de London 22
2.1.3 Segunda Abordagem da Teoria de London 24
2.1.4 Efeito Meissner 25
2.2 Teoria Fenomenológica de Ginzburg-Landau 26
2.3 Comprimentos Característicos 31
2.3.1 Comprimento de Coerência 31
2.3.2 Comprimento de Penetração de London 33
2.3.3 Parâmetro de Ginzburg-Landau 34
2.4 Classificação dos Supercondutores 34
2.5 Estrutura de Vórtices em Supercondutores do Tipo-II 38
2.5.1 Quantização do Fluxo 38
2.5.2 Vórtice Isolado 39
2.5.3 Interação entre Vórtices 41
2.6 Supercondutividade Mesoscópica 42

3 O Método $\psi - U$ **43**
3.1 Introdução 43
3.2 Equações TDGL 43
3.3 Transformações de Calibre 45
3.4 Estado Meissner 45
3.5 Unidades Reduzidas 46
3.6 Campos Auxiliares 48
3.7 Problema a Ser Resolvido: Condições de Contorno 49
3.8 Discretização das Equações TDGL 51
3.8.1 Malha de Discretização 51
3.8.2 Definições 52

3.8.3 Aproximações para as Derivadas . . . 54
3.8.4 Discretização da Primeira Equação TDGL . . . 55
3.8.5 Discretização da Segunda Equação TDGL (Lei de Ampère) . . . 56
3.8.6 Densidade de Corrente . . . 57
3.8.7 Campo Local . . . 58
3.8.8 Condições de Contorno . . . 59
3.9 Evolução Temporal . . . 60
3.10 Algoritmo . . . 61

4 Métodos de Paralelização do Algoritmo $\psi - U$ 63
4.1 Conceitos Básicos Sobre Paralelização com Tecnologia CUDA® e Linguagem C . . . 63
4.1.1 Introdução . . . 63
4.1.2 Threads, Blocks e Grids . . . 71
4.2 Implementação da Paralelização no Método $\psi - U$ . . . 75
4.2.1 Características Gerais do Sistema Simulado . . . 75
4.2.2 Implementação da Paralelização do Método $\psi - U$ . . . 76

5 Supercondutor em Forma de um SQUID com uma Constrição 80
5.1 Introdução . . . 80
5.2 Parâmetros Utilizados e Metodologia . . . 81
5.3 Resultados e Discussão . . . 82
5.3.1 Magnetização e Energia . . . 82
5.3.2 Configurações da Rede de Vórtices . . . 84

6 Conclusões 89

7 Apêndices 91

A Cálculo dos passos de tempo 92

B Modelagem do Simulador 94

1 Introdução

1.1 Revisão Histórica

A descoberta do fenômeno da supercondutividade ocorreu quando o físico holandês Heike Kamerlingh Onnes [4] verificou, na data de 8 de abril de 1911, o que ele chamou posteriormente de supercondutividade, um fenômeno até então desconhecido aos olhos dos cientistas da época. Após conseguir liquefazer o hélio pela primeira vez em 1908, ele e seu colaborador Gilles Holst observaram três anos depois, que o mercúrio, ao ser submetido a uma temperatura abaixo de $4,2$ K por essa técnica de resfriamento, apresentava efeito Joule nulo, ou seja, a resistência do material à passagem de corrente elétrica era aproximadamente zero, e a corrente podia fluir pelo material sem apresentar nenhuma perda. Essa temperatura em que o material começava a apresentar o novo estado foi chamada, posteriormente, de temperatura de transição de fase, ou temperatura crítica T_c, sendo essa a transição entre o estado supercondutor e o estado normal. Experimentos posteriores utilizando chumbo e estanho mostraram que a supercondutividade não era apenas inerente ao mercúrio, mas a vários outros metais, sendo que cada um possui uma temperatura crítica associada. Onnes investigou também se a resistência no estado supercondutor era exatamente zero ou aproximadamente zero através de um aparato que consistia em uma corrente fluindo por um anel supercondutor. Essa análise viria a ser

repetida com maior precisão por Mills e Files, sendo constatado que essas supercorrentes tinham um tempo de vida de mais de 100000 anos. Outra característica intrínseca a esses materiais foi descrita por dois cientistas em 1933. Walter Meissner e Robert Ochsenfeld [5] notaram que no estado supercondutor esses materiais exibiam a propriedade de excluir campos magnéticos não muito intensos de seu interior, i.e., eram diamagnetos perfeitos. Essa propriedade ficou conhecida como efeito Meissner, uma das assinaturas características da supercondutividade.

Desde sua descoberta, a supercondutividade mostrou-se um desafio para diversos cientistas. Só em 1935 - aproximadamente 25 anos após a sua descoberta - dois físicos teóricos (e também irmãos), Fritz e Heinz London [6] contribuíram com a primeira teoria fenomenológica de característica macroscópica, que daria uma descrição simples e sucinta sobre o funcionamento desses materiais na condição supercondutora. Utilizando as Equações de Maxwell, a teoria era capaz de explicar como a corrente e o campo magnético atuam dentro de um supercondutor, fazendo relação com os fenômenos observados por Onnes e Meissner. Deste modo, a teoria engloba com sucesso a resistência zero e o diamagnetismo perfeito, mostrando a existência de um comprimento fundamental λ dado como a profundidade que o campo penetra no material supercondutor, o qual depende da temperatura T em que este se encontra.

Posteriormente, em 1950, surgiu uma importante teoria fenomenológica, baseada nas ideias apresentadas pelos irmãos London e inspirada pela Teoria de Landau para transições de fase de segunda ordem. Elaborada por Vitaly Ginzburg e Lev Landau, essa teoria ficou conhecida como a teoria de Ginzburg-Landau [7], conseguindo ir além em sua consistência e apresentando resultados de forma mais elegante que sua antecessora. Basicamente a teoria associa uma função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ (chamada de parâmetro de ordem) aos elétrons supercondutores e ao potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Esta teoria apresenta duas equações características, uma descrevendo a variação do parâmetro de ordem no espaço

e a outra o campo magnético local. A primeira equação contém um comprimento fundamental denominado comprimento de coerência $\xi(T)$, que denota a distância ao longo da qual o parâmetro de ordem tem uma variação significativa. Já a segunda equação é essencialmente a lei de Ampère, e também possui um comprimento fundamental denominado comprimento de penetração $\lambda(T)$. Uma das características importantes dessa teoria é que ela consegue descrever a destruição da supercondutividade através da temperatura e do campo magnético aplicado. A teoria ainda prevê a existência de dois tipos de supercondutores, simplesmente denominados tipo-I e tipo-II. A diferença básica pode ser constatada da seguinte forma: os do tipo-I apresentam uma transição de fase do estado normal para o estado supercondutor, enquanto os do tipo-II apresentam uma transição de fase do estado normal para o estado misto e, na sequência, para o estado supercondutor, onde no estado misto o material é supercondutor, mas possui regiões normais, i.e., regiões onde ocorre penetração de fluxo magnético quantizado (possibilidade proposta em 1956 pelo físico russo Alexei A. Abrikosov [8]). Se considerarmos um parâmetro adimensional denominado $\kappa = \lambda(T)/\xi(T)$, como sendo um parâmetro cujos valores abrangidos descrevem essa diferenciação, teremos que, para supercondutores tipo-I, $\left(\kappa < 1/\sqrt{2}\right)$, enquanto para supercondutores tipo-II, $\left(\kappa > 1/\sqrt{2}\right)$, demonstrando que, para o limite de $\kappa \to \infty$, a teoria de London era recuperada.

Segundo Abrikosov, haveria a possibilidade de alguns tipos de supercondutores aceitarem uma penetração de fluxo de campo magnético em seu interior, sendo que essas linhas de campo penetradas eram quantizadas e se organizavam em um arranjo ordenado, de forma que a minimização de energia prevalecesse. Esse estado, posteriormente, ficou conhecido como estado misto, coexistindo no material regiões supercondutoras e normais. Nesse estado misto, o campo magnético fica aprisionado por supercorrentes elétricas que o circundam, o que se denomina por vórtice.

Apesar da teoria de Ginzburg-Landau ter sido recebida com certa relutância pelos

cientistas da época por suas características simples, pois ela não entrava na questão de como o material se torna supercondutor, em 1959, Lev Gorkov [9] mostrou que ela poderia ser obtida como um caso particular de uma outra teoria proposta em 1957 chamada BCS (sigla abreviada dos nomes de seus contribuidores, John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer [10, 11]) que é atualmente a teoria mais conhecida que explica, do ponto de vista microscópico, como um material se torna um supercondutor.

Em meados dos anos 80, K. A. Müller e J. G. Bednorz [12] publicaram a descoberta do fenômeno supercondutor em altas temperaturas - em relação às ligas metálicas utilizadas até então - após o desenvolvimento de compostos cerâmicos à base de lantânio, bário, cobre e oxigênio. Posteriormente, M. K. Wu [13] e colaboradores desenvolveram o primeiro composto de uma família denominada YBCO, compostos por ítrio, bário, cobre e oxigênio, que podem ser resfriados através de nitrogênio líquido em substituição ao hélio líquido, já que esses compostos do tipo YBCO possuem T_c maior que as ligas de lantânio. Percebe-se, então, uma viabilização do processo geral, uma vez que a obtenção do nitrogênio líquido possui menor custo, se comparado ao hélio líquido, potencializando um maior leque de aplicações. Além disso, o nitrogênio líquido é obtido por destilação fracionada do ar líquido, enquanto o hélio geralmente está associado ao gás metano, proveniente de bolsões subterrâneos, e sua liquefação exige aumento considerável da pressão desse gás, constatando-se, também, que o rendimento, calculado em termos de energia necessária para obtenção desses dois tipos de gases, é maior no caso do nitrogênio líquido.

Não demorou muito para que os pesquisadores começassem a propor várias tecnologias novas na área, desde cabos elétricos capazes de transportar energia elétrica por longas distâncias sem apresentar perdas, até trens que levitam sobre trilhos. Outro tipo de possibilidade são supercomputadores, cujas unidades centrais de processamento são constituídas por junções Josephson [14], possibilitando a ocorrência de um tipo de dados denominado qubit e aumento significativo do poder de processamento.

1.2 O Fenômeno da Supercondutividade

A primeira característica inerente desses materiais foi descoberta por Kamerlingh Onnes ao resfriar o mercúrio a uma temperatura próxima de $4,2$ K, na qual o material supercondutor apresentava resistência elétrica de aproximadamente $10^{-6}\,\Omega$, como mostra a Figura 1.1.

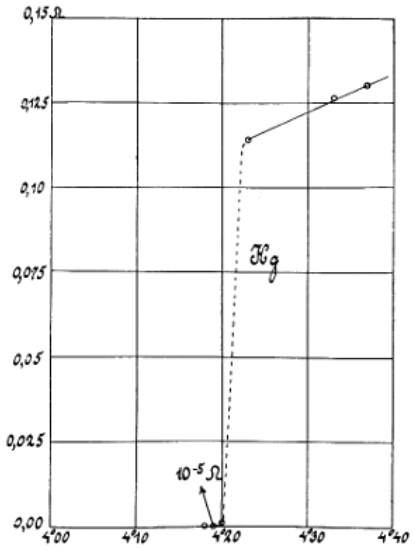


Figura 1.1: Gráfico histórico de Onnes: resistência do mercúrio sólido como função da temperatura. [1]

Esses dados ilustram a primeira observação referente ao fenômeno, sendo constatado para diversos metais e compostos intermetálicos que, a partir de uma certa temperatura crítica T_c, a resistência elétrica cai abruptamente para zero, ocorrendo,então, a transição de fase entre o estado supercondutor e o estado normal.

A segunda característica inerente a esses materiais foi descoberta por W. Meissner e R. Ochsenfeld [5], podendo ser descrita como no experimento hipotético ilustrado na Figura 1.2.

No supercondutor, a exclusão das linhas de campo no material ocorre independentemente da história magnética à qual foi submetido, ou seja, no primeiro caso o supercon-

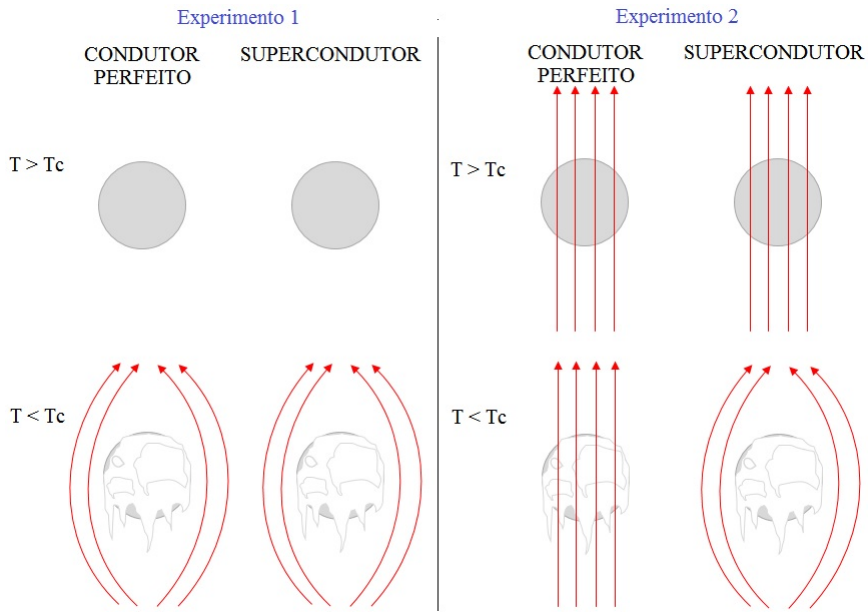


Figura 1.2: Experimentos ilustrando a diferença entre um supercondutor e um condutor perfeito. Experimento 1: amostras resfriadas sem a presença de um campo magnético aplicado. Experimento 2: amostras resfriadas na presença de um campo magnético aplicado. Fonte: Próprio autor.

dutor e o condutor hipotético perfeito são submetidos a um resfriamento e posteriormente é aplicado um campo magnético externo (não muito forte). O resultado obtido é que, independentemente do material, essas linhas de campo sempre serão expulsas. Já para o segundo caso, ambos materiais são submetidos a um resfriamento e ao mesmo tempo é aplicado um campo magnético externo que não seja muito forte, sendo verificado que apenas o supercondutor exclui as linhas de campo aplicado. O resultado dessa experiência ficou conhecida como efeito Meissner [5]. É interessante mencionar que o grau da exclusão de fluxo magnético pode depender do material ou das condições em que foi realizada a medida. Essa combinação entre resistência nula e efeito Meissner resulta em uma distinção clara entre um supercondutor e um hipotético condutor perfeito.

A terceira característica inerente a esses materiais está vinculada ao campo magnético aplicado, pois esse campo não pode ser arbitrariamente alto. O seu valor está intrinsecamente relacionado a cada valor de temperatura, fazendo uma fronteira entre o estado

supercondutor e o estado normal. Um gráfico geral para vários materiais está ilustrado na Figura **??**. Qualquer campo acima do campo crítico $H_c(T)$ leva o supercondutor para o estado normal.

A quarta característica da supercondutividade está relacionada à descontinuidade no calor específico nas proximidades da temperatura crítica T_C, dada por:

$$C_S - C_N = \mu_0 T_C \frac{dH_C}{dT}. \tag{1.1}$$

Na equação 1.1 temos que a diferença entre o calor específico no estado normal (C_N) e o calor específico no estado supercondutor (C_S) é proporcional à variação do campo magnético aplicado H_C com relação à temperatura. Assim, em uma curva $C(T)$, verifica-se uma descontinuidade do calor específico, como mostrado na Figura 1.3. Tal descontinuidade só ocorre na ausência de campo magnético, o que caracteriza a transição normal-supercondutora como de segunda ordem.

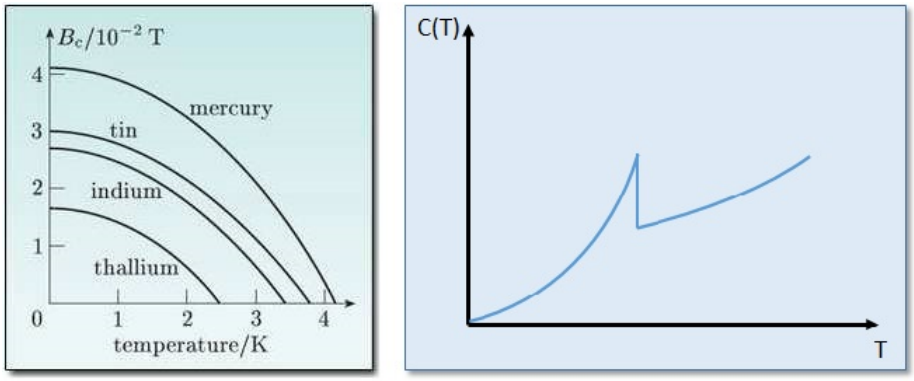


Figura 1.3: (a) Gráfico geral da dependência do campo crítico $H_c(T)$ pela temperatura para diversos materiais. [1]. (b) Curva do calor específico em função da temperatura para um material supercondutor na ausência de campo magnético, onde verifica-se uma descontinuidade. [2] (Adaptada da fonte original).

2 Teorias Fenomenológicas da Supercondutividade

2.1 Teoria Fenomenológica de London

2.1.1 Introdução

A descrição das teorias relacionadas neste capítulo teve como base os livros de Ketterson e Song [15], Parks [16] e Tinkham [17].

As assinaturas fundamentais da supercondutividade são:

(a) resistência elétrica nula abaixo de T_c;

(b) descontinuidade no calor específico próximo a T_c;

(c) efeito Meissner-Ochsenfeld;

(d) os materiais supercondutores são classificados em dois tipos: os do tipo-I e do tipo-II. Quando na presença de um campo magnético externo, os supercondutores do tipo-I apresentam apenas o estado Meissner e o estado normal, sendo que estes são delimitados por um determinado campo crítico que depende da temperatura, $H_c(T)$. Além dos estados Meissner e normal, os do tipo-II possuem mais um estado, conhecido como estado misto e caracterizado pela exclusão parcial de campo magnético. Assim, os supercondutores do tipo-II têm dois campos críticos: um campo crítico

inferior, $H_{c1}(T)$, que separa o estado Meissner do estado misto e um campo crítico superior, $H_{c2}(T)$, que separa o estado misto do estado normal.

Foram necessárias quatro décadas para que estas quatro características fossem compreendidas. As duas primeiras só podem ser explicadas em bases mecânico quânticas (teoria BCS [10]). A terceira propriedade pode ser explicada por meio de uma teoria fenomenológica combinada com o eletromagnetismo e a termodinâmica (teoria de London). Já a quarta propriedade pode ser explicada por uma combinação do eletromagnetismo com uma teoria semi-clássica (teoria de Ginzburg-Landau). Neste capítulo descreveremos as teorias de London e de Ginzburg-Landau.

2.1.2 Primeira Abordagem da Teoria de London

A primeira versão desta teoria considera o supercondutor como um condutor perfeito. Tendo como base o modelo de Drude-Lorentz, temos que a ação de um campo elétrico $\mathbf{E}$ sobre um elétron gera uma aceleração constante. Assim, a equação de movimento é dada por:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{m}{\tau}\mathbf{v} + e\mathbf{E}\ , \tag{2.1}$$

onde m é a massa dos portadores de carga (elétrons), e é a carga elementar e $\mathbf{v}$ a sua velocidade. A variável τ trata-se do tempo, medido entre uma colisão de um elétron contra um ponto da rede e a próxima colisão deste mesmo elétron contra um outro ponto qualquer. Assumindo um condutor perfeito, a contribuição do atrito tende a zero, pois $\tau \to \infty$, restando apenas o segundo termo. Considerando uma densidade de corrente supercondutora $\mathbf{J} = ne\mathbf{v}$, onde n é a densidade desses elétrons (assumida uniforme), a equação (2.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{ne^2}{m}\mathbf{E}\ . \tag{2.2}$$

A equação (2.2) é conhecida como a primeira equação de London e é equivalente à segunda lei de Newton aplicada aos elétrons do supercondutor. Partindo das leis de

Ampère (2.3) e de Faraday (2.4):

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J} \ , \tag{2.3}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \ , \tag{2.4}$$

e substituindo (2.3) em (2.2) e aplicando o rotacional ao resultado e, em seguida, usando (2.4), obtemos o seguinte resultado:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} + \frac{4\pi n e^2}{mc^2}\mathbf{B}\right) = 0 \ . \tag{2.5}$$

Com efeito, o argumento da derivada temporal é rigorosamente nulo ou uma constante. Para o momento, consideraremos a primeira hipótese[1] a qual será suficiente para explicar o estado Meissner. Temos que:

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} + \frac{4\pi n e^2}{mc^2}\mathbf{B} = 0 \ . \tag{2.6}$$

A constante que aparece na equação 2.6 tem unidades de inverso de quadrado de comprimento, e é denominada por:

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi n e^2} \ , \tag{2.7}$$

onde λ é conhecido como comprimento de penetração de London. Assim, podemos escrever que:

$$\lambda^2 \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} + \mathbf{B} = 0 \ . \tag{2.8}$$

A equação (2.8) é conhecida como a segunda equação de London. Conforme veremos adiante, essa equação nos fornece informação a respeito do diamagnetismo dos materiais supercondutores, mostrando que o campo magnético não pode penetrar no interior do supercondutor além de uma camada superficial de espessura λ.

[1] O lado direito da equação 2.3 é considerada nula. Este argumento é suficiente para descrever a penetração superficial do campo magnético. Posteriormente veremos que esta equação não é nula quando existir nucleação de vórtices no supercondutor.

2.1.3 Segunda Abordagem da Teoria de London

A segunda abordagem proposta pelos irmãos London é baseada em um modelo de dois fluidos. O modelo de dois fluidos parte da ideia de que um deles é um fluido sem viscosidade (superfluido) e o outro, um fluido com viscosidade finita (fluido normal). Assumindo que a energia livre associada aos dois fluidos pode ser dividida em três contribuições, podemos escrever:

$$F = F_N + F_{Kin} + F_{Mag} \ , \tag{2.9}$$

onde F_N é a energia do fluido no estado normal, F_{Kin} é a energia cinética do fluido em movimento e F_{Mag} a energia armazenada pelo campo magnético. As segunda e terceira contribuições são dadas por:

$$F_{Kin} = \int \frac{1}{2}\rho\left(\mathbf{r}\right) v^2 \, d^3r \ , \tag{2.10}$$

e

$$F_{Mag} = \frac{1}{8\pi}\int \mathbf{B}\left(\mathbf{r}\right)\cdot\mathbf{B}\left(\mathbf{r}\right) \, d^3r \ , \tag{2.11}$$

onde $\rho\left(\mathbf{r}\right)$ é a densidade específica referente ao superfluido. Tomando $\rho = nm$, $\mathbf{v} = \frac{1}{ne}\mathbf{J}$ e utilizando a Lei de Ampère (2.3), podemos rearranjar a equação (2.10) da seguinte forma:

$$F_{Kin} = \frac{1}{8\pi}\int \lambda^2 \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B}\, d^3r \ . \tag{2.12}$$

Somando todas as contribuições para a energia livre, obtemos:

$$F = F_N + \frac{1}{8\pi}\int \left[\mathbf{B}\cdot\mathbf{B} + \lambda^2\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B}\right] \, d^3r \tag{2.13}$$

Podemos obter a equação de London (2.8) tratando $\mathbf{B}$ variacionalmente substituindo o funcional de (2.13) na equação de Euler:

$$\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\mathbf{B}} + \boldsymbol{\nabla}\times\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{B}} = 0 \ . \tag{2.14}$$

2.1.4 Efeito Meissner

Consideremos o caso simples de um supercondutor semi-infinito, onde, em $x > 0$, esteja o supercondutor, e fora (em $x < 0$), consideremos que seja o vácuo. Ao imergirmos o mesmo em um campo magnético $\mathbf{H}$ paralelo ao plano yz, teríamos $\mathbf{B} = (0, 0, B_z(x))$ em seu interior e, fora dele, $\mathbf{B} = H\mathbf{k}$, onde H é o campo magnético externo aplicado. Tendo em vista as considerações, a segunda equação de London pode ser escrita como:

$$\frac{d^2 B_z}{dx^2} - \frac{1}{\lambda^2} B_z = 0 \ , \tag{2.15}$$

onde usamos a identidade vetorial $\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}) = \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}) - \boldsymbol{\nabla}^2 \mathbf{B}$, e a equação de Maxwell $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0$. A solução desta equação é dada por:

$$\mathbf{B}(x) = H e^{-x/\lambda} \quad \mathbf{k} \ . \tag{2.16}$$

A Figura 2.1 ilustra este resultado onde vemos claramente que o campo magnético local penetra em uma distância λ superfície adentro do material.

