

# Correntes permanentes em anéis mesoscópicos

Frederico Carvalho Dias  
Doutor em Física pela Universidade de Lisboa,  
Professor da Universidade Lusófona de Humanidades  
e Tecnologias

## Resumo

Correntes permanentes em anéis mesoscópicos imersos num campo magnético constante foram pela primeira vez observadas experimentalmente em 1990, apresentando intensidades entre uma a duas ordens de grandeza superiores aos valores previstos teoricamente, uma discrepância que permanece por resolver. Neste trabalho apresenta-se um estudo em que se considera um modelo com uma impureza e interações repulsivas entre os eletrões do anel. Através da transformação de Jordan-Wigner obtém-se o hamiltoniano XXZ para cadeias de spin  $1/2$ , com um defeito de troca e condições de fronteira “torcidas”. Utilizando o algoritmo do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) estudamos os coeficientes de Fourier da corrente permanente e do respetivo peso de Drude em função da intensidade das interações e do tamanho do anel. Observamos que a amplitude da corrente permanente e o valor do peso de Drude são sempre diminuídos pelas interações.

## Abstract

Persistent currents in mesoscopic rings pierced by a constant magnetic flux have been measured for the first time in 1990, displaying intensities one to two orders of magnitude higher than theoretically predicted values, a puzzle that remains to be solved. In this work we study a model with an impurity and repulsive interactions. Under a Jordan-Wigner transformation the model is equivalent to the XXZ spin- $1/2$  Hamiltonian with an exchange defect and twisted boundary conditions. We use the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) algorithm to study the behavior of the Fourier coefficients of the persistent current and the respective Drude weight as a function of the interaction magnitude and ring size. We find that the interactions always suppress the current amplitude and the Drude weight.

## Introdução

À escala microscópica, das moléculas, átomos, núcleos e partículas elementares, os fenómenos que ocorrem na Natureza são extremamente bem descritos, e compreendidos, pelas leis da Mecânica Quântica e posteriores desenvolvimentos, como a Eletrodinâmica Quântica e a Cromodinâmica Quântica. O sucesso desta abordagem é tal que chega a existir a mirabolante concordância de dez algarismos significativos

entre as previsões teóricas e as medidas experimentais. As escalas espaciais,  $L$ , envolvidas são tipicamente inferiores ao angstrom. A este nível as grandezas físicas, como, por exemplo, o espectro de energia e o momento angular, apresentam um carácter discreto, estando, em geral, quantificadas, e as características corpusculares e ondulatórias constituem as duas faces de uma mesma moeda das propriedades da matéria e da radiação.

No extremo oposto, quando  $L \sim 1\text{mm}$ , ou seja, à escala macroscópica, o espectro de excitações eletrónicas torna-se contínuo, bem como a maioria das propriedades físicas, e quando a escala de energias correspondentes é pequena face à escala de energia térmica,  $\sim k_B T$ , o sistema comporta-se de forma clássica, ou seja, é bem descrito pelas Leis de Newton (ou, a grandes escalas, pela Teoria da Relatividade), pelas Equações de Maxwell e pela Termodinâmica.

Para um sistema de dimensão  $d$ , os efeitos gerados no seu interior são de ordem  $\sim L^d$ , enquanto que os efeitos de fronteira são de ordem  $\sim L^{d-1}$ , pelo que, num sistema macroscópico, os últimos são, em geral, desprezáveis, face aos primeiros, o que significa que as propriedades de um sistema macroscópico não costumam depender das condições de fronteira microscópicas. Um sistema macroscópico é constituído por um número de partículas, microscópicas, várias ordens de grandeza superior ao número de Avogadro.

Na região intermédia entre os limites microscópico e macroscópico, i.e., quando  $L \sim 1-100\text{nm}$ , os efeitos gerados no interior do sistema são da mesma ordem de grandeza que os efeitos de fronteira, o que define a escala mesoscópica. Dada a sua escala espacial, os sistemas mesoscópicos são assim constituídos por apenas algumas dezenas ou centenas de moléculas ou átomos. Nesta zona fronteira entre o regime quântico e o regime clássico, os sistemas possuem um misto de características de natureza microscópica e de natureza macroscópica, que geram propriedades físicas extremamente interessantes e comportamentos invulgares próprios destes sistemas. Em geral, nos sistemas mesoscópicos o espectro de excitações eletrónicas permanece discreto e o movimento dos eletrões apresenta coerência de fase, no sentido em que a fase da função de onda de um eletrão permanece constante enquanto for possível ao eletrão propagar-se através do sistema sem sofrer processos de dispersão inelástica.

Na última década tornou-se possível manipular e “construir” em laboratório sistemas mesoscópicos, que revelaram propriedades muito pouco usuais[1], com um grande potencial de aplicações tecnológicas, especialmente no campo da eletrónica. O estudo dos sistemas mesoscópicos tornou-se, assim, uma área de grande atividade e crescimento,

tanto no domínio teórico, como no domínio experimental e aplicado.

### Correntes Permanentes

Consideremos um anel, de perímetro  $L$ , imerso num campo magnético constante,  $\vec{B}$ , perpendicular ao plano que contém o anel, como representado na figura 1. O fluxo magnético que atravessa o anel é dado por

$$\Phi = \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \oint_c \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{L^2}{4\pi} B$$

em que  $c$  é a circunferência definida pelo anel, orientada no sentido definido por,  $\vec{B}$ ,  $S$  é qualquer superfície de fronteira  $c$ , e  $\vec{A}$  é o potencial vetor, i.e.,  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ , tendo-se, na *gauge* em que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ,  $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ . Note-se que em cada ponto do anel o potencial vetor tem a forma  $\vec{A} = A_\theta \vec{u}_\theta$ , em que  $\vec{A} = A_\theta \vec{u}_\theta$  é o versor tangente a  $c$  e  $A_\theta = BL/4\pi$ . Assim, tem-se

$$\Phi = A_\theta L \quad (1)$$

No caso de um anel macroscópico, nada de especial ocorrerá neste sistema, uma vez que, de acordo com a Lei de Faraday[2], uma corrente surgirá no anel apenas se existir uma variação temporal do fluxo magnético que o atravessa.

