

Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xvii
Resumen	xix
Abstract	xxi
1. Introducción	1
1.1. Propiedades fenomenológicas y microscópicas del estado superconductor	1
1.2. Materia de vórtices en la fase mixta de superconductores	5
1.3. Familia de superconductores basados en Fe	8
1.4. Sistema superconductor FeSe	11
1.4.1. Estructura de bandas	14
1.4.2. Estado superconductor en FeSe	20
1.4.3. Materia de vórtices en FeSe	21
1.5. Objetivos y organización de esta tesis	23
2. Técnicas experimentales y de simulación	27
2.1. Microscopía túnel de barrido	27
2.1.1. Principio de funcionamiento	28
2.1.2. Modos de operación de un STM	31
2.1.3. Implementación en esta tesis	34
2.2. Espectroscopía de fotoelectrones excitados con rayos X	37
2.2.1. Principio de funcionamiento	37
2.2.2. Implementación en esta tesis	39
2.3. Técnicas de visualización de vórtices en materiales superconductores . .	40
2.3.1. Decoración magnética	43
2.4. Simulaciones de estados electrónicos locales utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT)	49

2.4.1. Método del <i>slab</i>	56
2.4.2. Implementación en este trabajo	57
3. Impacto de los defectos atómicos en los estados electrónicos de la familia de superconductores FeSe	61
3.1. Caracterización de los cristales	61
3.2. Estimación del nivel de dopaje en el volumen y la superficie de las muestras	63
3.3. Propiedades estructurales a escala atómica	65
3.4. Propiedades electrónicas a escala atómica	73
3.5. Propiedades electrónicas de los niveles internos	86
3.6. Conclusiones	100
4. Caracterización de los defectos atómicos mediante DFT en la familia de superconductores FeSe	103
4.1. Simulaciones de DFT en FeSe: trabajos previos y nuevas aproximaciones realizadas en esta tesis	103
4.2. Simulaciones de DFT para FeSe <i>bulk</i> sin defectos considerando interacciones de vdW y el orden sAFM	106
4.3. Simulaciones de DFT de la superficie de la familia de superconductores FeSe	113
4.3.1. <i>Slab</i> $3 \times 3 \times 1$ de FeSe sin defectos	114
4.3.2. Monocapa de FeSe con una vacancia de Fe (defecto tipo <i>dumbbell</i>)	121
4.3.3. Defectos estructurales que podrían dar lugar a una depresión de la altura aparente en las topografías STM en $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ y K_xFeSe	130
4.4. Conclusiones	141
5. Estructura de vórtices en la familia de superconductores FeSe	145
5.1. Experimentos de decoración en muestras de la familia FeSe	147
5.2. Propiedades estructurales de la materia de vórtices en cristales de FeSe sin maclas	150
5.3. Factor de estructura de la materia de vórtices en muestras de FeSe con desorden puntual	154
5.4. Hiperuniformidad en la materia de vórtices desordenada con fluctuaciones rómbicas de FeSe	158
5.5. Hiperuniformidad en la materia de vórtices desordenada en NbSe_2	165
5.6. Mecanismos que podrían inducir fluctuaciones rómbicas en la materia de vórtices de FeSe	172
5.7. Efecto magnetoelástico en las propiedades estructurales de la materia de vórtices de FeSe: simulaciones dinámicas de Langevin	176

5.8. Supresión de la hiperuniformidad en la materia de vórtices nucleada en muestras de $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ con maclas	187
5.9. Conclusiones	194
6. Distribución de fuerzas de interacción entre vórtices: influencia del desorden y el efecto magnetoelástico	197
6.1. Fuerzas de interacción entre vórtices en $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ con distintos tipos de desorden	198
6.2. Fuerzas de interacción en la materia de vórtices policristalina en NbSe_2	211
6.3. Fuerzas de interacción en la materia de vórtices con distorsiones rómbicas en FeSe	214
6.4. Conclusiones	220
7. Conclusiones	221
Bibliografía	225
Publicaciones asociadas	251
Agradecimientos	253