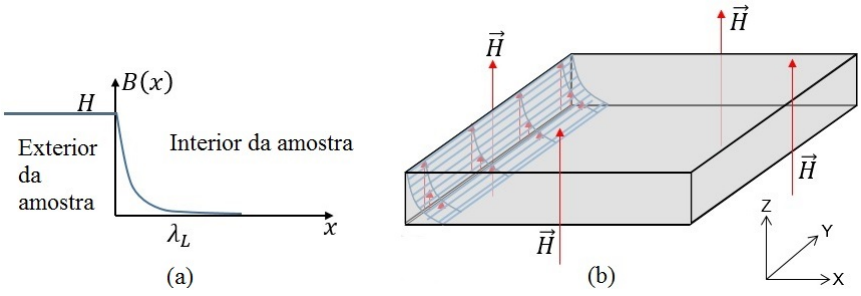


Figura 2.1: (a) Perfil do campo magnético local em um supercondutor semi-infinito na presença de uma campo aplicado. Note que, na fronteira, $B_z(0) = H$. (b) Superfície curva demonstrando a penetração de campo na direção do eixo x. Fonte: Próprio autor.

Substituindo o campo magnético local na lei de Ampère-Maxwell (2.3) encontramos a seguinte expressão para a densidade de corrente induzida:

$$\mathbf{J} = \frac{c}{4\pi\lambda} H e^{-x/\lambda} \quad \mathbf{j} \tag{2.17}$$

Essa equação nos permite visualizar como o campo magnético externo é impedido de entrar no interior do supercondutor, sendo esta conhecida também como corrente de blindagem.

Deste modo, a teoria de London consegue descrever, para temperaturas abaixo de T_c, o caráter diamagnético perfeito de um material supercondutor e a penetração superficial de campo magnético. Vale lembrar, ainda, que diferentemente da teoria de Ginzburg-Landau, a teoria de London não descreve a maneira como podem surgir os vórtices, de modo que, para fins de cálculos de minimização de energia - considerando esse fator e a teoria de London - é necessário, primeiramente, considerar a presença do vórtice no interior do material e, na sequência, proceder com a minimização de energia.

2.2 Teoria Fenomenológica de Ginzburg-Landau

Embora muito tempo depois da supercondutividade ter sido descoberta, não havia, ainda, uma explicação satisfatória do ponto de vista microscópico com bases mecânico quânticas. Vitaly Lazarevich Ginzburg e Lev Davidovich Landau propuseram uma teoria semi-clássica que era capaz de descrever o fenômeno. Ginzburg e Landau notaram que a transição do estado supercondutor nas proximidades da temperatura crítica T_c, podia ser descrita em termos da teoria de Landau para transições de fase de segunda ordem baseada em um parâmetro de ordem. Esse parâmetro apresenta um comportamento equivalente à magnetização estudada na teoria de Landau (podendo ser tratado como um fenômeno quântico macroscópico) se anulando na fase desordenada $(T > T_c)$ ou sendo diferente de zero na fase ordenada $(T < T_c)$.

Na sequência, iremos partir da magnetização estudada na teoria de Landau para posteriormente fazermos analogia com a supercondutividade.

Para a magnetização, o ponto de transição de fase é chamado de temperatura de Curie T_c, sendo $\mathbf{M}$ diferente de zero abaixo dessa temperatura. Landau observou que o valor da

magnetização era pequeno perto da transição de fase e apresentava variações suaves no espaço até zero, de modo que a função poderia ser considerada contínua. A partir dessa observação, a energia livre poderia ser escrita em uma série de potências da magnetização:

$$F = F_0 + \alpha M^2 + \frac{\beta}{2} M^4 \ , \tag{2.18}$$

onde F_0 é a energia para a magnetização igual a zero. Olhando para (2.18) nota-se que a constante β é responsável pela concavidade da curva gerada pela função e que, se seu valor for negativo, a energia será mínima para um valor arbitrariamente alto de magnetização, fato esse que acarretaria em divergência. Portanto, o valor de β deve ser positivo para que possamos ter um valor finito de energia mínima, gerando os gráficos (c) e (d) da Figura 2.2. O mesmo já não ocorre para a constante α, que pode assumir tanto valores positivos quanto valores negativos, sendo α responsável pelas formas que a curva da função (2.18) pode assumir, não implicando em divergência. Assim, temos que:

- se $\alpha > 0$, o mínimo ocorre em $M = 0$;
- se $\alpha < 0$, o mínimo ocorre em $M \neq 0$.

Na sequência, precisamos relacionar o parâmetro de ordem com a temperatura para termos uma transição de fase de segunda ordem. Ainda, devemos considerar que o valor de α deve ser negativo para termos um mínimo de magnetização diferente de zero, conforme ilustrado na Figura 2.2 (d). Assim, uma relação para α que satisfaz estes requisitos pode ser escrita como:

$$\alpha(T) = \begin{cases} \alpha_0(T - T_c) \ , & \text{para } T < T_c \ , \\ 0 \ , & \text{para } T \geq T_c \ , \end{cases} \tag{2.19}$$

onde α_0 é uma constante positiva.

Os valores de M que correspondem aos mínimos de energia podem ser obtidos por meio da equação:

$$\frac{\partial F}{\partial M} = [\alpha(T) + \beta M^2] M = 0. \tag{2.20}$$

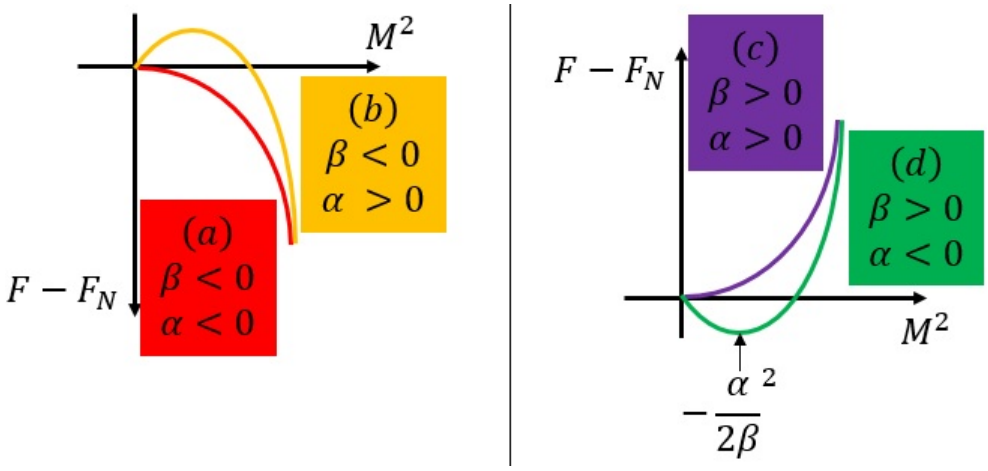


Figura 2.2: Perfis da energia livre. Em (a), (b) e (c), esses perfis não satisfazem a teoria de Landau de transições de fase de segunda ordem, enquanto em (d), a teoria é satisfeita, com mínimo ocorrendo em $M \neq 0$, indicado pela seta apontada sobre a curva de cor verde. Fonte: Próprio autor.

Resolvendo a equação 2.20 obtemos duas soluções:

$$\begin{aligned} &\alpha > 0 \Rightarrow M^2 = 0 && \text{para} \quad T \geq T_c \,, \\ &\alpha \leq 0 \Rightarrow M^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{\alpha_0(T - T_c)}{\beta} && \text{para} \quad T < T_c \,. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Notamos em (2.21) que, conforme a temperatura aumenta, o módulo de M diminui até se anular em $T = T_c$. Ginzburg e Landau adotaram esta mesma ideia utilizada na teoria de transição de fase de Landau, agora, no contexto da supercondutividade. Assim, o parâmetro de ordem $\psi(\mathbf{r})$, uma função de onda complexa, tal que o quadrado de seu módulo representa a densidade de pares de Cooper [11] $n_s(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = \bar{\psi}\psi$, foi utilizada em substituição de M^2. Ela é interpretada como uma função de onda dos portadores de carga do supercondutor e a densidade de pares de Cooper, $n_s(\mathbf{r})$, não necessariamente é homogênea no espaço (como no caso da teoria de London). Semelhantemente à magnetização da teoria de Landau, o parâmetro de ordem é tomado com valores pequenos perto da transição de fase e com variações suaves no espaço até zero, de modo que a energia livre possa ser expandida em uma série de potências do $|\psi(\mathbf{r})|^2$ e do potencial vetor $\mathbf{A}$.

Portanto, podemos escrever:

$$F = F_0 + \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 \ . \tag{2.22}$$

Minimizando com relação a $\bar{\psi}$, encontramos:

$$\begin{aligned} &\alpha > 0 \Rightarrow |\psi|^2 = 0 \qquad\qquad\qquad\qquad \text{para} \quad T > T_c \ , \\ &\alpha \leq 0 \Rightarrow |\psi|^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{\alpha_0(T - T_c)}{\beta} \ \text{para} \quad T \leq T_c \ . \end{aligned} \tag{2.23}$$

Devido às características de inomogeneidade do estado supercondutor, a quantidade F pode ser tratada como energia livre e ser escrita da seguinte forma:

$$F = F_0 + \int \mathscr{F}_C[\psi(\mathbf{r})]\, d^3r \ , \tag{2.24}$$

onde F_0 corresponde à energia do estado normal, e $\mathscr{F}_C = \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4$, a energia do condensado.

Efeitos relacionados ao comprimento de coerência[2] não estão sendo levados em consideração na equação acima, ou seja, isso significa que não está sendo considerado um aumento de energia em relação a uma distorção espacial no parâmetro de ordem. Ginzburg e Landau consideraram esses efeitos e fizeram uma pequena correção na relação acima, acrescentando um termo que seria o gradiente do parâmetro de ordem:

$$\mathscr{F}_G = \frac{\hbar^2}{2m^*}|\nabla\psi|^2 \ , \tag{2.25}$$

onde o termo $\hbar^2/2m^*$ seria o termo associado à energia cinética na mecânica quântica e m^* a massa efetiva do par de Cooper.

A fim de levar em conta efeitos de aplicação de um campo magnético externo, Ginzburg e Landau acrescentaram na equação (2.25) o momento linear cinético:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{e^*}{c}\mathbf{A} \ . \tag{2.26}$$

[2]Este comprimento fundamental da teoria de Ginzburg-Landau será posteriormente estudado em maiores detalhes.

onde e^* é a carga efetiva do par de Cooper e $\mathbf{A}$ é o potencial vetor, que se relaciona com o campo local por meio da equação $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$.

Introduzindo esta modificação na equação (2.25), temos que:

$$\mathscr{F}_G = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left(\boldsymbol{\nabla} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \psi \right|^2 . \tag{2.27}$$

Por fim, é considerada a contribuição do campo magnético para a densidade de energia como se segue:

$$\mathscr{F}_B = \frac{1}{8\pi} B^2(\mathbf{r}) , \tag{2.28}$$

Portanto a energia total pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} F &= F_0 + \int \left(\mathscr{F}_C + \mathscr{F}_G + \mathscr{F}_B \right) d^3r \\ &= F_0 + \int \left\{ \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left[\boldsymbol{\nabla} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right] \psi \right|^2 + \frac{1}{8\pi} B^2 \right\} d^3r . \end{aligned} \tag{2.29}$$

Para minimizar o funcional de energia livre em (2.29) com relação a $\bar{\psi}$ e $\mathbf{A}$, podemos utilizar as equações de Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \bar{\psi}} - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial (\boldsymbol{\nabla} \bar{\psi})} \right] &= 0 , \\ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbf{A}} - \boldsymbol{\nabla} \times \left[\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})} \right] &= 0 . \end{aligned} \tag{2.30}$$

De posse das relações acima, podemos finalmente escrever as duas equações de Ginzburg-Landau:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\boldsymbol{\nabla} - \frac{ie^*}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + \alpha \psi + \beta |\psi|^2 \psi = 0 , \tag{2.31}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = \frac{e^*}{2m^*} \left[\bar{\psi} \left(-i\hbar \boldsymbol{\nabla} - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi + \psi \left(+i\hbar \boldsymbol{\nabla} - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \bar{\psi} \right] . \tag{2.32}$$

O membro direito da segunda equação de Ginzburg-Landau (2.32) também pode ser escrito como:

$$\mathbf{J}_s = \frac{e^*}{m^*} \mathrm{Re} \left[\bar{\psi} \left(\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right] , \tag{2.33}$$

onde $\mathbf{J}_s$ é a chamada de densidade de corrente supercondutora. Assim, a equação (2.32) nada mais é do que a lei de Ampère $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}_s$.

2.3 Comprimentos Característicos

No contexto da teoria de Ginzburg-Landau, existem duas escalas de comprimentos fundamentais. O primeiro deles, é o comprimento de coerência $\xi(T)$, cujo valor é a variação espacial do parâmetro de ordem. O segundo é o comprimento de penetração de London, $\lambda(T)$, responsável pela variação do campo magnético no interior do supercondutor. No que segue, mostramos que estes comprimentos são inerentes à teoria de Ginzburg-Landau.

2.3.1 Comprimento de Coerência

Consideraremos para esta primeira análise um caso envolvendo uma inomogeneidade do parâmetro de ordem gerada pela presença de um contorno, na ausência de campos e correntes. Tomamos um supercondutor semi-infinito preenchendo o espaço $x > 0$, e escrevemos a primeira equação de Ginzburg-Landau (2.31) em sua forma unidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\psi + \beta\psi^3 = 0\ , \tag{2.34}$$

onde consideramos ψ real.

Para o estado supercondutor a constante α é negativa, então podemos escrever $\alpha = -|\alpha|$. Substituindo na equação anterior, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dx^2} - |\alpha|\psi + \beta\psi^3 = 0. \tag{2.35}$$

É mais conveniente escrever o parâmetro de ordem na forma adimensional por meio da transformação: $\psi = \sqrt{|\alpha|/\beta}f$, onde $\alpha|/\beta$ é dado na equação (2.23). Além disso, tendo em vista que trata-se de uma amostra semi-infinita, utilizamos as seguintes condições de contorno: para $x \to \infty$, a função $f^2 \to 1$, pois em uma posição longe da fronteira a amostra é perfeitamente supercondutora, e ainda, para $x \to \infty$, podemos também considerar

$f' = df/dx \to 0$. Assim, dadas tais condições, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}\frac{d^2f}{dx^2} - f + f^3 = 0 \ , \tag{2.36}$$

onde o coeficiente da derivada segunda tem unidades de quadrado de comprimento e é conhecido como comprimento de coerência:

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|} \ . \tag{2.37}$$

Na sequência iremos multiplicar a equação (2.36) por f', integrar seu resultado e, em seguida, derivar com relação a x, obtendo:

$$\frac{d}{dx}\left[-\frac{\xi^2(f')^2}{2} - \frac{f^2}{2} + \frac{f^4}{4}\right] = 0 \ . \tag{2.38}$$

Consequentemente, temos que:

$$-\frac{\xi^2(f')^2}{2} - \frac{f^2}{2} + \frac{f^4}{4} = C \ . \tag{2.39}$$

Usando as condições de contorno, encontramos que $C = -1/4$. Com efeito,

$$\xi^2(f')^2 = \frac{1}{2}(1 - f^2)^2 \ , \tag{2.40}$$

que resolvida por integração direta nos fornece a seguinte relação:

$$f = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) \ . \tag{2.41}$$

A Figura 2.3 mostra a variação do parâmetro de ordem nas vizinhanças da interface metal-supercondutor conforme a equação (2.41).

Finalmente, podemos obter a relação do comprimento de coerência com a temperatura. Uma vez que $\alpha(T) = -\alpha_0 T_c[1 - (T/T_c)]$, substituindo na equação (2.37) encontramos:

$$\begin{aligned}\xi(T) &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*\alpha_0 T_c}}\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2} \\ &= \xi(0)\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2} \ .\end{aligned} \tag{2.42}$$

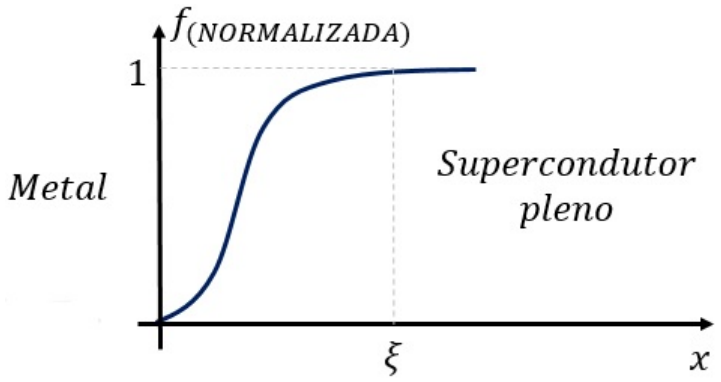


Figura 2.3: Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem próximo à interface metal-supercondutor. Após o comprimento ξ, o material encontra-se no estado supercondutor com valor máximo de parâmetro de ordem.

2.3.2 Comprimento de Penetração de London

Para esta segunda análise, com fins de encontrarmos o valor do comprimento de penetração de London, utilizaremos outras condições de contorno, quais sejam: admitir a existência de um campo magnético aplicado, mas uma variação espacial desprezível do módulo do parâmetro de ordem. Em outras palavras, assumiremos que $n_s = |\psi|^2 = |\alpha|/\beta$ em todo espaço. A partir dessas considerações, a equação (2.33) para densidade de corrente supercondutora torna-se:

$$\mathbf{J}_s = -\frac{(e^*)^2}{m^* c}|\psi|^2 \mathbf{A}. \tag{2.43}$$

Usando a lei de Ampère $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}_s$, e substituindo esta na equação (2.43), encontramos:

$$\frac{m^* c^2 \beta}{4\pi (e^*)^2 |\alpha|}\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} = 0. \tag{2.44}$$

Por fim, aplicando o rotacional a ambos os lados da equação (2.44), encontramos:

$$\lambda^2 \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} + \mathbf{B} = 0 \tag{2.45}$$

Esta equação nada mais é do que a segunda equação de London, com a diferença de

que, agora, o comprimento de penetração depende da temperatura e é escrito como segue:

$$\begin{aligned}\lambda^2(T) &= \frac{m^* c^2 \beta}{4\pi (e^*)^2 |\alpha|} \\ &= \frac{m^* c^2 \beta}{4\pi (e^*)^2 |\alpha|} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1} \\ &= \lambda^2(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1} . \end{aligned} \tag{2.46}$$

2.3.3 Parâmetro de Ginzburg-Landau

Embora os comprimentos fundamentais dependam da temperatura, a razão entre eles resulta em uma constante que independe de T. Esta constante é conhecida como parâmetro de Ginzburg-Landau, e é dada por:

$$\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} = \frac{\lambda(0)}{\xi(0)} = \frac{m^* c}{e^* \hbar} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} . \tag{2.47}$$

O valor κ é de grande importância na teoria de Ginzburg-Landau no que diz respeito à classificação dos materiais supercondutores. Discutiremos este ponto em maiores detalhes na próxima seção.

2.4 Classificação dos Supercondutores

A classificação dos supercondutores pode ser feita dependendo de seu comportamento na presença de um campo magnético externo aplicado. Esta divisão é baseada no fato de que a energia de superfície é proporcional à diferença $(\xi - \lambda)$, considerando a fronteira entre um supercondutor e um material normal. Cálculos aproximados mostram que a diferença entre a energia do supercondutor e a do material normal é dada por $\gamma = \frac{\alpha^2}{2\beta}(\xi - \lambda)$. Sendo assim, se $\xi > \lambda$, a energia superficial é sempre positiva, indicando que o material supercondutor não é propenso à formação de domínios normais, permanecendo no estado Meissner até um determinado campo crítico, acima do qual se torna normal. Por outro

lado, se $\xi < \lambda$, a energia superficial é negativa, e o supercondutor é propenso à formação de domínios normais em seu interior, e o fluxo magnético penetra em pequenos tubos (vórtices) em quantidades quantizadas de fluxo dadas por $\Phi_0 = hc/2e = 2,07 \times 10^{-7}\,\mathrm{G}\cdot\mathrm{cm}^2$. No primeiro caso, classificamos o supercondutor como sendo do tipo-I, e na segunda situação como sendo do tipo-II. Cálculos mais exatos mostram que materiais do tipo-I exibem $\kappa < 1/\sqrt{2}$, enquanto materiais do tipo-II exibem $\kappa > 1/\sqrt{2}$. A Figura 2.4 ilustra os perfis de campo e parâmetro de ordem para ambos os tipos de supercondutor.

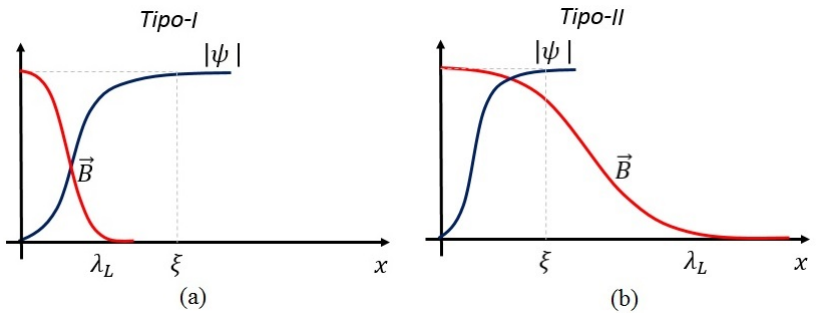


Figura 2.4: Representação esquemática de perfis de campo e de parâmetro de ordem para supercondutores do tipo-I e II, onde a configuração em (b) permite a formação de um vórtice, enquanto a configuração em (a) não. Fonte: Próprio autor.