Mas para um anel quântico a situação é radicalmente diferente. Se existirem  $M$  eletrões no anel, e considerando, em primeira aproximação, que não existem interações entre os eletrões, as propriedades deste sistema são determinadas pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{j=1}^M \frac{1}{2m_e} \left( -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}_j} + e\vec{A}(\vec{r}_j) \right) \quad (2)$$

em que  $e$  é a carga elementar,  $m_e$  a massa do eletrão, e  $\vec{r}_j$  é o operador posição do eletrão  $j$  ( $j=1, \dots, M$ ). Re-escrevendo o hamiltoniano em coordenadas polares, e tendo em conta (1), temos

$$H = \sum_{j=1}^M \frac{1}{2m_e} \left( -i\hbar \frac{2\pi}{L} \frac{\partial}{\partial \theta_j} + \frac{e}{L} \Phi \right)^2$$

Como os eletrões não interagem, as funções próprias de cada eletrão,  $(\theta)$ , são os estados próprios do respetivo momento linear

$$\left( -i\hbar \frac{2\pi}{L} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{e}{L} \Phi \right) \psi(\theta) = p \psi(\theta) \quad (3)$$

obedecendo à condição de fronteira

$$\psi(\theta + 2\pi) = \psi(\theta) \quad (4)$$

A solução da equação (3) sujeita à condição (4) implica que os valores próprios do momento linear,  $p$ , estão quantificados, tendo-se

$$p_n(\phi) = \frac{\hbar}{L}(2\pi n + \phi) \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5)$$

em que

$$\phi = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (6)$$

sendo

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} \quad (7)$$

o quantum de fluxo. Notemos que em (5) basta considerar  $\phi$  num intervalo de comprimento  $2\pi$ , pois valores de  $\phi$  fora do intervalo correspondem apenas a reclassificar os estados considerados (ver figura 2), ou seja todas as propriedades físicas do sistema são periódicas no fluxo aplicado,  $\Phi$ , com período  $\Phi_0$  (os fluxos  $\Phi$  e  $\Phi + n\Phi_0$  equivalentes).

Como Büttiker, Imry e Landauer[3] salientaram, esta situação é análoga ao caso de um eletrão num cristal (uma volta no anel corresponde à translação por um vetor primitivo da rede de Bravais, unidimensional, do cristal), em que  $\phi/2\pi$  desempenha o papel de momento cristalino. Assim, o intervalo  $[-\pi, \pi]$  em define a primeira zona de Brillouin do anel.

Os valores próprios da energia de cada eletrão encontram-se representados na figura 3, sendo dados por

$$\varepsilon_n(\phi) = \frac{\hbar^2}{2m_e L^2} (2\pi n + \phi)^2$$

Note-se que o espectro é degenerado em  $\phi = 0$  e em  $\phi = \pm\pi$ , i.e., nos planos de Bragg do anel.

Se os eletrões no anel estiverem polarizados, i.e., se todos tiverem a mesma projeção de spin, o estado fundamental do hamiltoniano (2) é obtido preenchendo os estados de energia mais baixa:

$$E_o(\phi) = \begin{cases} \sum_{n=-(M-1)/2}^{(M-1)/2} \varepsilon_n(\phi) & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \sum_{n=-(M-2)/2}^{(M-2)/2} \varepsilon_n(\phi) + \varepsilon_{\mp M/2}(\phi) & \text{se } M \text{ par} \end{cases}$$

em que para par se toma o sinal  $-$  se  $\phi > 0$ , ou o sinal  $+$  se  $\phi < 0$ .

O eletrão que se encontra no estado transporta uma corrente elétrica

$$i_n = \frac{-e}{L} \frac{p_n}{m_e} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\phi)}{\partial \phi}$$

Como na presença de fluxo se tem  $p_{-n} \neq -p_n$ , o que resulta da quebra de simetria no tempo gerada pelo campo magnético, no estado fundamental vai existir uma corrente

$$I(\phi) = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial E_o(\phi)}{\partial \phi} \quad (8)$$

tendo-se

$$I(\phi) = \begin{cases} -\frac{e\hbar}{m_e L^2} M\phi & \text{se } M \text{ ímpar} \\ -\frac{e\hbar}{m_e L^2} M(\phi + \pi) & \text{se } M \text{ par} \end{cases} \quad (9)$$

Esta corrente elétrica é uma propriedade intrínseca do estado fundamental do anel, e designa-se por *Corrente Permanente*. No limite termodinâmico, ou seja, fazendo  $L \rightarrow \infty$  mantendo  $M/L$  constante, tem-se  $I(\phi) \rightarrow 0$ , i.e., a corrente permanente é um fenómeno mesoscópico, de natureza quântica, que desaparece à escala macroscópica, de acordo com as Equações de Maxwell.

Do ponto de vista clássico, um eletrão que se desloque no anel com velocidade  $v$  está sujeito a uma aceleração centrípeta  $2\pi v^2/L = evB/m_e$ , pelo que,  $v = 2\hbar\phi/(m_e L)$  e a corrente associada aos  $M$  eletrões circulando no anel vale,  $I = -Mev/L = -2e\hbar M\phi/(m_e L^2)$ , ou seja o dobro do valor obtido em (9). Esta discrepância deve-se a que, na verdade, no estado fundamental do anel os eletrões têm velocidades distintas, com média, no caso de  $M$  ímpar,  $\langle v \rangle = M^{-1} \sum_n p_n / m_e = v/2$ . Além disso, a análise clássica não prevê o efeito de paridade presente em (9).

De notar que as correntes permanentes em anéis mesoscópicos constituem um fenómeno distinto das correntes que circulam num supercondutor[4-6], as quais existem em sistemas macroscópicos e decorrem de correlações eletrónicas (em particular, o quantum de fluxo associado às correntes em supercondutores é  $\Phi_0 = \pi\hbar/e$ , metade do valor de (7), o que traduz a formação de pares de Cooper).

Introduzindo a velocidade de Fermi dos eletrões,  $v_F = \pi\hbar M/(m_e L)$ , tem-se que a corrente (9) apresenta uma forma em dente de serra com declive  $-ev_F/\pi L$  (figura 4), diminuindo a sua amplitude com  $1/L$ . A descontinuidade em  $I(\phi)$ , associada à simetria de translação, aparece em  $\phi = \pm\pi$  ou  $\phi = 0$ , para, respetivamente, um número ímpar ou par de eletrões.

A intensidade máxima da corrente (9) verifica

$$I_{\max} = -\frac{ev_F}{L}$$

O espaçamento entre os níveis eletrônicos próximos do nível de Fermi é precisamente da ordem de  $\hbar v_F / L$ , anulando-se no limite termodinâmico, em que o espectro se torna contínuo. Ou seja, a corrente permanente é uma manifestação da natureza discreta do espectro eletrônico, característica dos sistemas mesoscópicos.

A existência de impurezas no anel corresponde, no caso de um eletrão num cristal, a um potencial com o período da rede cristalina. Assim, se a desordem for fraca [7] o efeito das impurezas consiste apenas em alterar os níveis eletrônicos na vizinhança de  $\phi = 0$  e  $\phi = \pm\pi$  (figura 5), levantando a degenerescência do espectro e fazendo com que

$$\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \phi}(0) = \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \phi}(\pm\pi) = 0$$

Deste modo, a corrente permanente torna-se contínua em  $\phi = \pm\pi$  no caso de  $M$  ímpar (figura 6), ou em  $\phi = 0$  no caso de  $M$  par.

Na situação mais realista os eletrões também interagem entre si, pelo que no caso geral teremos

$$H = T(\phi) + \sum_{j=1}^M V(\theta_j) + \sum_{j>i=1}^M U(|\theta_j - \theta_i|) \quad (10)$$

em que

$$T(\phi) = \sum_{j=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_e L^2} \left( -i2\pi \frac{\partial}{\partial \theta_j} + \phi \right)^2$$

é o termo dos eletrões livres (2),  $V$  descreve as impurezas presentes no anel e  $U(|\theta_j - \theta_i|)$  é o termo de interação entre os eletrões  $i$  e  $j$ , tipicamente a repulsão de Coulomb.

A corrente permanente é dada por

$$I(\phi) = -\frac{e}{\hbar} \left\langle \frac{\partial T(\phi)}{\partial \phi} \right\rangle_o = -\frac{e}{\hbar} \left\langle \frac{\partial H}{\partial \phi} \right\rangle_o$$

em que  $\langle \dots \rangle_o$  representa a média no estado fundamental de (10). Pelo Teorema de Hellman-Feynman, obtemos

$$I(\phi) = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial E_o}{\partial \phi} \quad (11)$$

tal como encontrado no caso sem interações, (8).

Desenvolvendo  $E_o(\phi)$  em torno do seu mínimo,  $\phi_{\min} = 0$  ou  $\pi$ , respetivamente, quando o número de eletrões é ímpar ou par, temos

$$E(\phi) = E(\phi_{\min}) + \frac{1}{2L} D(\phi - \phi_{\min})^2 + \dots$$

em que

$$D = L \frac{\partial^2 E_o}{\partial \phi^2}(\phi_{\min}) \quad (12)$$

é o denominado *peso de Drude*.

Kohn propôs o peso de Drude como uma quantidade que permite distinguir entre um condutor e um isolante[8]. Tendo em conta a analogia entre  $\phi$  e o momento cristalino de uma partícula numa rede periódica, corresponde ao inverso da massa efetiva dos eletrões[9]. Assim, o sistema é condutor se no limite termodinâmico  $D > 0$ , e é isolante se  $D \rightarrow 0$ , ou seja, os eletrões adquirem uma massa efectiva infinita. Como seria de esperar, no caso dos eletrões livres (2), que consiste no modelo mais elementar de um anel metálico  $D > 0$ , no limite termodinâmico, sendo  $D = \hbar^2 M / m_e L$ .

O sistema (10) foi estudado para o caso com impurezas e sem interações [1,10,11], tendo-se  $IL \sim (l/L)ev_F$ , em que  $l$  é o livre percurso médio dos eletrões. O efeito da desordem forte ( $l \ll L$ ) consiste em reduzir a intensidade da corrente (a situação de desordem fraca corresponde a  $l \sim L$ ). O caso de interações de Coulomb entre os eletrões foi analisado perturbativamente (ou seja, para o caso  $|U| \ll 1$ ) [1,12,13], obtendo-se  $IL \sim U_{ef}(l/L)ev_F$ .

### Observação experimental em anéis mesoscópicos

Em 1936 Pauling[14] notou que uma corrente permanente gerada por um fluxo magnético constante poderia existir nas orbitais deslocalizadas dos anéis aromáticos de moléculas do tipo benzeno. No entanto, a extremamente elevada magnitude, de cerca de  $10^5$  Tesla, dos campos magnéticos necessários para detetar o fenómeno, devido ao ruído térmico presente, tornava, na prática, impossível medir este efeito.

Em 1983 Büttiker, Imry e Landauer[3] indicaram que as correntes permanentes deveriam ser observáveis em anéis, mesoscópicos, metálicos, como efetivamente se verificou quase uma década mais tarde, em 1990.

Experimentalmente as correntes permanentes em anéis mesoscópicos foram pela primeira vez medidas num conjunto de  $10^7$  anéis de cobre ( $l/L \sim 10^{-2}$ ) [15], seguidos de medições em anéis isolados de ouro ( $l/L \sim 10^{-2}$ ) [16] e em anéis semicondutores isolados ( $l/L \sim 1$ ) [17]. Com exceção do último caso, correspondente a uma situação de desordem fraca, em contraste com os dois primeiros que correspondem a desordem forte, os resultados experimentais apresentaram correntes com intensidades entre uma a duas ordens de grandeza superiores aos valores previstos pelos cálculos

teóricos, que consideram impurezas no anel e interações eletrônicas, tratadas perturbativamente. Assim, na presença de desordem forte, a análise teórica não consegue explicar os resultados experimentais no que diz respeito à intensidade das correntes permanentes.

Para tentar solucionar esta discrepância, e uma vez que na análise teórica apenas se consideraram interações de fraca intensidade, justificando o seu tratamento perturbativo, foi sugerido[18-20] que a interligação entre a desordem, associada às impurezas presentes no anel, e interações suficientemente fortes poderia explicar os elevados valores observados para as correntes, uma vez que as correlações geradas pelas interações poderiam contrabalançar o efeito supressor das impurezas. No entanto, a resolução do problema permanece, até à presente data, uma questão em aberto.

Por forma a conciliar a descrição teórica do fenómeno das correntes permanentes com a sua realização experimental, torna-se assim importante estudar o regime em que as interações não podem ser tratadas em teoria das perturbações. Não existindo ainda ferramentas analíticas para atingir este último objetivo, será necessário utilizar métodos computacionais para tentar compreender as propriedades destes sistemas.

### Modelo

Consideramos um sistema de eletrões com interações repulsivas, polarizados (i.e., todos com o mesmo spin), num anel unidimensional, com uma impureza, a representar a desordem, imerso num campo magnético constante.

Se dividirmos o anel em  $N$  células de comprimento  $a = L/N$ , associadas a cada sítio da cadeia de átomos que constitui o anel, em segunda quantificação[21,22] o hamiltoniano (10) toma a forma

$$H = - \sum_{j,r=1}^N t_{jr}(\phi) c_j^\dagger c_r + \sum_{j,r=1}^N V_{jr}(\phi) c_j^\dagger c_r + \frac{1}{2} \sum_{j,r,k,l=1}^N U_{jrkl} c_j^\dagger c_k^\dagger c_r c_l$$

em que  $c_j$  e  $c_j^\dagger$  são operadores fermiônicos sem spin (traduzindo o facto de considerarmos eletrões polarizados) que actuam na célula  $j$  do anel. No que se segue, serão consideradas unidades em que a constante da rede  $a$  e a razão  $e/\hbar$  tomam ambas o valor numérico um.