Os supercondutores do tipo-I de dimensões muito maiores que os comprimentos fundamentais ξ e λ permanecem no estado Meissner para campos aplicados até atingir o campo crítico termodinâmico $H_c(T)$ dado por:

$$H_c(T) = \frac{\Phi_0}{2\sqrt{2}\pi\lambda(T)\xi(T)} \,. \tag{2.48}$$

Neste estado de diamagnetismo perfeito todo campo magnético é expelido do interior da amostra. Acima de $H_c(T)$ a supercondutividade não se mantém e a amostra vai para o estado normal (ver Figura 2.5).

Supercondutores do tipo-II, também de dimensões muito maiores que os comprimentos fundamentais, permanecem no estado Meissner para campos menores que o primeiro

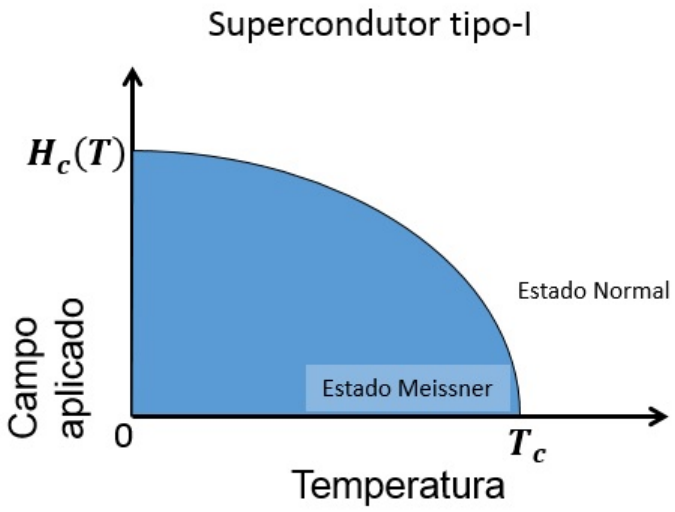


Figura 2.5: Diagrama de fase de um supercondutor do tipo-I. Fonte: Próprio autor.

campo crítico $H_{c1}(T)$, cuja expressão é dada por:

$$H_{c1}(T) = \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2(T)} \ln\kappa \ . \tag{2.49}$$

Para campos maiores que $H_{c1}(T)$, vórtices começam a nuclear no supercondutor, até que a densidade destes torna-se muito alta, a ponto de destruir a supercondutividade. Este valor de H é conhecido como segundo campo crítico, dado por:

$$H_{c2}(T) = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2(T)} \ . \tag{2.50}$$

A região $H_{c1}(T) < H < H_{c2}(T)$ é conhecida como estado misto, onde as regiões normal e supercondutora coexistem no interior do material. Para $H = H_{c2}(T)$ a supercondutividade é destruída, mas ainda há regiões supercondutoras remanescentes em um fina camada próxima à superfície do material. Aumentando-se o campo aplicado H até atingir o terceiro campo crítico $H_{c3}(T)$, a supercondutividade é então totalmente suprimida. Para um supercondutor semi-infinito, $H_{c3}(T) = 1.69H_{c2}(T)$. Já para um filme com o campo aplicado paralelamente ao plano do filme, $H_{c3}(T) = 2H_{c2}(T)$.

Do ponto de vista experimental, as diferentes fases de um supercondutor podem ser

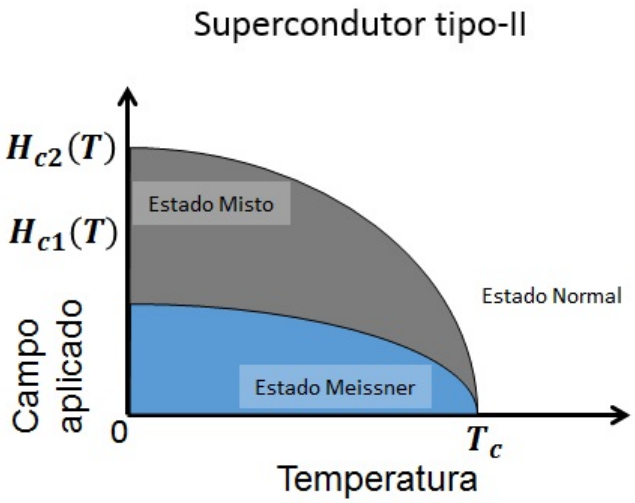


Figura 2.6: Diagrama de fase de um supercondutor do tipo-II. Fonte: Próprio autor.

identificadas por meio da medida da magnetização do estado de equilíbrio. Desprezando efeitos de desmagnetização[3], podemos escrever:

$$\mathbf{M} = \frac{\bar{\mathbf{B}} - \mathbf{H}}{4\pi} \ . \tag{2.51}$$

onde $\bar{\mathbf{B}}$ é a indução magnética média[4].

A Figura 2.7 (a) mostra a magnetização, $-\mathbf{M}$, como função do campo aplicado, $\mathbf{H}$, para um supercondutor do tipo-I. No estado de Meissner o fluxo é expelido ($\bar{\mathbf{B}} = 0$) do interior da amostra, de tal modo que $-\mathbf{M} = \mathbf{H}/4\pi$ tendo um comportamento linear com o campo aplicado. Tão logo o campo aplicado alcance o valor de $H_c(T)$, a magnetização decai abruptamente para zero (ver Figura 2.7).

A Figura 2.7 (b) exibe a magnetização de um supercondutor do tipo-II. No intervalo $H < H_{c1}(T)$ temos o estado de Meissner completo ($\bar{\mathbf{B}} = 0$). Acima do primeiro campo crítico $H_{c1}(T)$ observa-se penetração parcial de fluxo magnético ($\bar{\mathbf{B}} \neq 0$) até atingir um campo crítico superior $H_{c2}(T)$, valor a partir do qual o material volta ao estado normal

[3]Provocados pela curvatura das linhas de campo magnético em torno do supercondutor.
[4]Média espacial do campo local $\mathbf{B}$.

anulando a magnetização ($\bar{\mathbf{B}} = \mathbf{H}$).

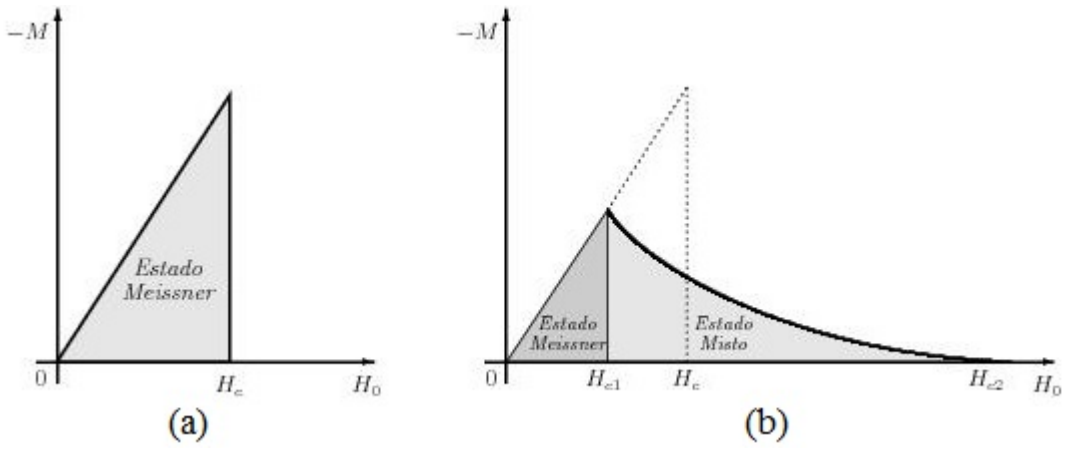


Figura 2.7: (a) Magnetização de um supercondutor do tipo-I e (b) Magnetização de um supercondutor do tipo-II, ambos em função do campo aplicado H. A linha tracejada representa um supercondutor do tipo-I. Fonte: Dissertação de Mestrado de Mauro César Vieira Pascolati. Unesp Bauru/POSMAT - Ano 2010.

2.5 Estrutura de Vórtices em Supercondutores do Tipo-II

2.5.1 Quantização do Fluxo

A quantização do fluxo pode ser facilmente determinada por meio da segunda equação da densidade de corrente (2.33), a qual pode ser escrita introduzindo o parâmetro de ordem em termos de sua magnitude e fase, $\psi = |\psi|e^{i\phi}$:

$$\mathbf{J}_s = \frac{2e\hbar}{m^*}|\psi|^2\boldsymbol{\nabla}\phi - \frac{4e^2}{m^*c}\mathbf{A}|\psi|^2 \ . \tag{2.52}$$

Esta equação também pode ser reescrita na forma:

$$\mathbf{A} = \frac{\hbar c}{2e}\boldsymbol{\nabla}\phi - \frac{m^*c\mathbf{J}_s}{4e^2|\psi|^2} \ . \tag{2.53}$$

Agora, usando o teorema de Stokes, vem que:

$$\oint_C \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} = \int_S \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}\cdot\mathbf{n}dS = \int_S \mathbf{B}\cdot\mathbf{n}dS = \Phi \ , \tag{2.54}$$

onde S é uma superfície bilateral restrita ao caminho fechado C. Assim, integrando o potencial vetor da equação (2.53), encontramos:

$$\frac{\hbar c}{2e}\oint_C \boldsymbol{\nabla}\phi \cdot d\mathbf{r} - \frac{m^* c}{4e^2}\oint_C \frac{\mathbf{J}_s}{|\psi|^2}\cdot d\mathbf{r} = \Phi. \tag{2.55}$$

Uma vez que a fase ϕ do parâmetro de ordem complexo é uma função unívoca (em inglês, *single-values function*), isto impõe que a fase deve mudar em valores de múltiplos inteiros de 2π em um círculo fechado C. Esta condição é conhecida como quantização de Bohr-Sommerfeld. Assim, temos que:

$$\Phi = n\frac{hc}{2e} - \frac{m^* c}{4e^2}\int_C \frac{\mathbf{J}}{|\psi|^2}\cdot d\mathbf{r}. \tag{2.56}$$

onde n é um número inteiro e conhecido como número quântico de fluxóide e $hc/2e = \Phi_0$ é o quantum de fluxo magnético. Desconsiderando a penetração superficial de fluxo, é possível encontrarmos um caminho C tal que a integral na equação (2.55) se anule. Assim, temos que:

$$\Phi = n\frac{hc}{2e} = n\Phi_0\ , \tag{2.57}$$

A equação (2.57) mostra que o fluxo penetrado no supercondutor é quantizado.

2.5.2 Vórtice Isolado

Conforme mencionamos anteriormente, em supercondutores do tipo-II, para $H > H_{c1}(T)$, vórtices penetram no interior do material. Cada vórtice tem um núcleo constituído de material predominantemente normal de raio $\xi(T)$, distância na qual a densidade supercondutora de superelétrons decai a zero no seu centro (ver Figura 2.8). Já o campo local $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ é máximo no centro do vórtice, e decai monotonicamente em uma distância $\lambda(T)$ devido às supercorrentes de blindagem $\mathbf{J}_s(\mathbf{r})$ ao redor do núcleo. Supondo que a separação entre os vórtices seja grande se comparada com $\lambda(T)$, a superposição das supercorrentes é desprezível. Assim, podemos desconsiderar a interação entre os vórtices. Neste limite, podemos considerar o vórtice como um objeto isolado, e $|\psi|$ pode ser considerada como

uma constante em todo espaço, exceto no centro do núcleo. Contudo, a variação espacial da fase será considerada. Considerando, ainda, a lei de Ampère (2.3) e a expressão da densidade de corrente supercondutora (2.33), e usando a condição topológica da fase [5], vem:

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla}\phi = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}) \ , \tag{2.58}$$

obtemos a equação de London:[6]

$$-\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} + \mathbf{B} = \mathbf{k}\Phi_0 \delta(\mathbf{r}) \ . \tag{2.59}$$

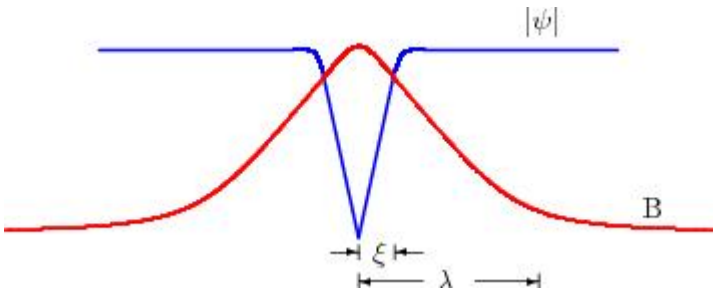


Figura 2.8: Estrutura de um vórtice. Fonte: Dissertação de Mestrado de Mauro César Vieira Pascolati. Unesp Bauru/POSMAT - Ano 2010.

A solução exata da equação (2.59) pode ser obtida por meio da técnica da transformada de Fourier. A solução é dada por:

$$\mathbf{B} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0(r/\lambda)\mathbf{k} \ , \tag{2.60}$$

onde $K_0(x)$ é função de Bessel [18, 19] modificada de ordem zero; K_0 decresce como $(\sqrt{\pi\lambda/2r})e^{-r/\lambda}$ para $r \ll \lambda$ e diverge logaritmicamente como $\ln(\lambda/r)$ para $r \to 0$. Usando a lei de Ampère (2.3) na equação (2.60), obtemos a densidade de corrente que flui ao redor do vórtice:

$$\mathbf{J}_s = \frac{c\Phi_0}{4\pi^2\lambda^2} K_1(r/\lambda)\boldsymbol{\theta} \ , \tag{2.61}$$

[5] Ocorrência de entrada de um quantum de fluxo a cada mudança 2π da fase

[6] Conforme havíamos observado no rodapé da página 23, o lado direito da equação (2.8) corresponde justamente a esta singularidade da fase do parâmetro de ordem.

onde K_1 é a função de Bessel modificada de primeira ordem a qual diverge como $1/r$ para $r \to 0$, e daí, como $(\sqrt{\pi\lambda/2r})e^{-r/\lambda}$ para $r \ll \lambda$. É possível ainda determinar a energia livre (por unidade de comprimento l do sistema) de um vórtice isolado resultando em:

$$\frac{F}{L} = \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \ln\kappa \ . \tag{2.62}$$

Como podemos observar, a energia depende do quadrado de Φ_0. Assim, não é favorável a nucleação de vórtices com mais de um quantum de fluxo.

2.5.3 Interação entre Vórtices

Consideremos, agora, um conjunto de vórtices, cada qual na posição $\{\mathbf{r}_i \ , \ i = 1, \ldots, N\}$. A equação de London (2.59) então pode ser escrita como:

$$-\lambda^2\nabla^2\mathbf{B} + \mathbf{B} = \Phi_0 \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\mathbf{k} \ . \tag{2.63}$$

Usando técnicas de transformada de Fourier, podemos mostrar que a solução desta equação é dada por:

$$\mathbf{B} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \sum_{i=1}^{N} K_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|/\lambda)\mathbf{k} \ . \tag{2.64}$$

Substituindo este resultado na energia livre de London (2.13) encontramos:

$$\frac{F}{L} = \frac{F_N}{L} + \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} K_0(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\lambda) \ . \tag{2.65}$$

Nesta equação estão contabilizadas tanto as autoenergias de cada vórtice individualmente, como a energia de interação entre eles. Em 1957, foi primeiramente demonstrado por Abrikosov que as posições dos vórtices que minimizam a energia de interação entre eles corresponde a uma rede triangular conforme ilustrado na Figura 2.9. A presente análise restringe-se ao caso em que os vórtices estão suficientemente distantes um do outro. Em outras palavras, o limite de campo aplicado de validade é $H_{c1}(T) < H \ll H_{c2}(T)$. Abrikosov também mostrou que esta rede é a que minimiza a energia livre para campos

próximos de $H_{c2}(T)$. As previsões teóricas de Abrikosov foram posteriormente comprovadas experimentalmente usando-se técnicas de decoração magnética com o auxílio de microscopia eletrônica.

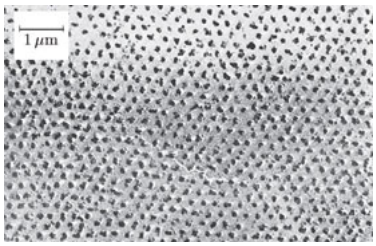


Figura 2.9: Rede de vórtices de Abrikosov: perfil do campo local. Experimento com material supercondutor, onde partículas ferromagnéticas foram aplicadas à superfície deste material, permanecendo nesta configuração. As regiões mais escuras correspondem aos valores mais altos de campo (região normal), enquanto as regiões mais claras, aos valores mais baixos de campo (região supercondutora)[1].

2.6 Supercondutividade Mesoscópica

Denominamos por mesoscópico os materiais supercondutores com tamanho da ordem de $\lambda(T)$ e/ou $\xi(T)$. As propriedades eletrônicas e estruturais da rede de vórtices nestes materiais são consideravelmente influenciadas pelos efeitos de confinamento. Com efeito, a nucleação do estado de vórtices depende fortemente das condições de contorno impostas ao material, isto é, da topologia do sistema. Tem-se observado que a matéria de vórtices comporta-se de maneira muito diferente da mesma em supercondutores de dimensões macroscópicas. Nos supercondutores mesoscópicos há uma competição entre a rede de vórtices triangular de Abrikosov e a geometria da amostra. Tem sido observado também que é possível a ocorrência de vórtices gigantes (um vórtice com vorticidade superior a um). Do ponto de vista teórico, os sistemas mesoscópicos têm sido estudados resolvendo-se as equações de Ginzburg-Landau numericamente. No próximo capítulo iremos desenvolver um algoritimo de solução numérica destas equações e, posteriormente, iremos aplicá-lo para estudar um supercondutor de geometria SQUID com uma constrição.

3 O Método $\psi - U$

3.1 Introdução

Neste Capítulo apresentamos um método de discretização das equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo (TDGL, *time dependent Ginzburg-Landau*). Em primeiro lugar, escreveremos estas equações em unidades arbitrárias por meio de um sistema de unidades reduzidas. O segundo passo será introduzir nas equações TDGL os campos auxiliares [20, 21], os quais tornam a primeira destas equações muito semelhante à equação de difusão. Finalmente, apresentamos a malha de discretização das equações TDGL e deduzimos fórmulas de aproximação, as quais podem ser implementadas computacionalmente. O arcabouço de aproximações destas equações é conhecido como *método* $\psi - U$ ou também como *método das variáveis de ligação* [20–23]. Este Capítulo baseia-se fundamentalmente no trabalho de Gropp e outros [20].

3.2 Equações TDGL

As propriedades físicas dos materiais supercondutores com baixo T_c são descritas pelas equações TDGL. As funções incógnitas dessas equações são o parâmetro de ordem complexo ψ, e o *potencial vetor* $\mathbf{A}$. O valor absoluto $|\psi|^2$ representa a densidade de pares de Cooper, e o campo local $\mathbf{B}$ é encontrado através da relação: $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$. Em 1966,

Schmid [24] propôs a seguinte extensão das equações de Ginzburg-Landau estáticas (conforme vistas no Capítulo 2), para problemas dinâmicos:

$$\frac{\hbar}{2m^*D}\left(\frac{\partial}{\partial t}+i\frac{e^*}{\hbar}\varphi\right)\psi = -\frac{1}{2m^*}\mathbf{\Pi}^2\psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi \ , \tag{3.1}$$

$$\frac{4\pi\sigma}{c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\varphi\right) = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}_s - \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} \ , \tag{3.2}$$

onde φ é o potencial escalar, $\mathbf{\Pi} = (-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{e^*}{c}\mathbf{A})$ é o operador derivada covariante e $\mathbf{J}_s$ é a densidade de corrente supercondutora dada por:

$$\mathbf{J}_s = \frac{e^*}{m^*}\mathrm{Re}\left[\bar{\psi}\mathbf{\Pi}\psi\right] \ , \tag{3.3}$$

onde Re denota a parte real de uma quantidade complexa.

A equação (3.2) é equivalente à lei de Ampère.

As constantes das equações (3.1), (3.2) e (3.3) têm os seguintes significados:

- c é a velocidade da luz;
- $m^* = 2m$ é a massa efetiva;
- $e^* = 2e$ é a carga efetiva dos super elétrons;
- D é o coeficiente de difusão;
- σ é a condutividade elétrica;
- β e α são constantes fenomenológicas, sendo que β não depende da temperatura, e $\alpha = \alpha_0(T - T_c)$ para toda $T < T_c$ e $\alpha = 0$ para $T > T_c$;
- T_c é a temperatura crítica.

A constante β é definida positiva e α negativa.

3.3 Transformações de Calibre

As equações TDGL são invariantes sob transformações de simetria (transformações de calibre, ou "gauge invariance"), o que é importante, pois significa que descrevem uma simetria global. Essas transformações são as seguintes:

$$\begin{aligned} \psi' &= \psi e^{i\chi} \,, \\ \mathbf{A}' &= \mathbf{A} + \frac{\hbar c}{e^*}\boldsymbol{\nabla}\chi \,, \\ \varphi' &= \varphi - \frac{\hbar}{e^*}\frac{\partial \chi}{\partial t} \,. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Pode-se mostrar que sob estas transformações, as equações TDGL permanecem invariantes com as novas funções em lugar das antigas [23].

Para exemplificar como demonstramos a invariância de calibre, vamos tomar a equação (3.2). Usando a propriedade vetorial de que o rotacional do gradiente é nulo, $\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla}\chi = 0$, temos que $\mathbf{B}' = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}' = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Para a equação da densidade de corrente usamos a identidade $\Pi_x \left(e^{-i\chi} f\right) = e^{-i\chi}\Pi'_x f$, onde $\Pi'_x = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e^*}{c}A'_x\right)$. Assim, por exemplo, temos que $\bar{\psi}\Pi_x\psi = e^{i\chi}\bar{\psi}'\Pi_x\left(e^{-i\chi}\psi'\right) = \bar{\psi}'\Pi'_x\psi'$. Então, a densidade de corrente também é um invariante de calibre, $\mathbf{J}'_s = \mathbf{J}_s$. Para o lado esquerdo da equação (3.2), temos que $\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\varphi\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathbf{A}' - \frac{\hbar c}{e^*}\boldsymbol{\nabla}\chi\right) + \boldsymbol{\nabla}\left(\varphi' + \frac{\hbar}{e^*}\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\varphi'\right)$. Isto finaliza a demonstração da invariância de calibre.

3.4 Estado Meissner

Suponhamos que não haja campo aplicado ao sistema supercondutor. Então, temos a situação de equilíbrio:

$$\psi\left(\alpha + \beta|\psi|^2\right) = 0 \,. \tag{3.5}$$

Podemos ter duas possíveis soluções para a equação (3.5): (a) $\psi = 0$ ou (b) $|\psi|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$. Consideremos apenas a segunda solução. Considerando o parâmetro de ordem real, obtemos $\psi^2 = \psi_0^2 = -\frac{\alpha}{\beta}$. Esta solução para o parâmetro de ordem é conhecida como estado Meissner. Note que as condições $\alpha < 0$ e $\beta > 0$ implicam $\psi_0^2 > 0$, solução a qual garante um mínimo de energia para o estado Meissner, conforme visto no Capítulo 2.