Considerando que a probabilidade de transferência apenas é relevante para transições entre posições consecutivas no anel tem-se

$$t_{jr} = t(e^{i\phi/N} \delta_{j+1,r} + e^{-i\phi/N} \delta_{j-1,r})$$

em que  $\phi$ , dado por (6), contem o fluxo magnético  $\Phi$  em unidades do quantum de fluxo  $\Phi_0$ .

Existindo uma única impureza localizada, ou defeito, no anel, o seu efeito[23,24] consiste em renormalizar o valor da amplitude de transição,  $t$ , por um factor  $\rho$ , pelo que

$$V_{jr}(\phi) = (1-\rho)t(e^{i\phi/N} \delta_{j,N} \delta_{r,1} + e^{-i\phi/N} \delta_{j,1} \delta_{r,N})$$

em que o caso sem defeito corresponde a  $\rho = 1$ . Por sua vez, a repulsão de Coulomb entre os eletrões é dominante entre primeiros vizinhos, pelo que realizamos a aproximação

$$U_{jrkl} = 2U \delta_{jl} \delta_{kr} \delta_{j+1,r}$$

com  $U > 0$ .

Obtemos então o hamiltoniano

$$H = -t \sum_{j=1}^N (e^{i\phi/N} c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + (1-\rho)t(e^{i\phi/N} c_N^\dagger c_1 + h.c.) + U \sum_{j=1}^N n_j n_{j+1} \quad (13)$$

em que  $n_j = c_j^\dagger c_j$ , e se verificam condições de fronteira periódicas  $c_{N+1} = c_1$ .

A transformação de *gauge*[25]  $c_j \rightarrow e^{-i\phi j/N} c_j$ , permite retirar o fluxo do hamiltoniano, exceto no termo da impureza, onde o fluxo fica preso, obtendo-se

$$H = -t \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + (1-\rho)t(e^{i\phi} c_N^\dagger c_1 + h.c.) + U \sum_{j=1}^N n_j n_{j+1}$$

mas em que agora se verifica a condição de fronteira torcida

$$c_{N+1} = e^{i\phi} c_1$$

que incorpora a fase  $\phi$ , sendo agora evidente que os estados próprios da energia são periódicos em  $\phi$ , com período  $2\pi$ , i.e., são periódicos no fluxo  $\Phi$  que atravessa o anel, com período  $\Phi_0$ .

A corrente permanente é o valor médio, calculado no estado fundamental, do operador de corrente

$$I_c(\phi) = it \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} - c_{j+1}^\dagger c_j) - i(1-\rho)t \frac{1}{N} (e^{i\phi} c_N^\dagger c_1 - e^{-i\phi} c_1^\dagger c_N)$$

Vamos estudar este sistema no regime de *half-filling*, ou seja, com eletrões.

Se, por outro lado, realizarmos uma transformação de Jordan-Wigner[22,26]

$$S_j^+ = \exp\left(i\pi \sum_{m=1}^{j-1} n_m\right) c_j^+$$

$$S_j^- = \exp\left(-i\pi \sum_{m=1}^{j-1} n_m\right) c_j^-$$

e definindo o operador

$$S_j^z = n_j - \frac{1}{2}$$

o qual toma valores próprios  $\pm 1/2$ , tem-se que  $S_j^+$ ,  $S_j^-$  e  $S_j^z$  são os operadores de spin  $1/2$  que atuam no sítio  $j$ . Fazendo  $J = 2t$  e  $\Delta = U$ , obtém-se o hamiltoniano da cadeia XXZ de spin  $1/2$  com um acoplamento de troca alterado,

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^N (S_j^+ S_{j+1}^- + h.c.) + (-)^{M+1} (1-\rho) \frac{J}{2} (e^{i\phi} S_N^+ S_1^- + h.c.)$$

$$+ \Delta \sum_{j=1}^N S_j^z S_{j+1}^z \quad (14)$$

com condições de fronteira torcidas na direção longitudinal do anel e periódicas na direção transversa:

$$S_{N+1}^+ = (-)^{M+1} e^{i\phi} S_1^+$$

$$S_{N+1}^z = S_1^z$$

Neste caso o regime de *half-filling* corresponde ao setor de projeção total de spin nula,  $S^z = \sum_{j=1}^N S_j^z = 0$ . No regime geral, de número de elétrons, surge no hamiltoniano (14) um termo adicional,  $-\Delta \sum_{j=1}^N S_j^z$ .

A corrente permanente corresponde ao valor médio, no estado fundamental, do operador de corrente de spin

$$I_c(\phi) = i \frac{J}{2N} \sum_{j=1}^N (S_j^+ S_{j+1}^- - S_{j+1}^+ S_j^-) - i (-)^{M+1} (1-\rho) \frac{J}{2N} (e^{i\phi} S_N^+ S_1^- - e^{-i\phi} S_1^+ S_N^-)$$

e o peso de Drude, é a rigidez da rede de spins.

Como vimos anteriormente, para férmions livres,  $U = 0$ , num anel sem defeito,  $\rho = 1$ , a corrente, dada por (9), é linear em  $\phi$  com declive  $-ev_F / \pi N$ , e o peso de Drude é finito e independente das dimensões do anel,  $D = ev_F / \pi$ .

Sem interações,  $U = 0$ , mas na presença de defeito,  $\rho \neq 1$ , este sistema foi resolvido, para suficientemente grande, por bosonização[23,24] e através da teoria de invariância conforme[26,27]. A componente dominante da corrente depende do tamanho do sistema também em  $N^{-1}$ , mas com

um peso de Drude reduzido face ao caso sem defeito. Tal como discutido, quando o defeito é fraco, ou seja, quando  $|\rho - 1| \ll 1$ , a corrente torna-se contínua em  $\phi = \pm\pi$ , para  $M$  ímpar, e em  $\phi = 0$ , para  $M$  par, mas este efeito ocorre, na verdade, para qualquer valor de  $\rho$ , como é habitual para um potencial periódico numa rede cristalina[7]. Verifica-se ainda[26,27] que para sistemas suficientemente grandes a corrente é invariante para a transformação  $\rho \rightarrow 1/\rho$ , i.e.,

$$I(\phi, 1/\rho) = I(\phi, \rho) \quad (N \gg 1) \quad (15)$$

Esta invariância pode compreender-se de forma intuitiva nos dois regimes extremos da intensidade do defeito, da seguinte forma. Quando um defeito,  $\rho$ , é fraco,  $|1 - \rho| \ll 1$  o seu efeito depende de  $|\Delta\rho|$ , com  $\Delta\rho = 1 - \rho$ . Para o defeito  $1/\rho$ , também, neste caso fraco, temos  $1 - 1/\rho \approx -\Delta\rho$ , pelo que sendo  $|1 - 1/\rho| \approx |1 - \rho|$ , o efeito sobre a corrente permanente, e sobre todas as outras propriedades do anel, é idêntico. Por outro lado, no caso de um defeito forte, a situação  $\rho \ll 1$  corresponde a ter uma cadeia (quase) aberta, em vez de um anel, o que é fisicamente equivalente à existência de uma barreira de potencial (quase) infinito, traduzida por  $\rho \gg 1$ .

No caso do anel sem defeito,  $\rho = 1$ , com interações,  $U > 0$ , o sistema é resolúvel através do *ansatz* de Bethe[28-34]. Como os termos de interação não quebram a invariância de translação, a degenerescência em  $\phi = 0, \pm\pi$  não é levantada[35], pelo que a corrente permanece descontínua para aqueles valores do fluxo. No regime de *half-filling*, aqui considerado, o sistema (13) apresenta uma transição de fase metal-isolante, no limite termodinâmico, para  $U/t = 2$  (ver figura 7). Quando  $U/t < 2$  os elétrons formam um Líquido de Luttinger (LL), enquanto que para  $U/t > 2$  se encontram num estado de *Charge Density Wave* (CDW).

Um Líquido de Luttinger[36] é caracterizado pela inexistência de uma superfície de Fermi, e por um decaimento das correlações em lei de potência, com um expoente não-universal dependente da interação. Os resultados obtidos por bosonização[37] para um Líquido de Luttinger homogêneo mostram que a intensidade da corrente diminui com  $N^{-1}$ , o que concorda com os resultados obtidos através do *ansatz* de Bethe[9], que apresentam um peso de Drude finito no limite termodinâmico, cujo valor diminui com o crescimento da interação  $U/t$ .

Num estado CDW[38] a densidade eletrônica apresenta uma modulação periódica, dando origem a um *gap* na energia[39], ao qual está associado um comprimento de localização,  $\xi$ . Na fase CDW a corrente comporta-se usualmente como  $I \sim N^{-1} \exp(-N/\xi)$ , e o peso de Drude como

$D \sim \exp(-N/\xi)$ , anulando-se para um sistema infinito, o que significa que o sistema é um isolante no limite termodinâmico.

Num sistema mesoscópico a separação entre comportamento condutor e isolante não é imediata, dado que o comprimento de localização pode ser da ordem ou significativamente maior que o tamanho do sistema. Assim, um peso de Drude finito e uma corrente podem ser observados na fase CDW de um sistema mesoscópico. Uma faceta típica dos sistemas mesoscópicos consiste precisamente em que apesar de um sistema ser isolante na escala macroscópica, ele pode conduzir corrente desde que as suas dimensões,  $N$ , não ultrapassem a ordem de grandeza do comprimento de localização. Torna-se então importante caracterizar a corrente permanente e o peso de Drude, tanto na fase LL como na fase CDW dos sistemas mesoscópicos.

Do ponto de vista do modelo XXZ (14), o estado LL corresponde ao modelo XY ( $\Delta/J < 1$ ), o estado CDW corresponde a um sistema de spins de Ising ( $\Delta/J > 1$ ), e o ponto de transição ( $\Delta/J = 1$ ) descreve um antiferromagnete anisotrópico de Heisenberg (figura 7).

Finalmente, para o caso em que tanto as interações entre os eletrões ( $U > 0$ ) como a impureza ( $\rho \neq 1$ ) estão presentes, não foram ainda desenvolvidas ferramentas analíticas que permitam resolver o problema de forma exata. A dificuldade prende-se essencialmente com o facto de que o termo de defeito no anel não permite a aplicação do *ansatz* de Bethe para determinar os estados próprios do hamiltoniano.

A aplicação da teoria do Grupo de Renormalização [40-42] a sistemas na fase de Líquido de Luttinger mostra que o seu comportamento é fortemente afetado pela presença de impurezas, o que é confirmado através de invariância conforme e de cálculos numéricos[43]. Em particular, utilizando bosonização[24] prevê-se, para o hamiltoniano (13), um comportamento da corrente na fase LL do tipo  $I \sim N^{-1-\alpha_B}$ , com  $\alpha_B > 0$ , o que significa que a presença simultânea das interações e do defeito, para além de reduzir a intensidade da corrente, leva a que o Líquido de Luttinger se torne um isolante no limite macroscópico. Os resultados analíticos obtidos por bosonização são, porém, apenas válidos no limite dos grandes sistemas. Impõe-se então investigar o comportamento da corrente em função do tamanho do sistema no regime de tamanhos intermédios dos anéis mesoscópicos.

Tem-se, portanto, que as ferramentas teóricas apenas permitem descrever de forma aproximada o comportamento do hamiltoniano (13), pelo que é importante obter resultados que permitam caracterizar corretamente o Líquido de Luttinger

e a fase CDW, e determinar se interações fortes podem contrabalançar o efeito da desordem, e assim explicar as elevadas intensidades das correntes medidas experimentalmente.

## Resultados

Para estudar de forma essencialmente exata o modelo (13), e analisar quais os efeitos produzidos pela presença de interações eletrónicas fortes e de uma impureza, torna-se necessária a utilização de ferramentas computacionais para calcular a dependência da energia do estado fundamental no fluxo magnético, e obter o respetivo valor da corrente (11) e do peso de Drude(12).

A aplicação de métodos de Monte Carlo a este problema não constitui a melhor opção, uma vez que estes algoritmos operam com o sistema a temperatura finita, tornando-se necessária a realização de extrapolações para  $T = 0$ , por forma a se determinar o estado fundamental.

Para um sistema quântico definido numa rede com  $N$  sítios o tamanho do espaço de Hilbert correspondente cresce como  $n^N$ , em que  $n$  é o número de estados por sítio, ou seja, de forma exponencial com  $N$ . Assim, do ponto de vista computacional, torna-se extremamente difícil calcular as propriedades de um sistema quântico à medida que  $N$  aumenta utilizando técnicas de diagonalização exata, como, por exemplo, o Algoritmo de Lanczos[44,45], uma vez que é necessária uma grande capacidade de memória disponível, para além do facto de que o cálculo se torna rapidamente demasiado pesado. Actualmente, usando diagonalização exacta para cadeias quânticas consegue-se calcular as propriedades do sistema, dependendo dos detalhes do hamiltoniano e do algoritmo utilizado, apenas até  $N \sim 30$ . Relativamente a correntes permanentes em anéis com interação e desordem foram considerados sistemas até  $N = 16$  [35,46].