3.5 Unidades Reduzidas

Para resolvermos as equações TDGL numericamente é mais conveniente escrevermos estas em unidades reduzidas, pois teremos um menor número de parâmetros para trabalhar. As unidades que usaremos estão especificadas em (3.6). Em seguida, exemplificamos um caso em que elas aparecem naturalmente nas equações TDGL quando usamos como referência o estado Meissner. Temos que:

$$\begin{aligned}
\psi &= \psi_0\tilde{\psi}\,, \\
T &= T_c\tilde{T}\,, \\
\boldsymbol{\nabla} &= \frac{1}{\xi(0)}\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\,, \\
t &= t_0\tilde{t}\,, \\
\mathbf{A} &= H_{c2}(0)\xi(0)\tilde{\mathbf{A}}\,, \\
\varphi &= \frac{H_{c2}(0)D}{c}\tilde{\varphi}\,.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

onde $t_0 = \xi^2(0)/D$.

Para determinarmos a primeira equação TDGL (3.1) em unidade reduzidas, procedemos da seguinte forma. Primeiramente, multiplicamos ambos os lados desta equação por ψ_0 e consideramos cada um dos termos separadamente.

1. *Termo do condensado*: substituindo as componentes do parâmetro de ordem temos

que:

$$\begin{aligned}
-\psi_0\left(\alpha\psi+\beta\psi|\psi|^2\right) &= -\psi_0\left(\alpha\psi_0\tilde{\psi}+\beta[\psi_0\tilde{\psi}|\psi_0\tilde{\psi}|^2]\right)\\
&= -\psi_0^2\left(\alpha\tilde{\psi}+\beta[\psi_0^2\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2]\right)\\
&= -\psi_0^2\left(\alpha\tilde{\psi}-\cancel{\beta}\frac{\alpha}{\cancel{\beta}}\tilde{\psi}|\tilde{\psi}|^2\right)\\
&= \psi_0^2\alpha_0(T_c-T)\tilde{\psi}\left(1-|\tilde{\psi}|^2\right)\\
&= \underbrace{\alpha_0 T_c\psi_0^2}(1-\tilde{T})\tilde{\psi}\left(1-|\tilde{\psi}|^2\right) \qquad (3.7)
\end{aligned}$$

2. *Termo de energia cinética*:

$$\begin{aligned}
\psi_0\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}-\frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi &= \psi_0^2\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(-i\boldsymbol{\nabla}-\frac{e^*}{\hbar c}\mathbf{A}\right)^2\tilde{\psi}\\
&= \psi_0^2\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{\xi^2(0)}\left(-i\tilde{\boldsymbol{\nabla}}-\frac{e^*\xi(0)}{\hbar c}\mathbf{A}\right)^2\tilde{\psi}\,,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_0^2\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{\xi(0)^2} &= \psi_0^2\frac{\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2m^*}}\frac{1}{\frac{\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2m^*}\alpha_0 T_c}}\\
&= \alpha_0 T_c\psi_0^2\,, \qquad (3.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{e^*\xi(0)}{\hbar c}\mathbf{A} &= \frac{2e}{\frac{hc}{2\pi}}\xi(0)\mathbf{A}=\frac{2\pi}{\frac{hc}{2e}}\xi(0)\mathbf{A}\\
&= \frac{2\pi}{\Phi_0}\xi(0)^2\frac{1}{\xi(0)}\mathbf{A}\\
&= \frac{1}{\frac{\Phi_0}{2\pi\xi(0)^2}}\frac{1}{\xi(0)}\mathbf{A}=\frac{1}{H_{c2}(0)\xi(0)}\mathbf{A}=\tilde{\mathbf{A}}\,, \qquad (3.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_0\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}-\frac{e^*}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi &= \alpha_0 T_c\psi_0^2\left(-i\tilde{\boldsymbol{\nabla}}-\tilde{\mathbf{A}}\right)^2\tilde{\psi}\\
&= \underbrace{\alpha_0 T_c\psi_0^2}\,\boldsymbol{\Pi}^2\tilde{\psi}\,. \qquad (3.10)
\end{aligned}$$

3. *Derivada temporal*:

$$\psi_0\frac{\hbar^2}{2m^*D}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\underbrace{\alpha_0 T_c\psi_0^2}\,\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}}\,.$$

4. *Potencial*:

$$\psi_0 \frac{\hbar}{2m^* D}\left(i\frac{e^*}{\hbar}\varphi\right)\psi = \underbrace{\alpha_0 T_c \psi_0^2}\, i\tilde{\varphi}\tilde{\psi}\ , \tag{3.11}$$

Colecionando todos os termos obtemos:

$$\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial\tilde{t}} + i\tilde{\varphi}\tilde{\psi} = -\tilde{\mathbf{\Pi}}^2\tilde{\psi} + (1-\tilde{T})\tilde{\psi}\left(1-|\tilde{\psi}|^2\right)\ . \tag{3.12}$$

onde, agora, a derivada covariante em unidades adimensionais é dada por $\tilde{\mathbf{\Pi}} = -i\tilde{\boldsymbol{\nabla}} - \tilde{\mathbf{A}}$.

Procedendo de forma análoga, podemos escrever para as outras equações:

$$\beta\left(\frac{\partial\tilde{\mathbf{A}}}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{\nabla}}\tilde{\varphi}\right) = \tilde{\mathbf{J}}_s - \kappa^2\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\times\tilde{\mathbf{B}}\ , \tag{3.13}$$

$$\tilde{\mathbf{J}}_s = \mathrm{Re}\left(\bar{\tilde{\psi}}\tilde{\mathbf{\Pi}}\tilde{\psi}\right)\ , \tag{3.14}$$

onde $\beta = 4\pi\sigma D\kappa^2/c^2$.

Daqui em diante desconsideraremos os *til's* em todas as funções.

3.6 Campos Auxiliares

Agora iremos introduzir o vetor campo auxiliar $\mathbf{U} = (\mathcal{U}_x, \mathcal{U}_y, \mathcal{U}_z)$, cujas componentes são definidas por:

$$\mathcal{U}_x(x,y,z,t) = \exp\left(-i\int_{x_0}^{x} A_x(\nu,y,z,t)\,d\nu\right)\ , \tag{3.15}$$

$$\mathcal{U}_y(x,y,z,t) = \exp\left(-i\int_{y_0}^{y} A_y(x,\eta,z,t)\,d\eta\right)\ , \tag{3.16}$$

$$\mathcal{U}_z(x,y,z,t) = \exp\left(-i\int_{z_0}^{z} A_z(x,y,\gamma,t)\,d\gamma\right)\ , \tag{3.17}$$

onde (x_0, y_0, z_0) é um ponto de referência arbitrário. Daqui em diante omitiremos a dependência temporal e recuperaremos essa dependência quando necessário.

Derivando as equações (3.15-3.17) com relação à coordenada x para (3.15), y para (3.16) ou z para (3.17), temos que $\frac{\partial\mathcal{U}_\zeta}{\partial\zeta} = -iA_\zeta\mathcal{U}_\zeta$, onde $\{\zeta = x, y, z\}$. Usando o fato que

os campos auxiliares são funções unimodulares, $\bar{\mathcal{U}}_\zeta \mathcal{U}_\zeta = 1$, encontramos:

$$\Pi_\zeta f = i\bar{\mathcal{U}}_\zeta \frac{\partial(\mathcal{U}_\zeta f)}{\partial \zeta} \ , \tag{3.18}$$

onde f é qualquer função complexa.

Analogamente, podemos mostrar que:

$$\Pi_\zeta^2 f = \bar{\mathcal{U}}_\zeta \frac{\partial^2 (\mathcal{U}_\zeta f)}{\partial \zeta^2} \ . \tag{3.19}$$

Usando a propriedade (3.18) e a identidade $\mathrm{Re}(-iw) = \mathrm{Im}(w)$, onde w é uma função complexa, as componentes da densidade de corrente (3.14) tornam-se:

$$J_{s\zeta} = \mathrm{Im}\left[\bar{\mathcal{U}}_\zeta \bar{\psi} \frac{\partial(\mathcal{U}_\zeta \psi)}{\partial \zeta}\right] \ . \tag{3.20}$$

Em seguida usamos a propriedade (3.19) nos termos cinéticos da equação (3.12), e podemos escrever:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\varphi\psi = \bar{\mathcal{U}}_x \frac{\partial^2 (\mathcal{U}_x \psi)}{\partial x^2} + \bar{\mathcal{U}}_y \frac{\partial^2 (\mathcal{U}_y \psi)}{\partial y^2} + \bar{\mathcal{U}}_z \frac{\partial^2 (\mathcal{U}_z \psi)}{\partial z^2} + (1-T)\psi\left(1 - |\psi|^2\right) \ . \tag{3.21}$$

A vantagem de escrever as equações TDGL em termos dos campos auxiliares é que elas não perdem a invariância de calibre quando são discretizadas.

3.7 Problema a Ser Resolvido: Condições de Contorno

Denotemos por Ω_{sc} a região supercondutora. O meio exterior pode ser o vácuo ou um metal, embora consideremos apenas o primeiro caso. Seja $\partial\Omega_{sc}$ a interface separando os dois meios. Consideremos agora um domínio maior Ω tal que contenha a região supercondutora, isto é, $\Omega_{sc} \subset \Omega$. A Figura 3.1 ilustra a geometria do problema. A interface vácuo-vácuo mais externa é denotada por $\partial\Omega$. Assim, as equações a serem resolvidas são dadas por:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\varphi\psi = \sum_{\zeta=x}^{z} \bar{\mathcal{U}}_\zeta \frac{\partial^2 (\mathcal{U}_\zeta \psi)}{\partial \zeta^2} + (1-T)\psi\left(1 - |\psi|^2\right) \ , \quad \text{em } \Omega_{sc} \ , \tag{3.22}$$

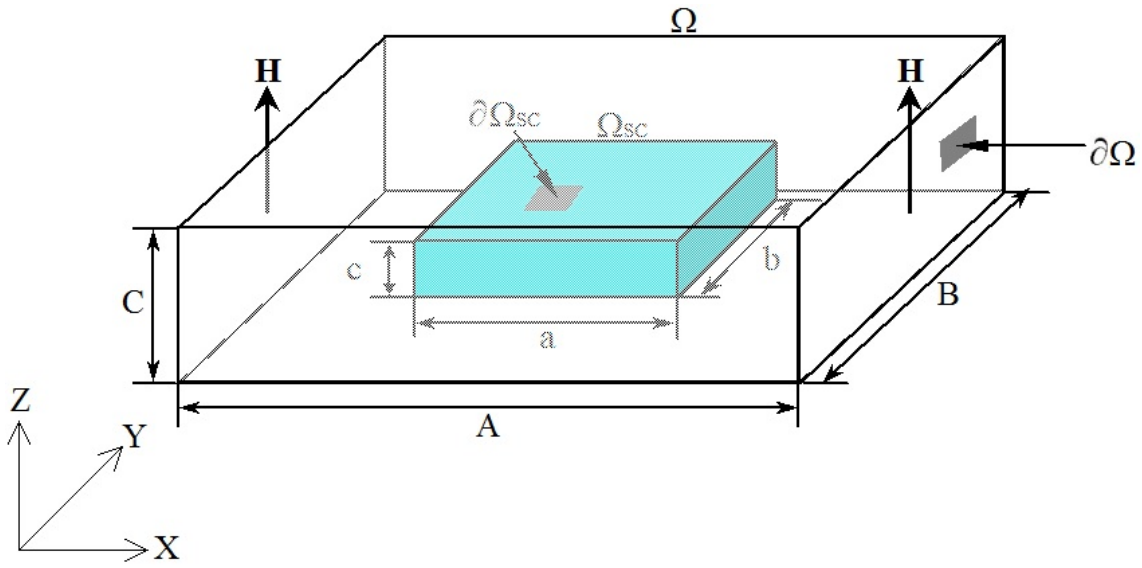


Figura 3.1: Representação da caixa de simulação com o supercondutor no seu interior. Fonte: Próprio autor.

$$\beta\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\varphi\right) = \begin{cases} \mathbf{J}_s - \kappa^2 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}\ , & \text{em } \Omega_{sc}\ , \\ -\kappa^2 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}\ , & \text{em } \Omega \backslash \bar{\Omega}_{sc}\ , \end{cases} \tag{3.23}$$

com $\mathbf{J}_{s\zeta}$ dada pela equação (3.20).

A solução das equações TDGL precisam das condições de contorno na interface separando os meios para serem resolvidas. As condições físicas que vamos assumir são as de que as componentes perpendiculares de $\mathbf{J}_s$ à interface são nulas. Isto significa que os pares de Cooper estão restritos ao supercondutor. Em outras palavras, não há corrente entre o domínio Ω_{SC} e Ω. Seja $\mathbf{n}$ um vetor normal à interface supercondutor-vácuo apontando para fora do supercondutor. Então temos que:

$$\mathbf{J}_s \cdot \mathbf{n} = 0\ . \tag{3.24}$$

Portanto, em se tratando de um problema com simetria retangular, as condições de

contorno (3.24) tornam-se do tipo von Neumann:

$$\frac{\partial(\mathcal{U}_x\psi)}{\partial x} = 0 \ , \ \text{faces da esquerda e da direita} \ , \tag{3.25}$$

$$\frac{\partial(\mathcal{U}_y\psi)}{\partial y} = 0 \ , \ \text{faces de frente e de fundo} \ , \tag{3.26}$$

$$\frac{\partial(\mathcal{U}_z\psi)}{\partial z} = 0 \ , \ \text{faces inferior e superior} \ , \tag{3.27}$$

onde usamos a equação (3.20). Como veremos mais adiante, estas condições fornecem os valores de ψ em $\partial\Omega_{sc}$.

Precisamos ainda das condições para o campo local. As interfaces $\partial\Omega_{sc}$ e $\partial\Omega$ serão consideradas suficientemente distantes, de tal modo que o campo magnético local $\mathbf{B}$ seja igual ao campo aplicado $\mathbf{H}$ em $\partial\Omega$. Assim, nesta interface assumimos a continuidade do campo:

$$B_x = H_x \ , \quad B_y = H_y \ , \quad B_z = H_z \ , \tag{3.28}$$

ou ainda,

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = \mathbf{H} \ , \tag{3.29}$$

em $\partial\Omega$.

Como um exemplo, podemos imaginar um supercondutor em forma de um paralelepípedo dentro de um domínio de mesma geometria e concêntricos.

Nas próximas seções vamos discretizar as equações TDGL (3.22,3.23,3.20), e as condições de contorno (3.25-3.27,3.28).

3.8 Discretização das Equações TDGL

3.8.1 Malha de Discretização

Para discretizar as equações de Ginzburg-Landau, substitui-se as variáveis (x, y, z) por suas discretas equivalentes (x_i, y_j, z_k). Considerando $(\mathscr{A}, \mathscr{B}, \mathscr{C})$ os lados de um paralelepípedo, dividimos o mesmo em intervalos de tamanhos $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$. Assim, os pontos

de vértice da malha de discretização são dados por $x_i = (i-1)\Delta x$, $y_j = (j-1)\Delta y$ e $z_k = (k-1)\Delta k$, para todos $i = 1, \ldots, N_x + 1, j = 1, \ldots, N_y + 1, k = 1, \ldots, N_z + 1$, onde $N_x = \mathscr{A}/\Delta x$, $N_y = \mathscr{B}/\Delta y$ e $N_z = \mathscr{C}/\Delta z$ são os números de células unitárias nas direções x, y e z, respectivamente. A Figura 3.2 ilustra a malha de discretização.

O domínio Ω encontra-se dento da caixa de simulação de dimensões $(\mathscr{A}, \mathscr{B}, \mathscr{C})$ com as suas faces a meia distância $(\Delta x/2, \Delta y/2, \Delta z/2)$ de cada face do paralelepípedo nas direções (x, y, z), respectivamente. Temos que:

$$\begin{aligned}\Omega \;=\; \Bigg\{ & \mathbf{r} = (x,y,z) :\; x_1 + \frac{\Delta x}{2} < x < x_{N_x} + \frac{\Delta x}{2}, y_1 + \frac{\Delta y}{2} < y < y_{N_y} + \frac{\Delta y}{2}, \\ & z_1 + \frac{\Delta z}{2} < z < z_{N_z} + \frac{\Delta z}{2} \Bigg\} \;. \end{aligned} \tag{3.30}$$

O domínio supercondutor, de lados (a, b, c) é limitado por faces cada qual a uma distância correspondente a um múltiplo inteiro de espaçamentos da malha:

$$\begin{aligned}\Omega_{sc} \;=\; \Bigg\{ & \mathbf{r} = (x,y,z) :\; x_{n_{ix}} + \frac{\Delta x}{2} < x < x_{n_{fx}} + \frac{\Delta x}{2}, y_{n_{iy}} + \frac{\Delta y}{2} < y < y_{n_{fy}} + \frac{\Delta y}{2}, \\ & z_{n_{iz}} + \frac{\Delta z}{2} < z < z_{n_{fz}} + \frac{\Delta z}{2} \Bigg\} \;, \end{aligned} \tag{3.31}$$

onde, por exemplo, $n_{ix} = (\mathscr{A} - a)/2 + 1$ e $n_{fx} = (\mathscr{A} + a)/2 + 1$, uma vez que os paralelepípedos são concêntricos. Os índices (ix, iy, iz) e (fx, fy, fz) indicam os pontos iniciais e finais nas direções (x, y, z), respectivamente.

As condições de contorno (3.25-3.26) são aplicadas em $\partial\Omega_{sc}$ e as (3.28) em $\partial\Omega$.

3.8.2 Definições

Antes de discretizarmos as equações TDGL, precisamos introduzir algumas definições. A principal delas é a variável de ligação. Consideremos o produto do campo auxiliar $\mathcal{U}_x$ entre dois pontos consecutivos de uma malha (x_i, y_j, z_k) e (x_{i+1}, y_j, z_k) ao longo do eixo

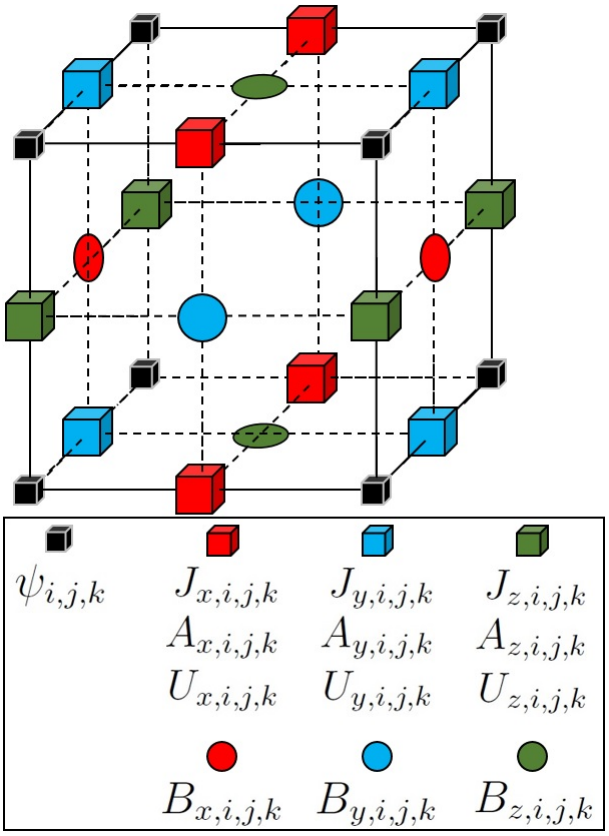


Figura 3.2: Malha de discretização: a legenda indica os pontos onde cada quantidade física é calculada. Fonte: Próprio autor.

x:

$$\begin{aligned} U_{x,i,j,k} &\equiv \bar{\mathcal{U}}_x(x_i, y_j, z_k)\mathcal{U}_x(x_{i+1}, y_j, z_k) \\ &= \exp\left(-i\int_{x_i}^{x_{i+1}} A_x dx\right) \\ &= \exp\left(-iA_{x,i,j,k}\Delta x\right) \ , \end{aligned} \tag{3.32}$$

onde usamos a regra do ponto médio para integração. Analogamente, temos que:

$$\begin{aligned} U_{y,i,j,k} &\equiv \bar{\mathcal{U}}_y(x_i, y_j, z_k)\mathcal{U}_y(x_i, y_{j+1}, z_k) \\ &= \exp\left(-iA_{y,i,j,k}\Delta y\right) \ , \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned} U_{z,i,j,k} &\equiv \bar{\mathcal{U}}_z(x_i, y_j, z_k)\mathcal{U}_y(x_i, y_j, z_{k+1}) \\ &= \exp\left(-iA_{z,i,j,k}\Delta z\right) \ , \end{aligned} \tag{3.34}$$

onde $A_{x,i,j,k} \equiv A_x(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k)$, $A_{y,i,j,k} \equiv A_y(x_i, y_j+\frac{\Delta y}{2}, z_k)$ e $A_{z,i,j,k} \equiv A_z(x_i, y_j, z_k+\frac{\Delta z}{2})$. Assim, fica claro a denominação "variável de ligação", pois as variáveis $U_{x,i,j,k}$, $U_{y,i,j,k}$ e $U_{z,i,j,k}$ ligam pontos adjacentes da malha através do potencial no ponto médio.

Outras definições são as seguintes:

- $\psi_{i,j,k} \equiv \psi(x_i, y_j, z_k)$,
- $\varphi_{i,j,k} \equiv \varphi(x_i, y_j, z_k)$,
- $J_{sx,i,j,k} \equiv J_{sx}(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k)$,
- $J_{sy,i,j,k} \equiv J_{sy}(x_i, y_j + \frac{\Delta y}{2}, z_k)$,
- $J_{sz,i,j,k} \equiv J_{sy}(x_i, y_j, z_k + \frac{\Delta z}{2})$,
- $B_{x,i,j,k} \equiv B_z(x_i, y_j + \frac{\Delta y}{2}, z_k + \frac{\Delta z}{2})$,
- $B_{y,i,j,k} \equiv B_z(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k + \frac{\Delta z}{2})$,
- $B_{z,i,j,k} \equiv B_z(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_j + \frac{\Delta y}{2}, z_k)$.

A Figura 3.2 ilustra os pontos onde cada quantidade física é calculada.

3.8.3 Aproximações para as Derivadas

Usando expansão em série de Taylor, obtemos:

$$\begin{aligned} f(x + \frac{\Delta x}{2}) &= f(x) + \frac{\Delta x}{2} f'(x) + \frac{\Delta x^2}{8} f''(x) + \cdots , \\ f(x - \frac{\Delta x}{2}) &= f(x) - \frac{\Delta x}{2} f'(x) + \frac{\Delta x^2}{8} f''(x) + \cdots . \end{aligned}$$

Subtraindo uma da outra, obtemos a aproximação:

$$f'(x) = \frac{f(x + \frac{\Delta x}{2}) - f(x - \frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} . \tag{3.35}$$

A interpretação geométrica desta fórmula encontra-se na figura (3.3).

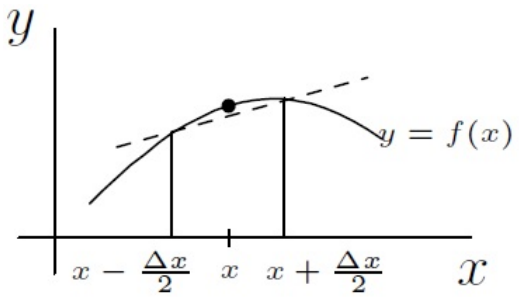


Figura 3.3: A figura ilustra a aproximação (3.35) para a primeira derivada [3].