De notar que devido ao fluxo,  $\phi$ , os campos presentes no hamiltoniano (13) são complexos, bem como as respetivas funções de onda, o que se traduz num aumento por um fator de quatro no esforço computacional e um fator de dois nas capacidades de memória necessários face ao caso mais habitual em que os campos e as funções de onda são reais.

Utilizou-se o Algoritmo do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) desenvolvido por White em 1992[47], por forma a contornar a limitação prática inerente ao Algoritmo de Lanczos, e aos outros métodos de diagonalização exata. O DMRG revelou-se uma ferramenta

computacional extremamente poderosa no estudo de sistemas quânticos[48-52]. Sendo um algoritmo variacional[53], e utilizando os estados próprios mais prováveis do sistema, os resultados obtidos são essencialmente exatos. Como o número de estados utilizado é extremamente pequeno quando comparado com as dimensões do espaço de Hilbert associado ao problema, o DMRG permite estudar com grande precisão sistemas suficientemente grandes para serem inacessíveis aos métodos de diagonalização exata, mas ainda suficientemente pequenos para que o limite termodinâmico tenha sido atingido.

Por outro lado, o DMRG é naturalmente aplicável a  $T = 0$ , o que constitui uma enorme vantagem face aos algoritmos de Monte Carlo, nos quais aquele regime tem que ser obtido por extrapolação. Ainda por comparação com os métodos de Monte Carlo, o DMRG não apresenta o conhecido *sign problem* que afeta aqueles algoritmos quando aplicados a problemas fermiônicos.

Assim, uma vez calculado, através do DMRG, o valor da energia do estado fundamental do hamiltoniano (13), procedeu-se à sua derivação em ordem ao fluxo magnético para se obter a corrente, pela relação (11), e o peso de Drude, por (12), tendo-se utilizado o método de derivação numérica que aplica o algoritmo de interpolação de Chebychev[54].

A corrente foi obtida, tanto na fase LL, como na fase CDW, para tamanhos do anel variando entre  $N = 10$  e  $N = 82$ , sendo necessário guardar até  $m = 300$  estados nas várias iterações do DMRG (com precisão na energia de uma parte em  $10^5$ ).

As figuras 8 e 9 mostram as correntes obtidas para  $U/t = 0.80$ , na fase LL, e  $U/t = 3.00$ , na fase CDW, respetivamente, para vários valores do defeito, ambas para anéis com  $N = 26$  sítios. Como se pode observar, na ausência de defeito,  $\rho = 1.00$ , as correntes são descontínuas em  $\phi = \pm\pi$ , tornando-se contínuas nestes valores do fluxo quando a impureza é introduzida. O defeito diminui a amplitude da corrente e, quanto mais forte é a impureza, maior é a respetiva redução da corrente. De notar ainda que a corrente assume um maior valor para  $U/t = 0.80$  (figura 8) do que para  $U/t = 3.00$  (figura 9), o que reflete o facto de no primeiro caso o sistema ser melhor condutor que no segundo.

Na figura 10 pode constatar-se que a corrente, tal como no caso sem interações (15), permanece invariante para a transformação  $\rho \rightarrow 1/\rho$  na intensidade do defeito, i.e., verifica, para anéis suficientemente grandes,

$$I(\phi, 1/\rho) = I(\phi, \rho)$$

tanto na fase LL, como na fase CDW, apesar de no último caso tal ocorrer a partir de valores de  $N$  superiores ao do primeiro

caso, o que traduz a forte influência das interações eletrónicas sobre o efeito do defeito na corrente permanente.

Nos resultados que a seguir se apresentam será sempre analisada a situação  $\rho = 0.50$ , correspondente ao regime intermédio entre uma impureza fraca,  $|1 - \rho| \ll 1$  e uma impureza forte,  $\rho \ll 1$ .

Nas figuras 11 e 12 apresenta-se o comportamento da corrente para valores crescentes do comprimento,  $N$ , do anel, respetivamente, para  $U/t = 0.80$ , na fase LL, e  $U/t = 3.00$ , na fase CDW, fixo  $\rho = 0.50$ . Contrariamente à situação em que não existem interações ou defeito, a amplitude da corrente diminui mais rapidamente que  $N$  com em ambas as fases, exibindo um comportamento distinto em cada fase. A corrente decresce mais fortemente com o aumento de  $N$  na fase CDW do que na fase LL, sendo, tal como nos casos anteriores, a amplitude da corrente superior na fase LL.

Como a corrente permanente é periódica no fluxo magnético aplicado, então admite uma expansão de Fourier em  $\phi$ . Uma vez que os casos considerados correspondem a um número ímpar  $M = N/2$  de eletrões no anel, tem-se  $I(\phi)$  que é uma função ímpar do fluxo magnético, pelo que a sua série de Fourier é dada por

$$I(\phi) = \sum_{k=1}^{+\infty} I_k \sin(k\phi)$$

em que os coeficientes de Fourier da corrente valem

$$I_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} I(\phi) \sin(k\phi) d\phi$$

e dependem dos valores de  $U/t$  e de  $\rho$ . Para analisar o comportamento da corrente em detalhe calculamos numericamente os coeficientes  $I_k$  da expansão de Fourier.

Como se pode constatar nas figuras 13 e 14, utilizando-se apenas as duas primeiras componentes de Fourier consegue-se reproduzir em boa aproximação o comportamento dominante das correntes, tanto quando o sistema se encontra na fase LL, como na fase CDW.

Assim, a informação principal sobre as correntes permanentes encontra-se nas suas duas primeiras componentes de Fourier. Os dois primeiros coeficientes de Fourier da corrente,  $I_k$ , com,  $k = 1, 2$  estão representados, em função de  $N$ , na figura 15. Como se pode ver, o segundo coeficiente,  $I_2$ , é menor e decresce rapidamente face ao comportamento do primeiro coeficiente,  $I_1$ , em especial na fase CDW. Deste modo, a corrente é essencialmente caracterizada pela sua primeira componente de Fourier. (O coeficiente  $I_1$  é negativo, pelo que é o seu valor absoluto que é representado na figura 15; o coeficiente  $I_2$  é sempre positivo).



A figura 16 apresenta o primeiro coeficiente de Fourier da corrente para diferentes valores da interação,  $U$ , fixo  $\rho = 0.50$ , do qual se extrai a dependência de  $I_1$  em  $N$ .