Usando a aproximação (3.35) obtemos:

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{f'(x+\frac{\Delta x}{2}) - f'(x-\frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} \\ &= \frac{\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} - \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} \, . \end{aligned} \tag{3.36}$$

3.8.4 Discretização da Primeira Equação TDGL

Usando a aproximação para a segunda derivada (3.36) e as de variáveis de ligação (3.32-3.33) encontramos:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{U}}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\mathcal{U}_x\psi)\Big|_{(x_i,y_j,z_k)} &= \bar{\mathcal{U}}_x(x_i,y_j,z_k)\,[\mathcal{U}_x(x_{i+1},y_j,z_k)\psi(x_{i+1},y_j,z_k) \\ &\quad -2\mathcal{U}_x(x_i,y_j,z_k)\psi(x_i,y_j,z_k) \\ &\quad +\mathcal{U}_x(x_{i-1},y_j,z_k)\psi(x_{i-1},y_j,z_k)]\,/\Delta x^2 \\ &= \frac{U_{x,i,j,k}\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \bar{U}_{x,i-1,j,k}\psi_{i-1,j,k}}{\Delta x^2} \, . \end{aligned} \tag{3.37}$$

De forma análoga, podemos obter uma aproximação para a segunda derivada com relação às coordenadas y e z fazendo uma permutação cíclica dos índices (i, j, k).

Consequentemente, a primeira equação TDGL (3.22) pode ser aproximada por:

$$\frac{\partial \psi_{i,j,k}}{\partial t} = \mathscr{D}_{i,j,k} \, , \tag{3.38}$$

onde,

$$\begin{aligned}\mathscr{D}_{i,j,k} &= \frac{U_{x,i,j,k}\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \bar{U}_{x,i-1,j,k}\psi_{i-1,j,k}}{\Delta x^2} \\ &+ \frac{U_{y,i,j,k}\psi_{i,j+1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \bar{U}_{y,i,j-1,k}\psi_{i,j-1,k}}{\Delta y^2} \\ &+ \frac{U_{z,i,j,k}\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \bar{U}_{z,i,j,k-1}\psi_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} \\ &- i\varphi_{i,j,k}\psi_{i,j,k} + (1-T)\psi_{i,j,k}(1 - |\psi_{i,j,k}|^2) \,, \end{aligned} \tag{3.39}$$

para todo $\{i = n_{ix}+1, \ldots, n_{fx}-1, j = n_{iy}+1, \ldots, n_{fy}-1, k = n_{iz}+1, \ldots, n_{fz}-1\}$.

3.8.5 Discretização da Segunda Equação TDGL (Lei de Ampère)

Para finalizar, precisamos discretizar a segunda equação TDGL (3.23). Temos que:

$$\beta\left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) = \tau J_{sx} - \kappa^2\left(\frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z}\right) \,, \tag{3.40}$$

$$\beta\left(\frac{\partial A_y}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) = \tau J_{sy} - \kappa^2\left(\frac{\partial B_x}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial x}\right) \,, \tag{3.41}$$

$$\beta\left(\frac{\partial A_z}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\right) = \tau J_{sz} - \kappa^2\left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y}\right) \,, \tag{3.42}$$

onde $\tau(x,y,z)$ é uma função que vale um em Ω_{sc} e zero em $\Omega\backslash\bar{\Omega}_{sc}$.

Agora, usando a aproximação (3.35) para a primeira derivada, encontramos:

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial B_z}{\partial y}\right|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k)} &= \frac{B_z(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j+\frac{\Delta y}{2}, z_k) - B_z(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j-\frac{\Delta y}{2}, z_k)}{\Delta y} \\ &= \frac{B_{z,i,j,k} - B_{z,i,j-1,k}}{\Delta y} \,, \end{aligned} \tag{3.43}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial B_y}{\partial z}\right|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k)} &= \frac{B_y(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k+\frac{\Delta z}{2}) - B_y(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k-\frac{\Delta z}{2})}{\Delta z} \\ &= \frac{B_{y,i,j,k} - B_{y,i,j,k-1}}{\Delta z} \,, \end{aligned} \tag{3.44}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k)} &= \frac{\varphi(x_i+\Delta x, y_j, z_k) - \varphi(x_i, y_j, z_k)}{\Delta x} \\ &= \frac{\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i,j,k}}{\Delta x} \,. \end{aligned} \tag{3.45}$$

Substituindo estes resultados em (3.40) encontramos:

$$\frac{\partial A_{x,i,j,k}}{\partial t} = \frac{1}{\beta}\left[\tau_{x,i,j,k}J_{sx,i,j,k} - \frac{\kappa^2}{\Delta y}(B_{z,i,j,k} - B_{z,i,j-1,k}) + \frac{\kappa^2}{\Delta z}(B_{y,i,j,k} - B_{y,i,j,k-1})\right] - \frac{\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i,j,k}}{\Delta x}\,, \tag{3.46}$$

onde $\tau_{x,i,j,k} = \tau(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k)$, para todo $\{i = 1, 2, \ldots, N_x, j = 2, 3, \ldots, N_y, k = 2, 3, \ldots, N_z\}$.

Podemos encontrar aproximações para as outras componentes do potencial vetor por meio de permutação cíclica dos índices (i, j, k) e das coordenadas (x, y, z), de modo que:

$$\frac{\partial A_{y,i,j,k}}{\partial t} = \frac{1}{\beta}\left[\tau_{y,i,j,k}J_{sy,i,j,k} - \frac{\kappa^2}{\Delta z}(B_{x,i,j,k} - B_{x,i,j,k-1}) + \frac{\kappa^2}{\Delta x}(B_{z,i,j,k} - B_{z,i-1,j,k})\right] - \frac{\varphi_{i,j+1,k} - \varphi_{i,j,k}}{\Delta y}\,, \tag{3.47}$$

onde $\tau_{y,i,j,k} = \tau(x_i, y_j + \frac{\Delta y}{2}, z_k)$, para todo $\{i = 2, 3, \ldots, N_x, j = 1, 2, \ldots, N_y, k = 2, 3, \ldots, N_z\}$, e,

$$\frac{\partial A_{z,i,j,k}}{\partial t} = \frac{1}{\beta}\left[\tau_{z,i,j,k}J_{sz,i,j,k} - \frac{\kappa^2}{\Delta x}(B_{y,i,j,k} - B_{y,i-1,j,k}) + \frac{\kappa^2}{\Delta y}(B_{x,i,j,k} - B_{x,i,j-1,k})\right] - \frac{\varphi_{i,j,k+1} - \varphi_{i,j,k}}{\Delta z}\,, \tag{3.48}$$

onde $\tau_{z,i,j,k} = \tau(x_i, y_j, z_k + \frac{\Delta z}{2})$, para todo $\{i = 2, 3, \ldots, N_x, j = 2, 3, \ldots, N_y, k = 1, 2, \ldots, N_z\}$.

3.8.6 Densidade de Corrente

A componente x da densidade de corrente (3.20) envolve o produto dos termos $\bar{\mathcal{U}}_x\bar{\psi}$ e $\frac{\partial \mathcal{U}_x\psi}{\partial x}$. Usando a aproximação para a primeira derivada temos que:

$$\left.\frac{\partial(\mathcal{U}_x\psi)}{\partial x}\right|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k)} = \frac{\mathcal{U}_x(x_{i+1}, y_j, z_k)\psi(x_{i+1}, y_j, z_k) - \mathcal{U}_x(x_{i-1}, y_j, z_k)\psi(x_{i-1}, y_j, z_k)}{\Delta x}\,. \tag{3.49}$$

O outro termo aproximamos pelo seu valor médio entre os pontos adjacentes na malha:

$$\bar{\mathcal{U}}_x\bar{\psi}\big|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2}, y_j, z_k)} = \frac{\bar{\mathcal{U}}_x(x_{i+1}, y_j, z_k)\bar{\psi}(x_{i+1}, y_j, z_k) + \bar{\mathcal{U}}_x(x_{i-1}, y_j, z_k)\bar{\psi}(x_{i-1}, y_j, z_k)}{2}\,. \tag{3.50}$$

Multiplicando as equações (3.49) e (3.50) pela identidade $\mathcal{U}_x(x_i, y_j, z_k)\bar{\mathcal{U}}_x(x_i, y_j, z_k) = 1$ e usando a definição de variável de ligação (3.32), obtemos:

$$\bar{\mathcal{U}}_x\bar{\psi}\frac{\partial(\mathcal{U}_x\psi)}{\partial x}\bigg|_{(x_i+\frac{\Delta x}{2},y_j,z_k)} = \frac{1}{2\Delta x}\left[\bar{U}_{x,i,j,k}\bar{\psi}_{i+1,j,k} + \bar{\psi}_{i,j,k}\right]\left[U_{x,i,j,k}\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}\right] . \tag{3.51}$$

Usando a equação (3.20) e a aproximação obtida com a equação (3.51), a densidade de corrente pode ser escrita como:

$$J_{sx,i,j,k} = \frac{1}{\Delta x}\mathrm{Im}\left[\bar{\psi}_{i,j,k}U_{x,i,j,k}\psi_{i+1,j,k}\right] , \tag{3.52}$$

para todo $\{i = n_{ix}, \ldots, n_{fx} - 1, j = n_{iy} + 1, \ldots, n_{fy} - 1, k = n_{iz} + 1, \ldots, n_{fz} - 1\}$.

Para as componentes y e z temos que:

$$J_{sy,i,j,k} = \frac{1}{\Delta y}\mathrm{Im}\left[\bar{\psi}_{i,j,k}U_{y,i,j,k}\psi_{i,j+1,k}\right] , \tag{3.53}$$

para todo $\{i = n_{ix} + 1, \ldots, n_{fx} - 1, j = n_{iy}, \ldots, n_{fy} - 1, k = n_{iz} + 1, \ldots, n_{fz} - 1\}$, e,

$$J_{sz,i,j,k} = \frac{1}{\Delta z}\mathrm{Im}\left[\bar{\psi}_{i,j,k}U_{z,i,j,k}\psi_{i,j,k+1}\right] , \tag{3.54}$$

para todo $\{i = n_{ix} + 1, \ldots, n_{fx} - 1, j = n_{iy} + 1, \ldots, n_{fy} - 1, k = n_{iz}, \ldots, n_{fz} - 1\}$.

3.8.7 Campo Local

Usando a definição:

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= B_x\mathbf{i} + B_y\mathbf{j} + B_z\mathbf{k} \\ &= \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right)\mathbf{i} + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\mathbf{y} + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\mathbf{k} ,\end{aligned} \tag{3.55}$$

e a aproximação para a primeira derivada (3.35) encontramos:

$$\begin{aligned}B_{x,i,j,k} &= \frac{A_{z,i,j+1,k} - A_{z,i,j,k}}{\Delta y} - \frac{A_{y,i,j,k+1} - A_{y,i,j,k}}{\Delta z} , \\ B_{y,i,j,k} &= \frac{A_{x,i,j,k+1} - A_{x,i,j,k}}{\Delta z} - \frac{A_{z,i+1,j,k} - A_{z,i,j,k}}{\Delta x} , \\ B_{z,i,j,k} &= \frac{A_{y,i+1,j,k} - A_{y,i,j,k}}{\Delta x} - \frac{A_{x,i,j+1,k} - A_{x,i,j,k}}{\Delta y} ,\end{aligned} \tag{3.56}$$

para todo $\{i = 2, 3, \ldots, N_x - 1, j = 2, 3, \ldots, N_y - 1, k = 2, 3, \ldots, N_z - 1\}$.

3.8.8 Condições de Contorno

Supondo continuidade do campo na interface $\partial\Omega$ podemos escrever para a continuidade do campo local nas faces da esquerda e da direita, respectivamente:

$$B_{z,1,j,k} = H_z \ , \tag{3.57}$$

$$B_{z,Nx,j,k} = H_z \ , \tag{3.58}$$

para todo $\{j = 1, 2, \ldots, N_y, k = 1, 2, \ldots, N_z + 1\}$; para as faces de frente e de fundo, respectivamente:

$$B_{z,i,1,k} = H_z \ , \tag{3.59}$$

$$B_{z,i,Ny,k} = H_z \ , \tag{3.60}$$

para todo $\{i = 1, 2, \ldots, N_x, k = 1, 2, \ldots, N_z + 1\}$; para as faces inferior e superior, respectivamente:

$$B_{z,i,j,1} = H_z \ , \tag{3.61}$$

$$B_{z,i,j,Nz+1} = H_z \ , \tag{3.62}$$

para todo $\{i = 1, 2, \ldots, N_x, j = 1, 2, \ldots, N_y\}$. As outras componentes do campo local podem ser obtidas por permutação cíclica dos índices (i, j, k) e das coordenadas (x, y, z).

Usando novamente a aproximação para a primeira derivada (3.35), e a definição de variáveis de ligação (3.32-3.34), as expressões (3.25-3.26) podem ser aproximadas por:

$$\psi_{1,j,k} = U_{x,1,j,k}\psi_{2,j,k} \ , \tag{3.63}$$

$$\psi_{N_x+1,j,k} = \bar{U}_{x,N_x,j,k}\psi_{N_x,j,k} \ , \tag{3.64}$$

para as faces da esquerda e da direita respectivamente, para todo

$j = n_{iy} + 1, \ldots, n_{fy} - 1, k = n_{iz} + 1, \ldots, n_{fz} - 1$,

$$\psi_{i,1,k} = U_{y,i,1,k}\psi_{i,2,k} \ , \tag{3.65}$$

$$\psi_{i,N_y+1} = \bar{U}_{y,i,N_y,k}\psi_{i,N_y,k} \ , \tag{3.66}$$

para as faces da frente e do fundo respectivamente, para todo $i = n_{ix} + 1, \ldots, n_{fx} - 1, k = n_{iz} + 1, \ldots, n_{fz} - 1$,

$$\psi_{i,j,1} = U_{z,i,j,1}\psi_{i,j,2} \ , \tag{3.67}$$

$$\psi_{i,j,Nz+1} = \bar{U}_{z,i,j,N_z}\psi_{i,j,N_z} \ , \tag{3.68}$$

para as faces inferior e superior respectivamente, para todo $i = n_{ix} + 1, \ldots, n_{fx} - 1, j = n_{iy} + 1, \ldots, n_{fy} - 1$.

Conhecendo-se o parâmetro de ordem e as variáveis de ligação no interior da malha, determinamos os valores de ψ nas faces mais próximas a $\partial\Omega_{sc}$ e externas ao domínio Ω_{sc}.

Neste ponto podemos ver que os valores do parâmetro de ordem não dependem de seus valores fora do domínio Ω_{sc}. Por exemplo, substituindo (3.63) no primeiro termo da equação (3.39), e considerando $i = 1$, encontramos $(U_{x,1,j,k}\psi_{2,j,k} - \psi_{2,j,k})/\Delta x^2$. Estes valores de ψ são usados apenas para efeitos de ilustração do parâmetro de ordem.

3.9 Evolução Temporal

Para determinar a evolução temporal das quantidades físicas, usamos o método de Euler explícito. Considerando a aproximação de primeira ordem [3]:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t)dt = f(t)\Delta t \ , \tag{3.69}$$

as equações (3.38) e (3.46-3.48) podem ser integradas e obtemos os resultados:

$$\psi_{i,j,k}(t+\Delta t) = \psi_{i,j,k}(t) + \Delta t \mathscr{D}_{i,j,k}(t) \ , \tag{3.70}$$

$$\begin{aligned} A_{x,i,j,k}(t+\Delta t) &= A_{x,i,j,k}(t) + \frac{\Delta t}{\beta}\left\{\tau_{x,i,j,k} J_{sx,i,j,k}(t) - \frac{\kappa^2}{\Delta y}[B_{z,i,j,k}(t) - B_{z,i,j-1,k}(t)]\right. \\ &\left. + \frac{\kappa^2}{\Delta z}[B_{y,i,j,k}(t) - B_{y,i,j,k-1}(t)]\right\} \\ &- \Delta t \frac{[\varphi_{i+1,j,k}(t) - \varphi_{i,j,k}(t)]}{\Delta x} \ , \end{aligned} \tag{3.71}$$

$$\begin{aligned} A_{y,i,j,k}(t+\Delta t) &= A_{y,i,j,k}(t) + \frac{\Delta t}{\beta}\left\{\tau_{y,i,j,k} J_{sy,i,j,k}(t) - \frac{\kappa^2}{\Delta z}[B_{x,i,j,k}(t) - B_{x,i,j,k-1}(t)]\right. \\ &\left. + \frac{\kappa^2}{\Delta x}[B_{z,i,j,k}(t) - B_{z,i-1,j,k}(t)]\right\} \\ &- \Delta t \frac{[\varphi_{i,j+1,k}(t) - \varphi_{i,j,k}(t)]}{\Delta y} \ , \end{aligned} \tag{3.72}$$

$$\begin{aligned} A_{z,i,j,k}(t+\Delta t) &= A_{z,i,j,k}(t) + \frac{\Delta t}{\beta}\left\{\tau_{z,i,j,k} J_{sz,i,j,k}(t) - \frac{\kappa^2}{\Delta x}[B_{y,i,j,k}(t) - B_{y,i-1,j,k}(t)]\right. \\ &\left. + \frac{\kappa^2}{\Delta y}[B_{x,i,j,k}(t) - B_{x,i,j-1,k}(t)]\right\} \\ &- \Delta t \frac{[\varphi_{i,j,k+1}(t) - \varphi_{i,j,k}(t)]}{\Delta z} \ , \end{aligned} \tag{3.73}$$

3.10 Algoritmo

A implementação do algorítimo funciona da seguinte forma: suponhamos que conhecemos todas as quantidades em todos os pontos da malha em um determinado instante de tempo t. Então, podemos determiná-las em $t + \Delta t$. Em outras palavras, se conhecemos $(\psi_{i,j,k}, A_{x,i,j,k}, A_{y,i,j,k}, A_{z,i,j,k})$ em t, das equações (3.39), (3.52-3.54), e (3.56-3.56), podemos calcular todas as quantidades necessárias para determinar o lado direito de (3.70-3.73) nos pontos interiores da malha. Finalmente, as condições de contorno são aplicadas. Antes de ir para o próximo tempo, atualizamos todas as quantidades relevantes como as variáveis de ligação, densidade de corrente e o campo local em todos os pontos da malha. Então vamos para o nível de tempo acima. Repetindo este procedimento podemos determinar todas as quantidades físicas relevantes em todos os níveis de tempo até que

o sistema alcance o estado estacionário. Infelizmente, este método não converge para qualquer passo de tempo Δt. Usamos a seguinte regra prática [3]:

$$\Delta t \leq \min\left\{\frac{\delta^2}{4}, \frac{\delta^2\beta}{4\kappa^2}\right\}, \tag{3.74}$$

$$\delta^2 = \frac{2}{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}. \tag{3.75}$$

(Ver Apêndice A).

O algorítimo descrito até este ponto pressupõe que o potencial esteja fixo, ou seja, é conhecido. Com efeito, podemos determiná-lo em todos os pontos da malha. Do contrário, teríamos de recorrer a alguma outra lei física para determiná-lo. Uma vez que iremos considerar o supercondutor apenas na presença de campo magnético aplicado, podemos trabalhar no calibre de Coulomb $\varphi = 0$.

4

Métodos de Paralelização do Algoritmo $\psi - U$

4.1 Conceitos Básicos Sobre Paralelização com Tecnologia CUDA® e Linguagem C

4.1.1 Introdução

A descrição das teorias deste capítulo tiveram como base as videoaulas: "Introduction to Parallel Programming" do site $www.udacity.com$ e o livro de Sanders e Kandrot[25].

Na Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Campus de Bauru, o método $\psi - U$ foi originalmente implementado em linguagem Fortran pelo professor André Luiz Malvezzi e posteriormente aprimorado pelo professor Edson Sardella. Neste trabalho, traduzimos este código para a linguagem C juntamente com técnicas de paralelização. Antes de descrever como paralelizamos o algoritmo $\psi - U$, iremos descrever a tecnologia CUDA.

O significado da palavra "paralelização" em computação está relacionado com a possibilidade de que trechos de código de um programa sejam executados por vários processadores. De fato, uma das possibilidades de se alcançar tal feito é direcionando o trecho de código para vários computadores uniprocessados em uma rede denominada *cluster*, com utilização de MPI (Message Passing Interface) - um sistema de transferência de processamentos entre os computadores conectados aos nós do cluster - a fim de se otimizar o

tempo de execução (caso de códigos com tempo de processamento e custo computacional altos). Uma outra possibilidade de implementação de paralelização surgiu por meio da empresa NVIDIA®, famosa por fabricar placas de vídeo cuja GPU (Graphics Processing Unit - Unidade de Processamento Gráfico), quando utilizada em conjunto com a tecnologia CUDA® (Compute Unified Device Architecture), é capaz de comportar a tarefa de paralelização semelhantemente ao *cluster* mencionado. As principais diferenças em se trabalhar com esses dois tipos de sistemas, cluster com MPI e CUDA, podem ser enumeradas por suas vantagens e desvantagens. As vantagens de se trabalhar com CUDA são: a diminuição do espaço físico e de equipamentos, uma vez que, via de regra, cluster com MPI necessita mais de um computador para execução dos processamentos em paralelo, enquanto CUDA pode ser implementada utilizando-se apenas uma máquina com o hardware da NVIDIA; substituição do intercâmbio de processamentos via MPI, o qual enfrenta um gargalo - comumente denominado *bottleneck* - pelo intercâmbio de processamentos via CUDA, já que a maioria das topologias e protocolos de rede apresentam uma velocidade de transferência de dados inferior à do barramento de comunicação entre memória e processador; a utilização de memória compartilhada ao se utilizar CUDA é um método de compartilhamento de dados mais eficaz que a utilização de memória distribuída ao se utilizar cluster com MPI, pois neste último caso, um módulo de memória pode ser acessado diretamente por apenas um dos nós do cluster, ou seja, não há acesso simultâneo. Já as principais desvantagens de se trabalhar com CUDA em vez de cluster com MPI seriam: menor escalabilidade, significando que, dado um aumento da carga de processamentos em um cluster, é possível adicionar outros nós para subdivisão dos processos, enquanto na paralelização com CUDA - quando fazemos referência à utilização de uma única máquina - a escalabilidade depende da quantidade de slots livres nesta máquina. Devemos considerar, ainda, que existe a possibilidade de se trabalhar com ambas tecnologias, CUDA e cluster com MPI, caso haja várias máquinas com software e

hardware necessários instalados.

Para que a paralelização possa ser implementada nos moldes propostos neste tralhalho, é necessária, além da GPU, também da linguagem CUDA, responsável por modelar a paralelização, que também será responsável pelo intercâmbio da comunicação entre os conjuntos CPU + memória principal (referenciado como *host*) e GPU + memória da placa de vídeo (referenciado como *device*), conforme ilustrado pela Figura 4.1. Esse conjunto forma a plataforma de computação paralela da NVIDIA. Outros itens necessários, como: compilador, drivers específicos para comunicação entre o device e o sistema operacional utilizado, e o pacote *CUDA development toolkit* - que contém as bibliotecas de modelagem dos problemas paralelizáveis - podem ser obtidos no site da fabricante $www.nvidia.com$ gratuitamente.

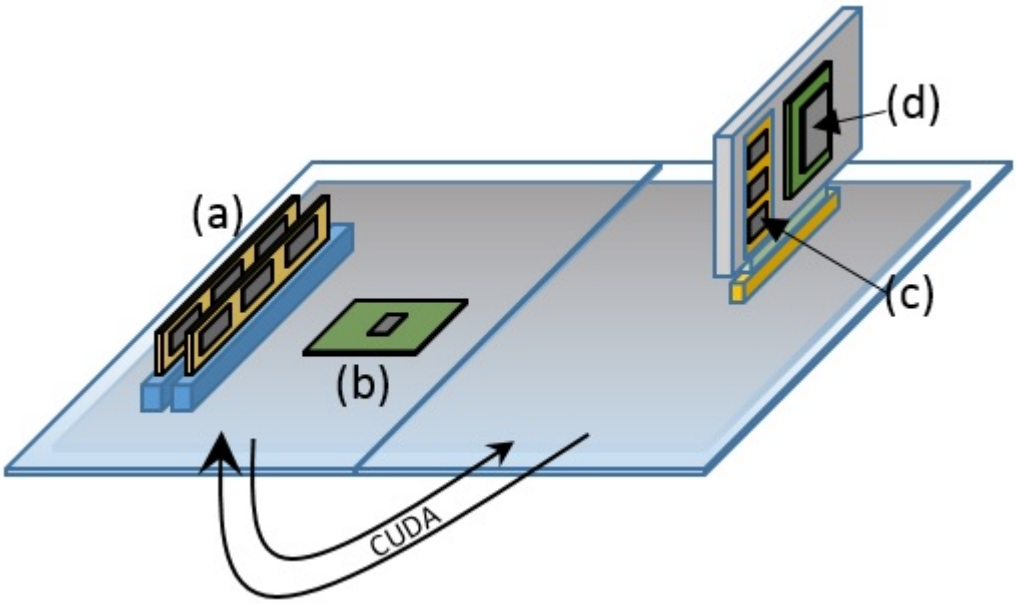


Figura 4.1: Hardware básico para computação paralela com CUDA: Com a implementação da placa de vídeo (device), o programa, antes escrito para ser executado apenas no host ((a) Memória principal e (b) CPU), agora também pode ser executado no device ((c) Memória e (d) GPU). Fonte: Próprio autor.

Diferentemente de uma CPU (Central Processing Unit - Unidade Central de Processamento) composta geralmente por um núcleo com *ULA* (Unidade Lógica Aritmética)

e uma unidade de controle, as GPUs da NVIDIA possuem várias ULAs denominadas *CUDA cores*, que são os núcleos CUDA para onde são direcionadas as partes do algoritmo consideradas críticas em termos de tempo de processamento (geralmente devido ao grande volume de dados e/ou laços de repetição multi dimensionados contendo funções de tamanho e complexidade consideráveis para cálculo, o que é o caso da simulação computacional de um material supercondutor com o método $\psi - U$ implementado).

A Figura 4.2 resume os passos para implementação da paralelização.

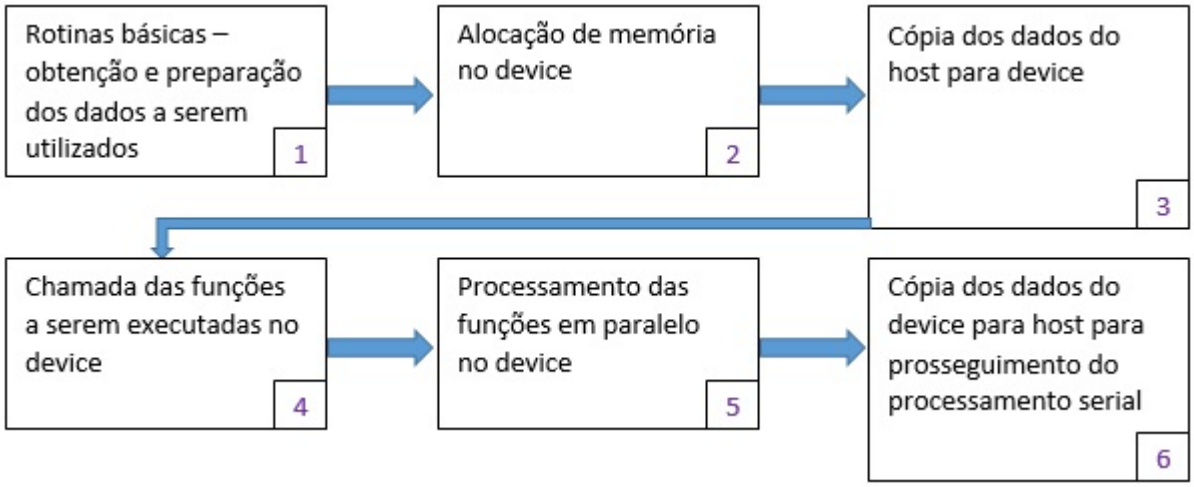


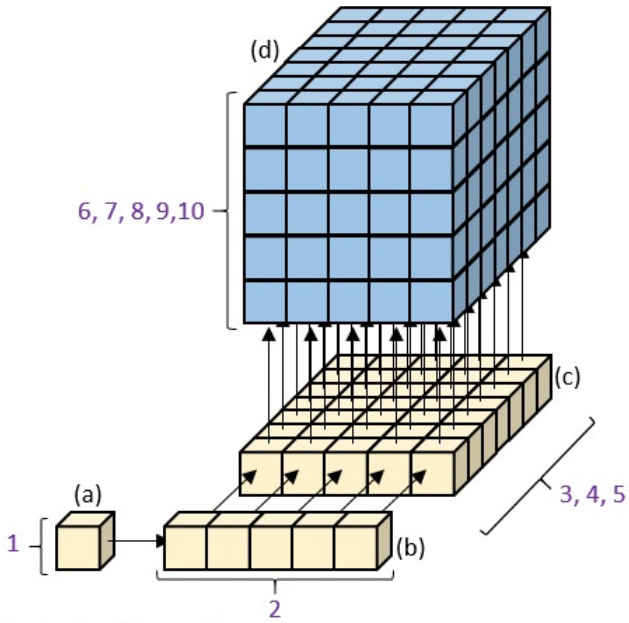
Figura 4.2: Estrutura básica de processamento em paralelo. Fonte: Próprio autor.

Como exemplo de código a ser processado pela GPU, um laço "for" de C/C++ com índices i, j, k, pode ser subdividido em partes denominadas *threads*, cada qual sendo executada por uma ULA (core) da GPU. O esquema simplificado de funcionamento consiste no seguinte: Um algoritmo sendo executado serialmente no host, em dado momento executa a alocação de memória no device e transfere os dados necessários para o processamento paralelo por meio da linguagem CUDA - que consegue acessar ambas as memórias e intercambiar o controle do processamento. Na sequência, ocorrem as chamadas de funções que serão executadas no device, seguida da passagem de controle para a GPU, que se encarregará do processamento. Ao término dos processamentos e atualização da memó-

ria do device, ocorre a transferência para a memória principal e a passagem do controle do processamento da GPU para a CPU. Cabe salientar, ainda, que enquanto não ocorre a transferência do controle da GPU para a CPU, esta última não retoma o controle e não executa outros trechos de código do restante do programa.

Para que o item 2 da Figura 4.2 seja implementado, é necessário estabelecer um conceito fundamental para se trabalhar com paralelização e relacionado com o acesso das regiões de memória, denominado *flatten* (achatamento). Antes, vamos analizar como a memória é alocada em C/C++ e, posteriormente, com CUDA. Tomando como exemplo um vetor 3D (aqui denominado "vetor3D"), o acesso das posições de memória deste vetor pode ser realizado pelos usuais índices i, j, k na forma: vetor3D[i][j][k]. Este vetor 3D poderia ser alocado dinamicamente conforme Figura 4.3 utilizando uma função *malloc()* em conjunto com os laços de repetição.

Assim, pela Figura 4.3, vemos que em (a) uma região de memória guarda como dado um endereço de memória (por isso recebe o nome de ponteiro). A região de memória apontada por esse ponteiro é o primeiro bloco de (b). Caso uma função do tipo malloc() seja utilizada, semelhantemente ao que ocorre na linha 2 do algoritmo desta figura, memória é alocada a partir do primeiro bloco apontado por (a) e a quantidade total desta alocação (largura*sizeof(double)) é a contida na chave indicada por 2 na figura. Como todas essas posições de memória alocada são também do tipo ponteiro, estas têm igualmente a capacidade de apontar para outras regiões de memória e, quando utilizadas a função malloc() em conjunto com um laço de repetição (conforme linhas 3 a 5 do algoritmo) esses ponteiros também podem alocar mais regiões de memória, e assim sucessivamente, até que os últimos ponteiros apontem para regiões de memória cuja alocação servirá para armazenamento dos dados do programa em (d). Todo esse processo leva à seguinte conclusão: vetores multi dimensionados em C/C++ na verdade são conjuntos de vetores unidimensionais. Por fim, o acesso a um dado dessa região que se encontre, por




```
1  double ***vetor3D;
2  vetor3D = (double ***) malloc(largura*sizeof(double **));
3  for(int i = 0; i < largura; i++){
4        vetor3D[i] = (double **) malloc(profundidade*sizeof(double *));
5  }
6  for(int i = 0; i < largura; i++){
7        for(int j = 0; j < profundidade; j++){
8              vetor3D[i][j] = (double *) malloc(altura*sizeof(double));
9        }
10 }
```

Figura 4.3: Esquema simplificado de alocação dinâmica de memória em C/C++. Os cubos em (a), (b) e (c) representam regiões de memória que armazenam o endereço de outras regiões de memória (por isso são denominados de ponteiros). Em (d) encontra-se o espaço alocado para ser utilizado pelos dados processados. Fonte: Próprio autor.

exemplo, na posição [4][6][4] de vetor3D, na verdade é um comando para que este vetor acesse o ponteiro 4 de (b), ponteiro 6 de (c) e região 4 da memória alocada em (d).

Cabe salientar que também é possível a alocação de memória em C/C++ utilizando apenas um comando de criação de variável, do tipo:

$$double\ teste[quantidade], \tag{4.1}$$

mas a explicação do procedimento com utilização de ponteiros, além de ilustrar como esse processo é executado em nível mais baixo nesta linguagem, esclarece melhor a alocação unidimensional em CUDA, e as linhas de execução - threads - também têm semelhança

com a forma como a memória é alocada tridimensionalmente. Além disso, para os que trabalham com a modelagem de problemas e estrutura de dados, esses conceitos são de suma importância.

Em CUDA, a alocação dinâmica de memória no device - utilizando a função "cudaMalloc()" - deve ser realizada em uma única etapa, pois esta função não permite multi dimensionamento da memória no device (como descrito na abordagem envolvendo malloc, memória principal e laços de repetição). Assim, devemos utilizar o conceito de achatamento de índice a fim de trabalharmos com alocação e transferência de dados entre device e host. A Figura 4.4 exemplifica o achatamento de índice, enquanto as linhas de programação da Figura 4.5 são um exemplo de alocação de memória no device.

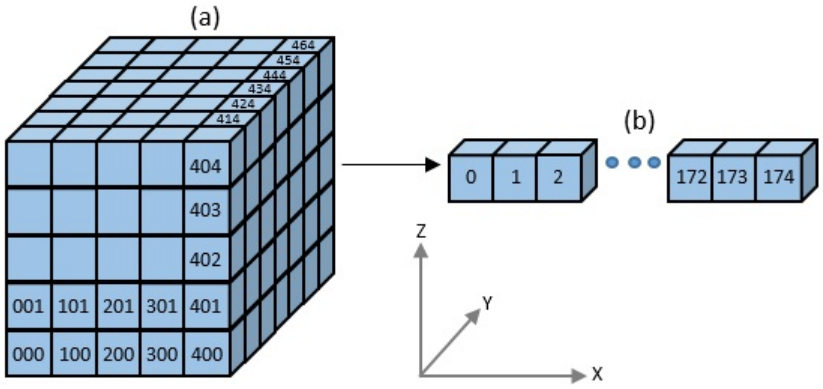


Figura 4.4: Achatamento de índice. Em (a), temos o vetor tridimensional antigo, e em (b), o novo vetor unidimensional, ambos com quantidades idênticas de memória alocada. Após esse processo, o acesso às posições do novo vetor em (b) - o qual está relacionado com as posições do vetor tridimensional em (a) - é feito por meio de um índice unidimensional. Fonte: Próprio autor.

Pela Figura 4.4, as dimensões do paralelepípedo em (a) são dadas por X (largura), Y (profundidade) e Z (altura). Como (b) é unidimensional mas possui a mesma quantidade de posições de memória que (a), sua dimensão tem tamanho $X * Y * Z$. Então, para acessar cada uma das posições de memória do vetor em (b), devemos usar a relação:

$$i \; + \; j * X \; + \; k * X * Y \, \text{ou} \, i \; + \; X * (j \; + \; k * Y) \; . \tag{4.2}$$

```
1  double *vetor3D; //Na verdade, um vetor 1D com índice 3D "achatado"
2  cudaMalloc((void**)&vetor3D, X*Y*Z *sizeof(double));
```

Figura 4.5: A linha 1 cria um ponteiro para memória do tipo específico que se quer trabalhar, enquanto na linha 2, além da quantidade e tamanho desses espaços de memória, o comando retorna um ponteiro da memória alocada no device para vetor3D. Fonte: Próprio autor.

Como exemplo, considerando que o paralelepípedo (a) da Figura 4.4 tem dimensões $X = 5$, $Y = 7$ e $Z = 5$, se todas as posições de (a) forem copiadas na sequência, desde [0][0][0] até [4][6][4] para (b), o índice equivalente para, por exemplo, a antiga posição [4][6][4], seria: vetor3D[4 + 6*5 + 4*5*7] = vetor3D[174] neste novo vetor.

Após estabelecido o "achatamento" dos índices dos vetores, é possível iniciar o procedimento de cópia dos dados do host para o device. A função utilizada para isso é dada por:

$$cudaMemcpy(campo\ 1,\ campo\ 2,\ campo\ 3,\ campo\ 4)\ , \tag{4.3}$$

a qual efetua a transferência de dados entre host e device, e atua da seguinte forma: campo 1 é o nome do ponteiro para região de memória destino, campo 2 é o nome do ponteiro para região de memória fonte, campo 3 é o tamanho da transferência e campo 4 é o comando que indica o sentido do fluxo desses dados. A Figura 4.6 exemplifica as transferências: (a) do Host para o Device e (b) do Device para o Host.

```
(a) cudaMemcpy(dev_vetor1D, hos_vetor1D, X*Y*Z*sizeof(double),
                            cudaMemcpyHostToDevice);

(b) cudaMemcpy(hos_vetor1D, dev_vetor1D, X*Y*Z*sizeof(double),
                            cudaMemcpyDeviceToHost);
```

Figura 4.6: (a) Transferência *HostToDevice*. (b) Transferência *DeviceToHost*. Fonte: Próprio autor.

Após a transferência, o device está preparado para a execução do trecho crítico do programa. Este trecho - geralmente um laço de repetição com tempo de execução crítico -

deve ser transformado em uma função - referenciada como *kernel* - cujos parâmetros são os vetores a serem passados por referência. Na Figura 4.7, temos um exemplo de trecho de código que é executado apenas em série, enquanto a Figura 4.9 representa o mesmo código paralelizado.

```
1  #include <stdio.h>
2  #define X = 20
3  #define Y = 14
4  #define Z = 15
5
6  int main(void){
7      double vetor3D[X][Y][Z];
8      /*
9        Atribuição de valores ao vetor3D
10       *
11      */
12     int i, j, k;
13     for(i = 0; i < X; i++){
14         for(j = 0; j < Y; j++){
15            for(k = 0; k < Z; k++){
16               vetor3D[i][j][k] = (N*0.001)/(i*j+k*50);
17            }
18         }
19      }
20      return EXIT_SUCCESS;
21 }
```

Figura 4.7: Código de execução serial. Fonte: Próprio autor.

A seguir, vamos tratar de outros conceitos relacionados às linhas de processo paralelo, as *threads*, *blocks* e *grids*.

4.1.2 Threads, Blocks e Grids

Os threads blocks e grids são elementos utilizados para subdivisão dos processos a serem paralelizados. Esses termos têm relação com as capacidades de processamento das GPUs e também com a maneira como o processamento é executado, se uni, bi ou tridimensionalmente (na verdade, os problemas a serem paralelizados podem ter até mais que três dimensões, dependendo das especificações das GPUs utilizadas). Na Seção 4.2, empre-

garemos esses conceitos na simulação de um material supercondutor levando em conta as três dimensões.

As threads constituem o elemento mais básico da computação paralela. Para processos grandes e que ultrapassam a capacidade das GPUs de execução simultânea de threads, estas podem ser subdivididas em conjuntos denominados *blocks* e *grids* - blocos e grades - que também possuem limites, dependendo das especificações da GPU. Para processos menores, mas cujo problema possui mais de uma dimensão, tais recursos de subdivisão também são importantes, pois é possível relacionar cada dimensão do problema a ser tratado com as dimensões dos blocos de threads e da grade de blocos.

A quantidade de processos que podem ocorrer em paralelo depende das especificações da GPU, e uma delas é a capacidade computacional. Esta capacidade está relacionada à quantidade de dimensões que se pode trabalhar e quantidade de elementos que cada uma dessas dimensões comporta. No caso, por exemplo, de uma GPU modelo NVIDIA® GeForce® 770, com capacidade computacional 3.0 - a configuração que foi utilizada neste trabalho - é possível trabalhar com *thread blocks* (blocos de threads) tridimensionais e *block grids* (grade/grid de blocos) também tridimensionais, com tamanho das dimensões de um grid de até $2^{31} - 1$ x 65535 x 65535 blocos, e dimensões de um bloco até 1024 x 1024 x 64 threads (A quantidade limitada de CUDA cores, 1536 para esta placa, obviamente indica que há uma subdivisão implícita dos processamentos em tempo de execução). Grids de blocos e blocos de threads podem ser representados por um tipo dim3, por exemplo: nBlocks(blockDim.x, blockDim.y, blockDim.z), onde os argumentos de "nBlocks" são as dimensões desse grid, e caso o mesmo tenha menos que 3 dimensões, podemos suprimir o valor do segundo e/ou terceiro argumento, o que é o caso da variável nBlocks do código analisado, cujo grid é 2D. Ainda, caso tenham apenas 1 dimensão, tal variável pode ser do tipo int, como é o caso de nThreads.

A Figura 4.8 representa o problema de dimensionamento da paralelização denotada

no código da Figura 4.9, pois o problema tratado é do tipo 3D. Pelo código da Figura 4.9, as linhas 6 a 13 são o kernel que representa a paralelização dos laços "for" das linhas 13 a 19 da Figura 4.7. Para este problema, que possui dimensões $X = 20$, $Y = 14$ e $Z = 15$, determinou-se que a profundidade e a altura seriam determinados por um grid 2D de blocos, onde a dimensão da profundidade é dada por gridDim.x, enquanto a dimensão da altura é dada por gridDim.y. Já a largura é dada pelo conjunto de threads de cada um dos blocos do grid, ou seja, blockDim.x. Por fim, temos o número total de threads dado por: largura do grid x altura do grid x quantidade de threads de cada bloco desse grid.

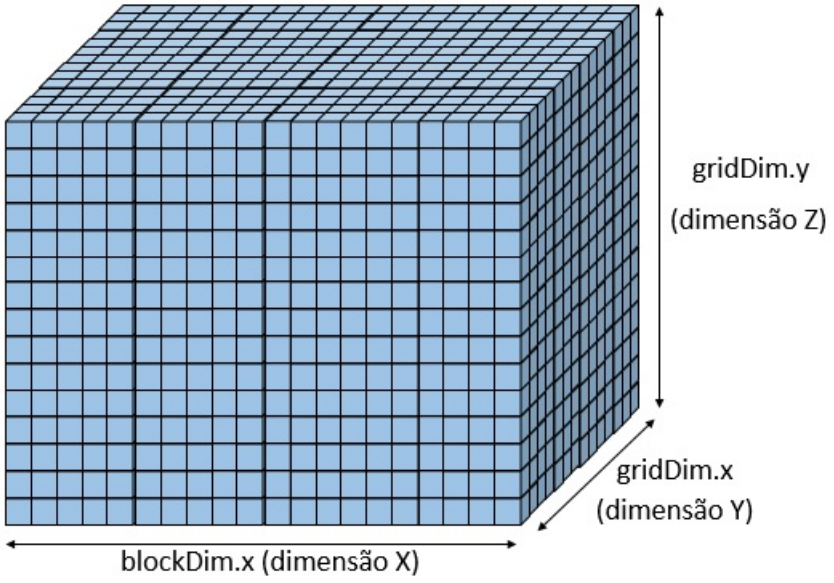


Figura 4.8: Dimensionamento em 3D do processo paralelizado. Fonte: Próprio autor.

Na sequência, o código da Figura 4.9 é explicado com base na sequência contida na Figura 4.2.

Pela Figura 4.9, temos que o início efetivo do programa ocorre na linha 15, com criação das variáveis necessárias nas linhas 16 a 18 e sequência de código executado serialmente na CPU conotado pelas linhas 19 a 22. Na linha 23 ocorre a alocação dinâmica de memória no device. Nas linhas 24 e 25 ocorre a cópia da memória contida em vetor3D do host para o device, cujo ponteiro para esta região de memória no device é dev_vetor3D.

```
1  #include <stdio.h>
2  #define X = 20
3  #define Y = 14
4  #define Z = 15
5
6  __global__ void kernel(double *vetor3D){
7      int i = threadIdx.x;
8      int j = blockIdx.x;
9      int k = blockIdx.y;
10     int indice = i + j*gridDim.x + k*gridDim.x*gridDim.y;
11
12     vetor3D[indice] = (N*0.001)/(i*j+k*50);
13 }
14
15 int main(void){
16     double vetor3D[X*Y*Z], dev_vetor3D;
17     dim3 nBlocks(Y, Z); //grid 2D de blocos
18     int  nThreads = X; //bloco 1D de threads
19     /*
20        Atribuição de valores ao vetor3D
21       *
22      */
23     cudaMalloc((void**)&dev_vetor3D, X*Y*Z*sizeof(double));
24     cudaMemcpy(dev_vetor3D, vetor3D,
25                              X*Y*Z*sizeof(double), cudaMemcpyHostToDevice);
26     kernel<<<nBlocks, nThreads>>>(dev_vetor3D);
27     cudaMemcpy(vetor3D, dev_vetor3D,
28                              X*Y*Z*sizeof(double), cudaMemcpyDeviceToHost);
29     /*
30       Sequência com processamento serial
31       *
32      */
33     return EXIT_SUCCESS;
34 }
```

Figura 4.9: Código de execução paralela para o antigo laço “for”. Fonte: próprio autor.