Para o sistema na fase LL, com  $U/t = 0.80$ , o primeiro coeficiente de Fourier varia com o tamanho do anel como

$$I_1 \sim N^{-1-\alpha_1}$$

com  $\alpha_1 \approx 0.06$ , na gama de valores de  $N$  considerados, como mostra a figura 16a.

Por sua vez, para o sistema na fase CDW, a dependência em  $N$  do primeiro coeficiente de Fourier pode ser observada na figura 16b, para dois valores distintos da interação,  $U/t = 2.50$  e  $U/t = 3.00$ , fixo  $\rho = 0.50$ . Verifica-se a relação

$$I_1 \sim N^{-1-\delta_1} \exp(-N/\xi_1)$$

com, respetivamente,  $\xi_1 \approx 259$ ,  $\delta_1 \approx 0.11$ , e  $\xi_1 \approx 68$ ,  $\delta_1 \approx 0.10$ . Assim, esta fase é caracterizada pela existência de um comprimento de localização,  $\xi_1$ , que no regime macroscópico torna o sistema num isolante. No caso  $U/t = 2.50$ , em que  $\xi_1 \approx 259$ , o tamanho dos anéis considerados,  $N \leq 82$ , é, ainda inferior ao valor do respetivo comprimento de localização, pelo que neste regime o sistema se comporta em termos efetivos como um condutor. Por outro lado, para  $U/t = 3.00$ , em que  $\xi_1 \approx 68$ , os efeitos da localização no sistema são já bastante mais acentuados, mesmo no regime de tamanhos intermédios considerados. Verifica-se que a magnitude da localização depende significativamente da intensidade da interação eletrónica, aumentando com esta.

Na figura 17 encontra-se representada a dependência em  $\rho$  do peso de Drude,  $D$ , correspondente às correntes permanentes das figuras 8 e 9. O peso de Drude diminui com o aumento de  $|1 - \rho|$ , refletindo a diminuição da amplitude da corrente à medida que a impureza se torna mais forte. Para cada valor de  $\rho$ , tem-se que  $D$  é superior na fase LL ( $U = 0.80$ ) face à fase CDW ( $U = 3.00$ ), traduzindo o facto de que aquela é melhor condutora do que esta última.

A figura 18 representa o peso de Drude em função do comprimento do anel,  $N$ , nas fases LL ( $U = 0.80$ ) e CDW ( $U = 2.50$  e  $U = 3.00$ ), verificando-se que  $D$  é superior no primeiro caso, e diminui com a intensidade da interação no segundo caso. Na fase CDW é claro que o peso de Drude tende para zero no limite termodinâmico quando  $U/t = 3.00$ , assinalando a natureza isolante do sistema naquele regime. Este comportamento já não é tão evidente quando  $U/t = 2.50$ , e no caso da fase LL,  $U/t = 0.80$ , torna-se extremamente difícil concluir sobre a natureza do sistema na escala macroscópica.

Uma análise detalhada da dependência de  $D$  no tamanho do anel é feita na figura 19. Observa-se então que os resultados

obtidos para o peso de Drude confirmam as características de condução apresentadas pelo primeiro coeficiente de Fourier das correntes na figura 16. Na figura 19a, pode ver-se que no estado LL a dependência do peso de Drude no comprimento do anel é da forma

$$D \sim N^{-\alpha}$$

com  $\alpha \approx 0.04$  expoente  $\alpha$  é dado pelo declive da reta na figura 19a. Esta análise implica que  $D$  se anula no limite termodinâmico, i.e., na presença da impureza o sistema torna-se isolante naquele limite.

Por sua vez, na figura 19b pode ver-se a dependência em  $N$  do peso de Drude na fase CDW, para  $U/t = 2.50$  e  $U/t = 3.00$ . Em ambos os casos, se verifica que

$$D \sim N^{-\delta} \exp(-N/\xi)$$

tendo-se  $\xi \approx 307$  e  $\delta \approx 0.08$  para  $U/t = 2.50$ , e  $\delta \approx 68$  e  $\delta \approx 0.06$  para  $U/t = 3.00$ .

Verifica-se que os expoentes e os comprimentos de localização que caracterizam o peso de Drude são um pouco diferentes dos que caracterizam o primeiro coeficiente de Fourier da corrente, como era de esperar, dado que o peso de Drude contém a contribuição das várias componentes de Fourier. O desvio observado na figura 19a dos valores do peso de Drude em relação à reta deve-se ao contributo das componentes de Fourier de ordem superior à primeira, que é não desprezável para os valores mais pequenos de  $N$ .

## Discussão

Estudamos as propriedades das correntes permanentes e do peso de Drude de um modelo de eletrões, polarizados, num anel mesoscópico imerso num fluxo magnético constante, na presença, simultânea, de interações e de uma impureza. Através da transformação de Jordan-Wigner, o modelo em estudo é equivalente a uma cadeia XXZ de spin com defeito num acoplamento de troca e sujeita a condições de fronteira “torcidas”. Deste modo, o modelo considerado é também útil para estudar as propriedades de cadeias de spin quânticas. O equivalente à corrente permanente no sistema magnético é a corrente de spin, e o peso de Drude corresponde à rigidez da rede de spins.

Em termos analíticos o modelo considerado apenas pode ser tratado de forma perturbativa, visto que a presença do termo que representa a impureza no hamiltoneano não permite utilizar o *ansatz* de Bethe para determinar os estados próprios do sistema. Contudo, uma das razões subjacentes ao estudo deste modelo consiste em analisar o papel das

interações e a sua interligação com a impureza, e, em particular, verificar se as fortes correlações geradas pelas interações eletrônicas poderão contrabalançar o efeito de diminuição da amplitude da corrente induzido pela impureza, e assim explicar, pelo menos de forma qualitativa, os elevados valores das correntes permanentes que são observados experimentalmente neste tipo de sistemas. A resposta obtida pela análise perturbativa do problema é negativa, mas os resultados são apenas válidos no limite das interações de baixa magnitude. Não existe, de facto, consenso sobre o papel das interações, havendo trabalhos que apontam num sentido e outros noutro [1,18-20]

O estudo numérico deste tipo de sistemas torna-se extremamente importante para compreender a física envolvida, especialmente para considerar o efeito das interações eletrônicas em qualquer regime de magnitude, e analisar a sua interligação com a impureza, em função da dimensão do sistema.