Na linha 26 ocorre a chamada da função kernel a ser executada no device, cujos parâmetros entre os sinais triplos de “menor que” e “maior que” são o tamanho das dimensões X, Y e Z do problema a ser tratado (sendo X o valor de nThreads, Y e Z o primeiro e segundo campo de nBlocks, respectivamente), enquanto o parâmetro entre parênteses é o ponteiro para a região de memória alocada no device, importante no sentido de que esse ponteiro permitirá a transferência dos dados processados no device de volta para a memória principal do host. No kernel das linhas 6 a 13, a palavra reservada “__global__” indica que tanto o host quanto o device podem acessar a função, enquanto “void” indica que tal kernel não retorna valor após sua execução. Nas linhas 7 a 9, temos a declaração das variáveis que servirão como índices que indicam o thread executado. Na linha 10

ocorre o processo de flatten, necessário para tratar o vetor unidimensional como sendo tridimensional, onde gridDim.x e gridDim.y são, respectivamente, a profundidade e a altura do cubo do problema. Na linha 12, temos que, como o vetor3D terá várias posições de memória processadas paralelamente, não é mais necessário o aninhamento deste comando em laços de repetição, pois cada posição do vetor3D será executada em paralelo com as demais, e o resultado deste cálculo será armazenado seguindo o posicionamento definido pela variável "indice". Ao fim, ocorre a cópia do conteúdo da memória do device para o host nas linhas 27 e 28 e, na sequência, o processamento serial.

4.2 Implementação da Paralelização no Método $\psi - U$

4.2.1 Características Gerais do Sistema Simulado

O programa foi traduzido do código original em Fortran para C. De forma geral, o que este programa faz é modelar um material em formato 3D de dimensões mesoscópicas com configurações de um SQUID (*Superconducting Quantum Interference Device*) com uma constrição. Em seguida, são aplicados os conceitos relacionados ao comportamento de materiais supercondutores, de acordo com as equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo discretizadas. Após leitura dos dados de entrada, a modelagem do material toma a forma da Figura 4.10.

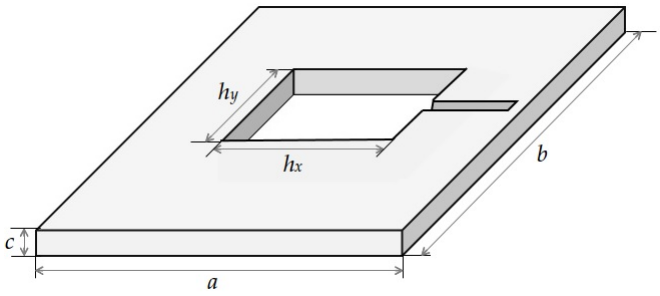


Figura 4.10: Ilustração da geometria do supercondutor em forma de geometria SQUID com uma constrição na lateral direita da fenda. Fonte: Próprio autor.

Com o objetivo de exemplificar como foi realizada a paralelização do código, toma-

remos como base as relações de recorrência (3.70) e (3.39). O algoritmo $\psi - U$ foi desenvolvido inicialmente para simular um material com domínio simplesmente conexo (sem defeitos). Assim, foi necessário criar uma variável do tipo booleano que recebe os valores *true* (que indica a região supercondutora) ou *false* (que indica o vazio).

Na próxima Subseção, descreveremos como implementar essas relações de recorrência em CUDA C. Para isso, denotaremos a variável booleana como bulk_F, o parâmetro de ordem em diferentes instantes de tempo como F e G, as variáveis de ligação, também em diferentes instantes de tempo, como UX, UY e UZ e VX, VY e VZ.

4.2.2 Implementação da Paralelização do Método $\psi - U$

Na implementação do método $\psi - U$, trabalharemos com números complexos de dupla precisão. No entanto, o tipo de número complexo de dupla precisão utilizado para se trabalhar com CUDA não pode ser o usual <complex> double de C/C++. O tipo utilizado neste trabalho foi cuDoubleComplex, que possui parte real e parte imaginária, além de algumas operações com números complexos implementada. Para execução de tais operações, são necessárias funções da biblioteca cuComplex.h (localizada na pasta \usr\include em Linux, caso a instalação do pacote CUDA toolkit tenha sido realizada corretamente). As principais funções desta biblioteca utilizadas neste trabalho são: *cuCadd(num1, num2)* para adição, *cuCMul(num1, num2)* para multiplicação, *cuCabs(num)*, que retorna o valor absoluto, *cuConj(num)*, que retorna o conjugado de um número complexo, *cuCimag(num)*, que retorna a parte imaginária, *cuCreal(num)*, que retorna a parte real, *make_cuDoubleComplex(num1, num2)*, que constrói um número complexo de dupla precisão a partir de dois números de ponto flutuante ou inteiros. Infelizmente, esta biblioteca não possui uma função para calcular exponencial de um número complexo, mas utilizando conceitos relacionados a números complexos, a mesma foi elaborada e adicionada ao programa principal e tem o formato ilustrado na Figura 4.11.

```
1  __host__ __device__ static __inline__
2                          cuDoubleComplex cuCexp(cuDoubleComplex complexo){
3        cuDoubleComplex result;
4        double sen_y, //seno da parte complexa
5               cos_y; //cosseno da parte complexa
6
7        double e_x = exp(complexo.x);  //exponencial da parte real "x"
8        sen_y = sin(complexo.y); //seno "sen" da parte complexa "y"
9        cos_y = cos(complexo.y); //cosseno "cos" da parte imaginária "y"
10
11       result.x = e_x * cos_y;
12       result.y = e_x * sen_y;
13       return result;
14 }
```

Figura 4.11: Função básica para cálculo de exponencial de número do tipo cuDoubleComplex.

Assim, considerando a sequência da paralelização indicada pela Figura 4.2, temos que, após os processos seriais - tais como inicialização de constantes, alocação dinâmica de memória, achatamento de índice dos vetores utilizados na simulação e modelagem do sistema simulado - memória é alocada no device conforme mostrado na Figura 4.12.

```
276    cuDoubleComplex *F  = (cuDoubleComplex *)(malloc((Nx+1)*(Ny+1)*(Nz+1)*sizeof(cuDoubleComplex)));
277    cuDoubleComplex *dev_F;
278    cudaMalloc((void**)&dev_F,                    (Nx+1)*(Ny+1)*(Nz+1)*sizeof(cuDoubleComplex)) ;
279
280    //link variables
281    cuDoubleComplex *VX = (cuDoubleComplex *)(malloc(Nx*(Ny+1)*(Nz+1)    *sizeof(cuDoubleComplex)));
282    cuDoubleComplex *dev_VX;
283    cudaMalloc((void**)&dev_VX,                   Nx*(Ny+1)*(Nz+1)    *sizeof(cuDoubleComplex)) ;
```

Figura 4.12: Exemplo de alocação de memória: o vetor F, utilizado para guardar o valor do parâmetro de ordem, e a variável VX, variável de ligação, são alocadas no host, enquanto dev_F e dev_VX, no device.

Após a alocação de memória e outros processos seriais, é efetuada a cópia dos dados do vetor localizado no host para o respectivo vetor no device, conforme exibido na Figura 4.13.

```
887        cudaMemcpy(dev_F,      F,      (Nx+1)*(Ny+1)*(Nz+1)    * sizeof(cuDoubleComplex),  cudaMemcpyHostToDevice);
888        cudaMemcpy(dev_G,      G,      (Nx+1)*(Ny+1)*(Nz+1)    * sizeof(cuDoubleComplex),  cudaMemcpyHostToDevice);
889        cudaMemcpy(dev_VX,     VX,     Nx*(Ny+1)*(Nz+1)        * sizeof(cuDoubleComplex),  cudaMemcpyHostToDevice);
890        cudaMemcpy(dev_UX,     UX,     Nx*(Ny+1)*(Nz+1)        * sizeof(cuDoubleComplex),  cudaMemcpyHostToDevice);
```

Figura 4.13: Cópia dos dados do vetor localizado no host para o respectivo vetor no device.

A chamada para o kernel que calcula o parâmetro de ordem e as variáveis de ligação é

descrita a seguir. A Figura 4.14 é uma variável do tipo dim3 utilizada para dimensionar[1] o cálculo do parâmetro de ordem com relação às posições consideradas válidas do material, ou seja, desconsiderando as regiões de vácuo, e a Figura 4.15 é a chamada efetiva do kernel.

```
922                 dim3 a_(119, 119);
```

Figura 4.14: Declaração de variáveis do tipo dim3.

```
929                 laco1<<<a_, 4>>>(dev_F, dev_G, dev_VX, dev_VY, dev_VZ, dev_bulkF, con);
```

Figura 4.15: Chamada de kernel.

O kernel da Figura 4.16 está relacionado ao cálculo do parâmetro de ordem por meio das variáveis de ligação, tal como estabelecido nas equações (3.70) e (3.39).

```
__global__ void laco1(cuDoubleComplex *F,  cuDoubleComplex *G, cuDoubleComplex *VX,
                      cuDoubleComplex *VY, cuDoubleComplex *VZ, bool *bulkF, kon con){

    size_t i = blockIdx.x +  (con.jx1 + 1);
    size_t j = blockIdx.y +  (con.jy1 + 1);
    size_t k = threadIdx.x + (con.jz1 + 1);
    size_t Nx = con.Nx, Ny = con.Ny;

    if(bulkF[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))]){
        F[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))] = cuCadd(cuCadd(G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))], cuCmul(con.rxC,
                                       cuCadd(cuCmul(VX[i + Nx*(j + k*(Ny+1))], G[(i + 1) + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))]),
                                       cuCadd(cuCmul(G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))], con.doisNeg),
                                       cuCmul(cuConj(VX[(i - 1) + Nx*(j + k*(Ny+1))]),
                                       G[(i - 1) + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))])))), cuCadd(cuCmul(con.ryC,
                                       cuCadd(cuCmul(VY[i + (Nx+1)*(j + k*Ny)], G[i + (Nx+1)*((j + 1) + k*(Ny+1))]),
                                       cuCadd(cuCmul(G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))], con.doisNeg),
                                       cuCmul(cuConj(VY[i + (Nx+1)*((j - 1) + k*Ny)]),
                                       G[i + (Nx+1)*((j - 1) + k*(Ny+1))])))), cuCadd(cuCmul(con.rzC,
                                       cuCadd(cuCmul(VZ[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))], G[i + (Nx+1)*(j + (k + 1)*(Ny+1))]),
                                       cuCadd(cuCmul(G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))], con.doisNeg),
                                       cuCmul(cuConj(VZ[i + (Nx+1)*(j + (k - 1)*(Ny+1))]),
                                       G[i + (Nx+1)*(j + (k - 1)*(Ny+1))])))), cuCmul(
                                       cuCmul(con.cC, G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))]),
                                       make_cuDoubleComplex(1. - cuCabs(cuCmul(G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))],
                                       G[i + (Nx+1)*(j + k*(Ny+1))])), 0.)))));
    }
}
```

Figura 4.16: Corpo do kernel referido.

No kernel da Figura 4.16, “con” é uma struct contendo informações a respeito das constantes envolvidas nas equações (3.70) e (3.39), $(N_x + 1), (N_y + 1)$ e $(N_z + 1)$ são as dimensões do sistema simulado.

[1] Os valores consignados nesta variável, (119, 119), conforme pode ser observado na Figura 4.14, estão relacionados com as dimensões do sistema simulado que descreveremos no próximo capítulo. Essa e outras variáveis poderão assumir outros valores de acordo com as dimensões do material.

Código sem paralelização	Código com paralelização	Valor de campo magnético aplicado	Ganho de velocidade
13808,167294 s	1880,789670 s	0,000	7,34 x
47645,074205 s	6183,238162 s	0,001	7,71 x
62337,314313 s	8036,097813 s	0,002	7,75 x
62189,505769 s	8036,148329 s	0,003	7,74 x
62517,565444 s	8036,126341 s	0,004	7,78 x

Tabela 4.1: Tempos de execução do código para alguns valores de campo aplicado H.

Executamos este código para alguns valores de campo aplicado. Os parâmetros usados estão especificados no Capítulo 5. Notamos que há um ganho de tempo com relação ao tempo de execução em CPU. Na Tabela 4.1 são mostrados os ganhos de tempo do código paralelizado com relação ao código não paralelizado, considerando alguns valores de campo aplicado H. Para maiores detalhes sobre a implementação do algoritmo, ver Apêndice B.

5 Supercondutor em Forma de um SQUID com uma Constrição

5.1 Introdução

Nas três últimas décadas, tornou-se bem conhecido que os efeitos de confinamento de vórtices em supercondutores torna-se importante quando o tamanho da amostra tornar-se comparável ao comprimento de coerência $\xi(T)$ e/ou ao comprimento de penetração de London $\lambda(T)$. Em particular, como consequência dos efeitos de desmagnetização, quando o tamanho da amostra ao longo da direção do campo magnético aplicado é menor do que as dimensões laterais da sua seção transversal, o campo magnético local perto das bordas da amostra é reforçado e interage com as correntes de blindagem. Ultimamente, com o advento de computadores de alto desempenho, tem sido possível empregar o modelo de Ginzburg-Landau tri-dimensional no estudo da rede de vórtices. Embora o tempo computacional ainda seja muito custoso para se fazer o laço de campo completo para o cálculo da magnetização, para supercondutores com dimensões da ordem de 10ξ é possível de se realizar uma simulação computacional em tempos factíveis.

O perfil de campo magnético local de um supercondutor mesoscópico em forma de geometria SQUID (*superconducting quantum interference device*) foi estudado usando o modelo de Ginzburg-Landau genuinamente 3D [26]. Na presente monografia, estende-

remos este estudo para um SQUID com uma pequena constrição no extremo da fenda conforme ilustrado na Figura 4.10.

5.2 Parâmetros Utilizados e Metodologia

As simulações foram feitas considerando um SQUID com as seguintes dimensões: espessura $c = 0,5\xi(0)$, largura e comprimento iguais a $a = b = 12\xi(0)$. O parâmetro de Ginzburg-Landau usado foi de $\kappa = 1$. A razão para essa escolha é simplesmente por uma questão de conveniência, pois valores de κ altos implicam em um maior tempo computacional, pois passos temporais decrescem com $1/\kappa^2$, conforme podemos observar na equação (3.74). O furo no supercondutor tem dimensões $h_x = h_y = 2,4\xi(0)$ e para a largura da fenda consideramos dois *grid space*. Tomamos a caixa de simulação em tamanho suficientemente grande tal que o campo magnético local seja aproximadamente igual ao campo aplicado nas suas fronteiras; usamos $\mathscr{A} = \mathscr{B} = 19\xi(0)$ e $\mathscr{C} = 11\xi(0)$. A resolução da malha foi considerada como $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,1\xi(0)$, e a temperatura usada foi de $T = 0$.

O campo magnético aplicado foi aumentado adiabaticamente desde o valor $H = 0$ até um determinado valor máximo $H = 2H_{c2}(0)$ em incrementos de $\Delta H = 0,001H_{c2}(0)$. A simulação foi iniciada a partir do estado Meissner onde $\psi = 1$ e o campo local $\mathbf{B} = 0$ em todo espaço. Para cada valor de campo obtivemos o estado estacionário usando o método $\psi - U$ conforme descrito no Capítulo 3. Para os próximos valores de campo, foi considerado o estado inicial como sendo o estado estacionário do campo magnético aplicado anteriormente.

5.3 Resultados e Discussão

Nesta Seção iremos descrever os principais resultados obtidos da simulação com os parâmetros especificados na seção 5.2. Apresentaremos os resultados para a magnetização[1] e energia em função do campo aplicado, e as configurações da rede de vórtices através do parâmetro de ordem e do campo magnético local.

5.3.1 Magnetização e Energia

A Figura 5.1 ilustra a magnetização $4\pi M_z$ em função do campo aplicado H. O comportamento da curva M versus H exibido na figura é tipico de um supercondutor mesoscópico. A cada salto (descontinuidade) na curva temos a penetração de um ou mais vórtices. Algumas características interessantes podem ser notadas na figura conforme descrevemos a seguir.

Conforme a Figura 2.7, o estado Meissner é caraterizado pela ausência de vórtices, de tal modo que a magnetização tem um comportamento linear em função do campo aplicado, $4\pi\mathbf{M} = -\mathbf{H}$. Na figura em discussão, observamos que no intervalo de campo $0 \leq H \leq 0,444H_{c2}(0)$, na média, há um decrescimento aproximadamente linear de M com relação a H. No entanto, temos a penetração de vórtice. Por mais paradoxal que possa parecer, é como se tivéssemos um estado misto e um estado de Meissner coexistindo. Como veremos adiante, isto se deve ao fato da fenda e a constrição precipitarem as três primeiras nucleações de vórtices, porém estes se alojam nos defeitos, e, consequentemente, a região supercondutora é preservada. A partir da quarta penetração de vórtices a curva M versus H muda de comportamento e passa a ser, em média, crescente, conforme se espera de um supercondutor do tipo-II.

Na Figura 5.2 apresentamos o gráfico da energia total do supercondutor em função do

[1] A magnetização foi calculada de acordo com a definição de momento magnético. Em unidades reduzidas temos que $4\pi\mathbf{M} = \frac{1}{4\kappa^2 V}\int_V \mathbf{r}\times\mathbf{J}_s\, d^3r$, onde a integração é feita em todo o volume supercondutor V.

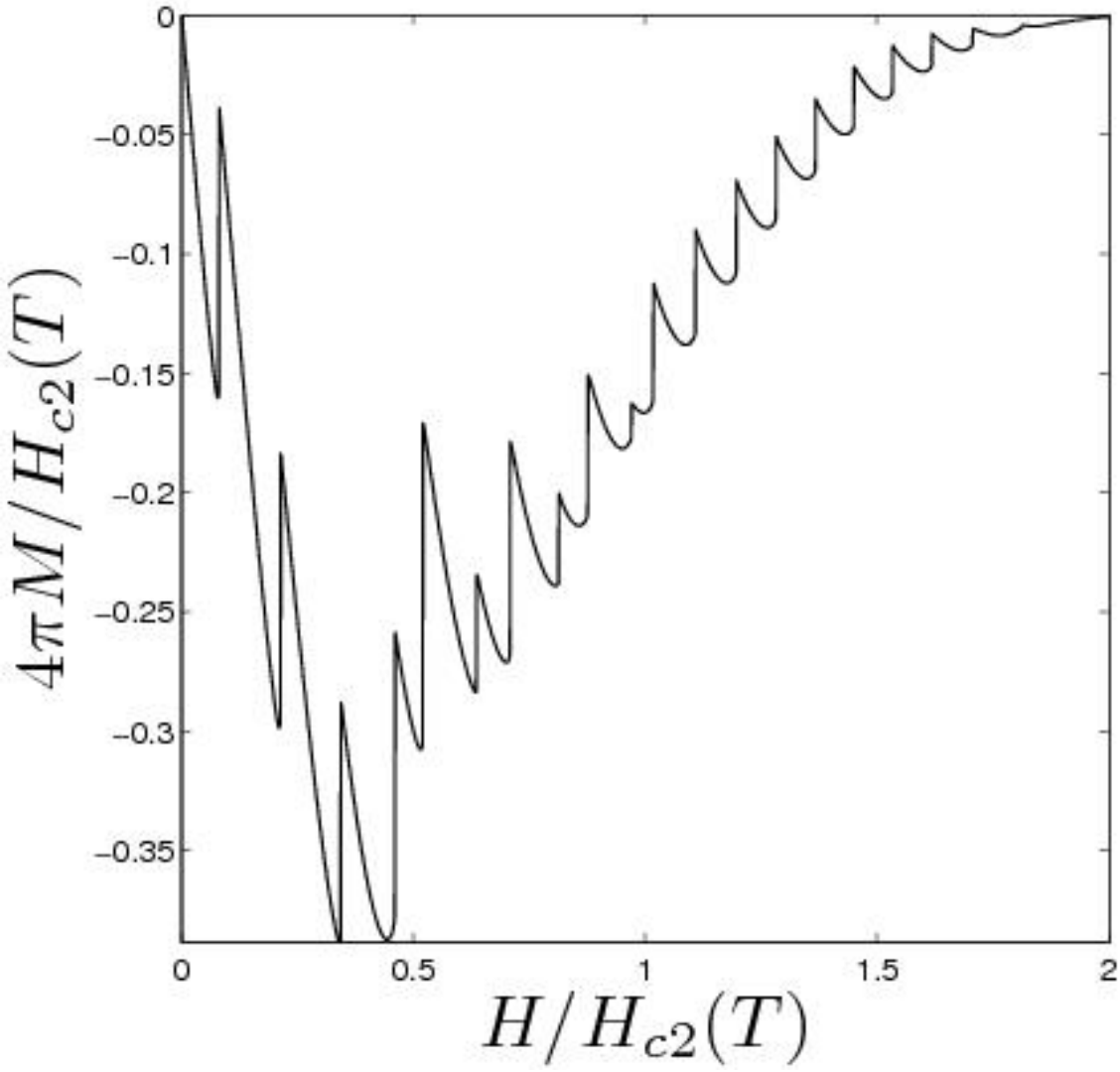


Figura 5.1: Magnetização versus campo aplicado.

campo aplicado. Conforme pode ser observado, a curva E versus H é aproximadamente contínua no intervalo $0 \leq H \leq 0.444H_{c2}(0)$, comportamento típico do estado Meissner; temos uma pequena descontinuidade apenas na primeira penetração. As descontinuidades somente começam a ocorrer para $H \geq 0.444H_{c2}(0)$. Isto reforça as afirmações explicitadas.

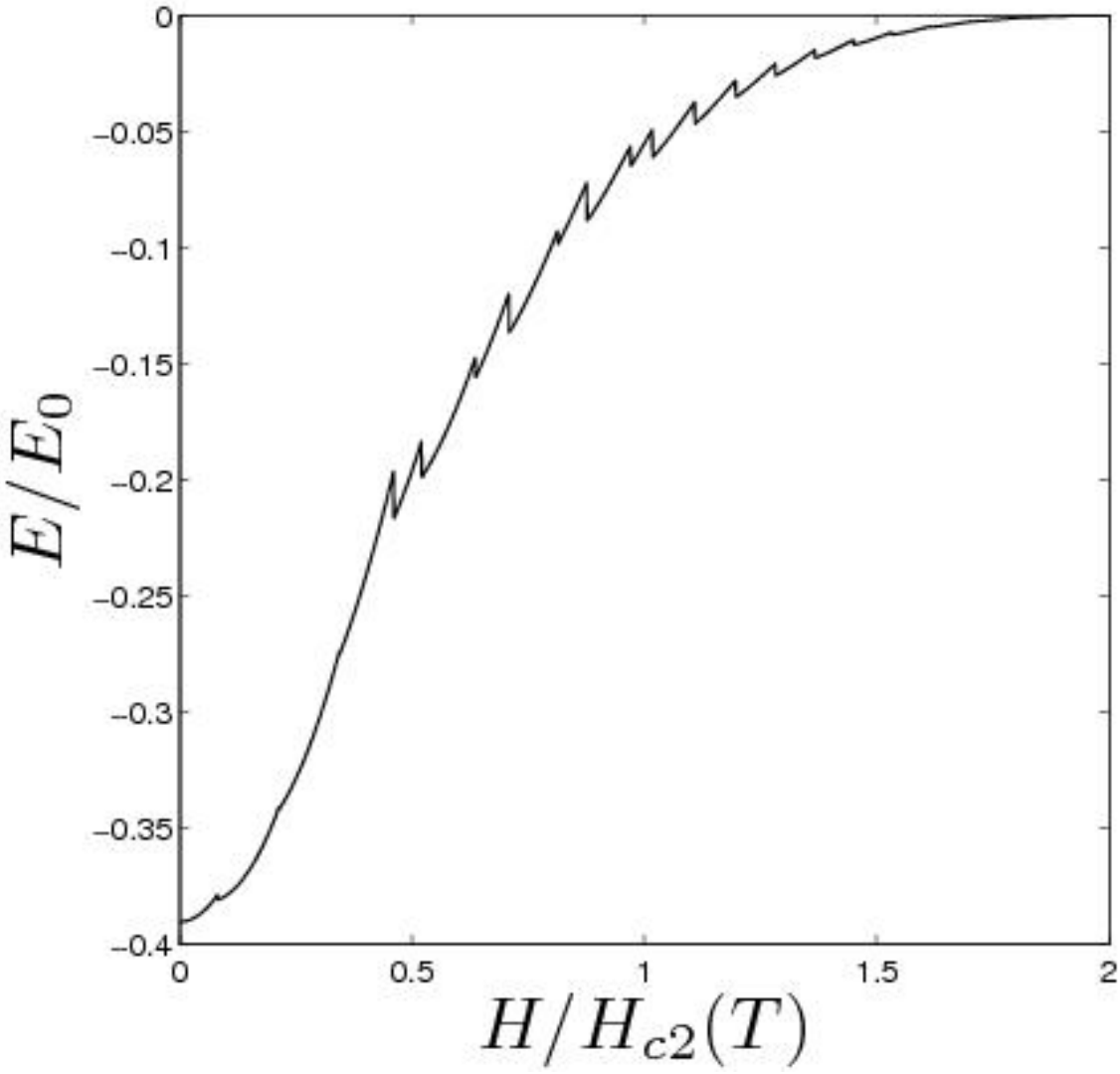


Figura 5.2: Energia versus campo aplicado.

5.3.2 Configurações da Rede de Vórtices

Comecemos pelas configurações no intervalo de campo aplicado $0 \leq H \leq 0.444 H_{c2}(0)$. Nesta faixa de campo, todos os vórtices penetrados alojam-se no defeito. Pela Figura 5.3, temos que, em (a), (b) e (c), a intensidade do parâmetro de ordem é dada pela variação das cores, de acordo com a paleta de cores ilustrada em (e) graduada de 0 a 1, e também temos, superpostas, as linhas de corrente, ilustradas com setas indicando seu sentido. Em (d) temos que as regiões em azul mais escuro a fase ϕ do parâmetro de ordem vale

$-\pi$, enquanto nas regiões em vermelho escuro vale π. Percorrendo a amostra no sentido anti-horário, a cada mudança de 2π na borda, temos a entrada de um vórtice. Assim, a Figura 5.3 ilustra que os vórtices penetram o sistema um a um, onde é apresentado o módulo do parâmetro de ordem para os estados de vorticidade $N = 1, 2, 3$ (painéis (a), (b) e (c)), enquanto a fase do parâmetro de ordem, analisada no painel (d), revela que temos dois vórtices no furo e um na fenda.

Vejamos agora o que ocorre imediatamente antes e depois da primeira nucleação de vórtice no campo aplicado $H = 0.081H_{c2}(0)$. Pela Figura 5.4(c), vemos que o módulo da densidade de corrente é bem alto na constrição e o campo local é relativamente baixo em seu interior (ver painel 5.4(a)). Logo após a penetração do vórtice, há uma diminuição da densidade de corrente na constrição, embora ainda permaneça alta, ao passo que ao redor na fenda e do furo, há um aumento significativo da densidade de corrente para blindar o vórtice que acabou de nuclear (ver painel 5.4(d)). Também podemos ver o aumento significativo de campo local na região defeituosa através dos painéis 5.4(a) e (b).

Para campos superiores a $H = 0.444H_{c2}(0)$ começamos a ter nucleação de vórtices ao redor do furo e da fenda conforme podemos ver na Figura 5.5. Eles se distribuem de maneira a seguir geometria do furo e da fenda. Note que quando $H = 2H_{c2}(0)$ o módulo do parâmetro de ordem ainda está bem preservado. Isto sugere que o campo crítico é superior a $2H_{c2}(0)$. Normalmente, para geometria como a em questão, este valor corresponde a $2H_{c2}(0)$. Assim, o furo e a fenda contribuem para aumentar os parâmetros críticos do supercondutor.

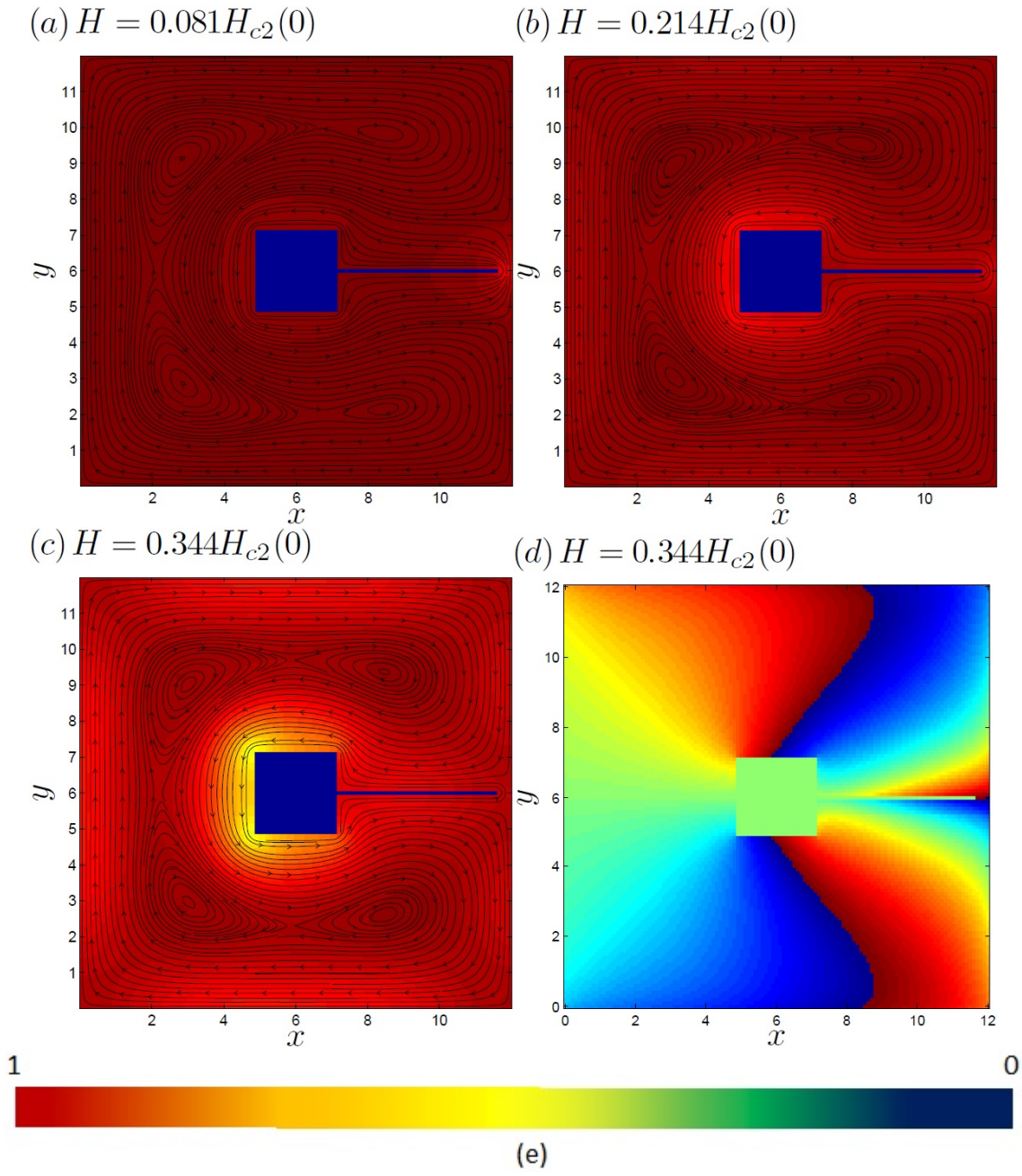


Figura 5.3: (a)-(c) Intensidade ψ do parâmetro de ordem; (d) Fase ϕ do parâmetro de ordem; (e) A paleta de cores ilustra a intensidade do parâmetro de ordem variando de 0 a 1.

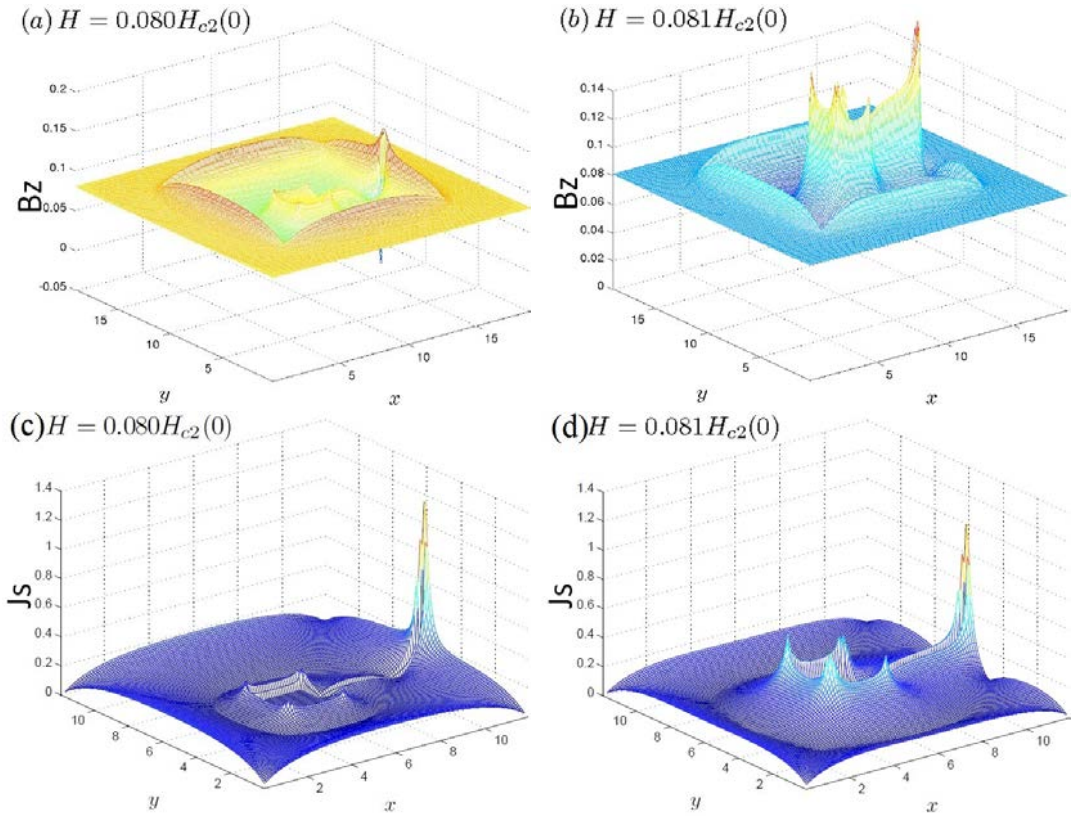


Figura 5.4: (a)-(b) Perfil do campo local para os campos aplicados indicados nos painéis; (c)-(d) Respectivas densidades de correntes.

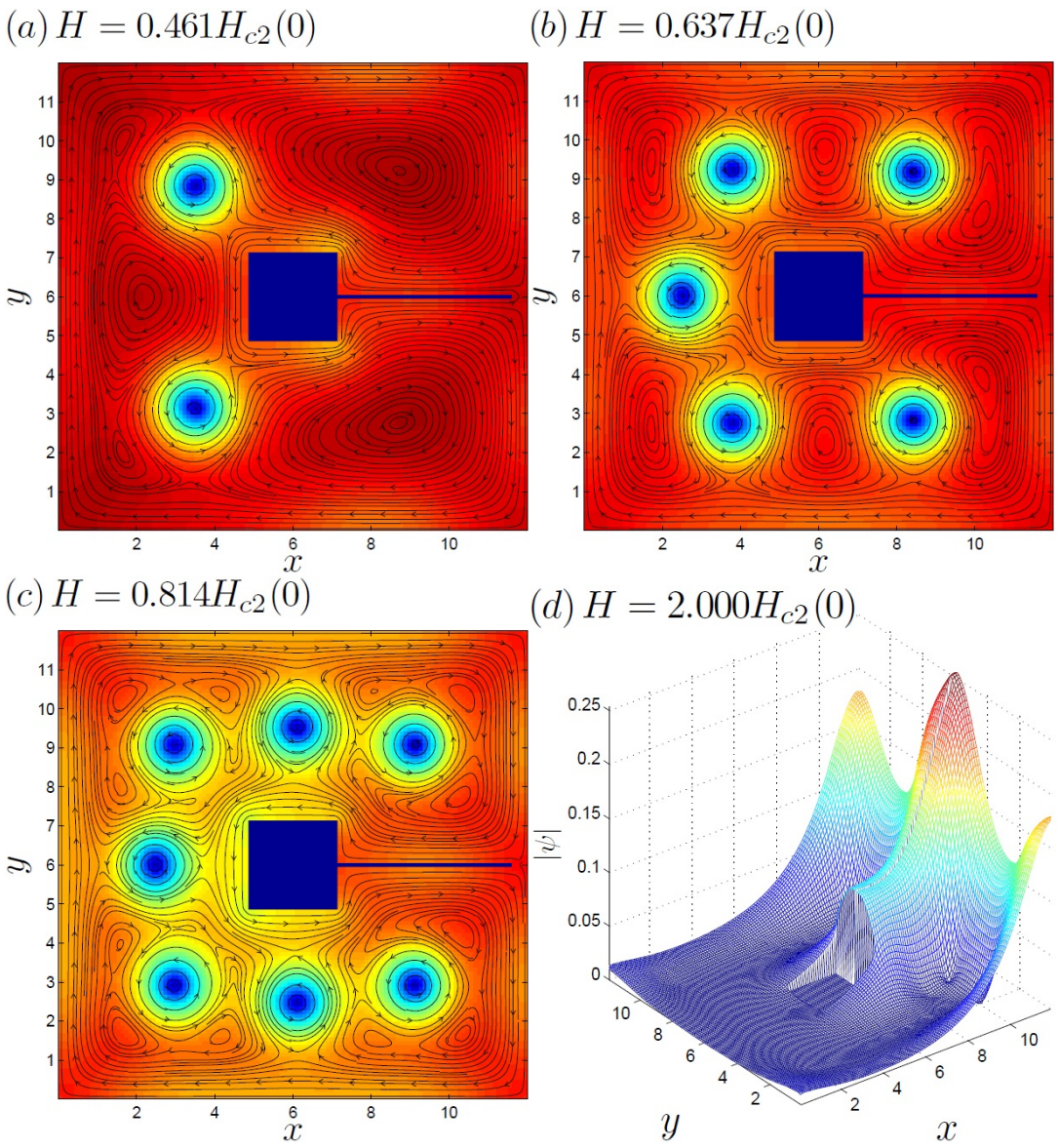


Figura 5.5: Intensidade do parâmetro de ordem para campos intermediários (painéis (a)-(c)) e para campo alto (painel (d)).

6 Conclusões

Acreditamos que a sequência descritiva das teorias e técnicas relacionadas neste trabalho contribuem para um entendimento organizado do fenômeno da supercondutividade. Os principais aspectos das teorias fenomenológicas de Ginzburg-Landau e de London, tais como a distinção entre supercondutores do tipo-I e tipo-II, os comprimentos fundamentais, a quantização do fluxo magnético, a interação vórtice-vórtice e a rede de vórtices são itens fundamentais de conhecimento para um bom entendimento do funcionamento desse tipo de material.

Com relação ao algoritmo que resolve as equações de Ginzburg-Landau numericamente, achamos interessante que tal abordagem não estacionasse apenas no entendimento dessa, mas tivesse continuidade com a implementação computacional utilizando recursos com vistas a melhorar a performance de obtenção dos dados, necessários para construção dos gráficos que determinam o comportamento simulado dos supercondutores.

Apresentamos os resultados para as propriedades magnéticas e estruturais do estado Meissner e misto para um supercondutor na forma de um SQUID com uma constrição. Mostramos que para certas geometrias específicas de supercondutor é possível termos a coexistência do estado Meissner com vórtices penetrados.

Por fim, algumas análises para trabalhos futuros podem ser consideradas, tais como a possibilidade de se analisar a configuração de vórtces na seção longitudinal da amostra,

o que poderia revelar questões de continuidade dos vórtices ao longo deste eixo. Também podemos considerar que, com relação à tecnologia CUDA, que encontra-se continuamente em evolução, é possível obter maiores ganhos em termos de desempenho no processamento da simulação, tanto por meio de atualização das versões de CUDA quanto por meio de implementação de novas técnicas que venham a ser elaboradas pela empresa NVIDIA. Outra possibilidade seria realizar toda a análise da supercondutividade desenvolvida neste trabalho partindo da utilização da teoria BCS.

7

Apêndices

A

Cálculo dos passos de tempo

A equação de Laplace é dada por:

$$\nabla^2 f = 0 \tag{A.1}$$

Na forma discreta, podemos escrever:

$$\frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0 \tag{A.2}$$

Isolando $f_{i,j}$ dos outros termos, obtemos:

$$f_{i,j} = \frac{\delta^2}{4}\left(\frac{f_{i+1,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2}\right) , \tag{A.3}$$

onde

$$\delta^2 = \frac{2}{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} \tag{A.4}$$

A equação (A.3) pode ser resolvida de forma auto-consistente atribuindo valores iniciais $f_{i,j}^{(n)}$ para $f_{i,j}$ e, então, determinamos $f_{i,j}^{(n+1)}$ e assim sucessivamente. Temos a sequência:

$$f_{i,j}^{(n+1)} = \frac{\delta^2}{4}\left(\frac{f_{i+1,j}^{(n)} + f_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1}^{(n)} + f_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2}\right) , \tag{A.5}$$

Este método é conhecido como método de Jacobi e é convergente.

Por outro lado, consideremos a equação de difusão de calor:

$$\eta \frac{\partial f}{\partial t} = \nabla^2 f \tag{A.6}$$

Na forma discreta podemos escrever:

$$f_{i,j}^{(n+1)} = f_{i,j}^{(n)} + \frac{\Delta t}{\eta \Delta x^2}\left(f_{i+1,j}^{(n)} - 2f_{i,j}^{(n)} + f_{i-1,j}^{(n)}\right) + \frac{\Delta t}{\eta \Delta y^2}\left(f_{i,j+1}^{(n)} - 2f_{i,j}^{(n)} + f_{i,j-1}^{(n)}\right) \ , \tag{A.7}$$

onde $f_{i,j}^{(n)} = f_{i,j}(t_n)$.

A equação (A.7) pode ser reescrita como:

$$f_{i,j}^{(n+1)} = \left[1 - \frac{2\Delta t}{\eta}\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)\right] f_{i,j}^{(n)} + \frac{\Delta t}{\eta}\left[\frac{f_{i+1,j}^{(n)} + f_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1}^{(n)} + f_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2}\right] \ , \tag{A.8}$$

As sequências (A.5) e (A.8) são idênticas se e somente se:

$$1 - \frac{2\Delta t}{\eta}\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right) = 0 \ , \tag{A.9}$$

de onde se obtém:

$$\Delta t = \frac{\eta \delta^2}{4} \tag{A.10}$$

B

Modelagem do Simulador

Um simulador é desenvolvido a partir de duas principais implementações: a modelagem do sistema de simulação e do sistema de entrada e saída de informações. Dependendo da complexidade do simulador, uma terceira implementação, a paralelização computacional deste, pode ser necessária. Em torno dessas implementações surgem as demais, que fornecerão suporte para que toda a execução ocorra de forma plena e satisfatória.

Fornecemos um auxílio à implementação do algoritmo de simulação em linguagem C/C++ por meio de acesso a um site contendo o código fonte. Assim, com a implementação do algoritmo e geração dos dados, temos a possibilidade de plotagem dos mesmos usando softwares como Matlab da Mathworks ou Mathematica da Wolfram Research. Dessa forma, os conceitos relacionados ao comportamento do material supercondutor podem ser testados e comparados aos resultados obtidos neste trabalho.

Assim, obedecendo a sequência de ações indicada pelo fluxograma da figura (4.2), os algoritmos que tornam possível a simulação de um material supercondutor, disponível no site https://sites.google.com/site/alsunesp/, podem ser testados e os dados gerados podem ser plotados para comparação com o presente trabalho.

Referências Bibliográficas

[1] The Open University. Superconductivity. 2014. Em `http://http://www.open.edu/openlearn/science-maths-technology/engineering-and-technology/engineering/superconductivity`. Acesso em: 07/2014.

[2] C. P. Poole Jr, Prozorov R., H. A. Farach, and R. J. Creswick. *Superconductivity*. Elsevier, 2014.

[3] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations*, volume 22 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, 1995.

[4] Heike Kamerling Onnes. *Communications from the Physical Laboratory at University of Leiden*, 122B,124C, 1911.

[5] W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfahigkeit. *Naturwinssenschaft*, 21:787, 1933.

[6] F. London and H. London. The electromagnetic equations of the superconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 149(866):71, 1935.

[7] Vitaly L. Ginzburg and L. Landau. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 20:1064, 1950.

[8] Alexei A. Abrikosov. Magnetic properties of superconductors of the second group. *Soviet Physics–Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 5:1174, 1957.

[9] L. P. Gorkov. Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau equations in the of superconductivity. *Soviet Physics JETP-USSR*, 9:1364, 1959.

[10] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5):1175, 1957.

[11] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, 104(4):1189, 1956.

[12] J. G. Bednorz and K. A. Muller. *Zeitschrift für Physik B*, 64:189, 1986.

[13] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu. Superconductivity at 93 k in a new mixed-phase y-ba-cu-o compound system at ambient pressure. *Physical Review Letters*, 58, 1987.

[14] B. D. Josephson. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, 1:251–254, 1962.

[15] J. B. Ketterson. and S. N. Song. *Superconductivity*. Cambridge, University Press, 1999.

[16] A. L. Fetter and P. C. Hohenberg. *Superconductivity*, volume 2. Marcel Dekker, 1969.

[17] M. Tinkhan. *Introduction to Superconductivity*. McGraw-Hill Book Co, second edition, 2004.

[18] Eugene Butkov. *Física Matemática*. Addison–Wesley, 1968.

[19] George Arfken. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 1970.

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

[21] G. C. Buscaglia, C. Bolech, and A. López. *Connectivity*, volume m62. Springer, 2000.

[22] D. O. Gunter, H. G. Kaper, and G. K. Leaf. Implicit integration of the time-dependent Ginzburg-Landau equations of superconductivity. *SIAM–Journal on Scientific Computing*, 23:1943, 2002.

[23] T. Winiecki and C. S. Adams. A fast semi-implicit finite-difference method for the TDGL equations. *Journal of Computational Physics*, 179:127, 2002.

[24] A. Schmid. A time dependent Ginzburg-Landau equation and its application to problem of resistivity in mixed state. *Physik der Kondensiterten Materie*, 5:302, 1966.

[25] J. Sanders and E. Kandrot. *CUDA by Example: an introduction to general-purpose GPU programming*. Addison–Wesley, 2010.

[26] F. Rogeri, R. Zadorosny, P. N. Lisboa-Filho, E. Sardella, and W. A. Ortiz. Magnetic field profile of a mesoscopic SQUID-shaped superconducting film. *Supercond. Sci. Technol.*, 26(7), 2013.