Com este objetivo em vista, desenvolvemos de raiz um programa, em FORTRAN90, que implementa o algoritmo do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade para sistemas com campos complexos e aplicamos ao problema em estudo. O DMRG, com pouco mais de uma década de existência, tornou-se desde a sua conceção por White em 1992 [47], no método numérico mais poderoso para o estudo de cadeias quânticas. A razão deste sucesso deve-se fundamentalmente a quatro características inerentes à estrutura do algoritmo. Em primeiro lugar, é um método variacional que seleciona os estados que, de facto, determinam as propriedades físicas do sistema, sendo essencialmente exato. Em segundo, permite tratar sistemas com dimensões, no mínimo, uma a duas ordens de grandeza superiores aos tamanhos máximos acessíveis pelos métodos de diagonalização exata, como, por exemplo, o Algoritmo de Lanczos. Em terceiro lugar, por oposição a outros métodos, não são realizadas aproximações ou hipóteses de partida (i.e., *ansätze*), quer sobre o hamiltoniano ou sobre a estrutura da função de onda. Finalmente, o algoritmo funciona naturalmente a  $T = 0$ , permitindo obter o estado fundamental do sistema, ou um determinado estado excitado, o que constitui uma enorme vantagem sobre os vários métodos de Monte Carlo, nos quais existe sempre uma sobreposição de estados, pelo facto de operarem a temperatura finita. Acresce que o DMRG é particularmente adequado para o cálculo do estado fundamental de sistemas com *hopping* e interações apenas entre primeiros vizinhos, como o caso do problema analisado neste trabalho.

Para o sistema em estudo, (13) ou (14), o problema é computacionalmente mais pesado e exige maior capacidade

de memória do que é habitual na maioria das situações porque, devido aos termos que contêm o fluxo magnético no hamiltoniano, os operadores e as funções de onda são complexos: a representação de um número complexo é dada por dois números reais, o que significa que uma matriz complexa ocupa o dobro do espaço de memória que uma matriz real; o produto de dois complexos envolve quatro produtos reais; deste modo, o produto de duas matrizes complexas envolve um número dezoito vezes maior de operações que o produto de duas matrizes reais com as mesmas dimensões. Foi devido a estas condicionantes que se optou por implementar o algoritmo em FORTRAN90, visto que este *standard* da linguagem Fortran, contém as seguintes capacidades (essenciais para a implementação de um algoritmo DMRG eficiente) [55]: a definição e utilização de *pointers*, que permitem gerir e utilizar a memória disponível de forma mais rápida e eficiente, associada à alocação dinâmica de memória, que permite, em particular, criar e redimensionar matrizes com as dimensões convenientes durante a execução do programa; multiplicação de matrizes em bloco, otimizada; álgebra de números complexos, incorporada e otimizada, especialmente o produto; biblioteca de funções matemáticas independente da máquina e da versão do compilador, totalmente testadas, como é apanágio de todos os *standards* de Fortran.

Utilizando-se o DMRG, calculou-se a energia do estado fundamental,  $E_0$  do modelo considerado para anéis com até  $N = 82$  sítios, para vários valores da interação,  $U/t$ , e da intensidade do defeito,  $\rho$ , varrendo-se o intervalo  $[-\pi, \pi]$ , de periodicidade no fluxo magnético,  $\phi$ . Para os anéis de maior dimensão foi necessário guardar até  $m = 300$  estados da matriz densidade, para convergência na energia de uma parte em  $10^5$ . De notar que, tendo em conta os fatores de escala introduzidos pelo fato de os campos serem complexos, este valor de corresponde à utilização de cerca de 5000 estados nos casos em que tanto o hamiltoniano como as funções de onda são reais. A partir dos valores de  $E_0(\phi)$  obtidos, determinou-se a corrente permanente,  $I(\phi)$ , e o peso de Drude,  $D$ , por derivação numérica, usando-se interpolação de Chebyshev.

Faz-se notar que o algoritmo do DMRG desenvolvido, ao tratar matrizes hamiltonianas complexas, permitiu calcular a forma detalhada da corrente permanente  $I$  em função do fluxo  $\phi$  e obter o peso de Drude. Em estudos anteriores o DMRG foi utilizado para calcular a denominada sensibilidade de fase  $\Delta E_0$ , que consiste na diferença entre a energia do estado fundamental para fluxos  $\phi = 0$  e  $\pi$ , a qual tem sido considerada como uma medida aproximada da corrente permanente [56-58]. Apesar do cálculo de  $\Delta E_0$  requerer um

esforço computacional consideravelmente mais pequeno do que o cálculo de, porque naquele caso a matriz hamiltoniana é real, a sensibilidade da fase não fornece informação sobre a forma da corrente e o valor do peso de Drude.

Na ausência de defeito,  $\rho = 1$ , o sistema estudado apresenta, no regime de *half-filling* aqui considerado, uma transição de fase entre um estado de Líquido de Luttinger, para  $U/t < 2$ , em que a corrente permanente se comporta como  $I \sim N^{-1}$  e o peso de Drude é independente de  $N$ , e um estado de *Charge Density Wave*, para  $U/t > 2$ , caracterizado por um comprimento de localização,  $\xi$ , em que a corrente se comporta como  $I \sim N^{-1} \exp(-N/\xi)$  e o peso de Drude como  $D \sim \exp(-N/\xi)$ .

Quando o hamiltoniano não tem interações,  $U = 0$ , mas contém uma impureza,  $\rho \neq 1$ , a corrente permanente é invariante para a transformação  $\rho \rightarrow 1/\rho$ , desde que  $N$  seja suficientemente grande. Os nossos resultados mostram claramente que esta invariância se mantém na situação em que coexistem o defeito e as interações eletrónicas, em ambas as fases, LL e CDW, apesar de o regime de suficientemente grande ser atingido na fase LL para menores dimensões do anel do que na fase CDW. Se bem que esta propriedade seja compreensível para os casos extremos de impurezas fortes ( $\rho \ll 1$  ou  $\rho \gg 1$ ), dada a equivalência física entre uma cadeia aberta e a existência de uma barreira, ou poço, de potencial infinito, que impedem a condução, e de impurezas fracas ( $|1 - \rho| \sim 1$ ) tendo em conta a alteração provocada pelo defeito no espetro de excitações elementares, permanece por explicar o facto de a invariância também se verificar no regime, aqui observado, de uma impureza de intensidade intermédia.

Na presença simultânea de interações e defeito, as técnicas de bosonização aplicadas ao sistema na fase LL preveem[24,59] que no limite em que  $N \gg 1$ , a corrente permanente deverá comportar-se como  $I \sim N^{-1-\alpha_B} \sin\phi$ , e, consequentemente, o peso de Drude como  $D \sim N^{-\alpha_B}$ , em que o expoente  $\alpha_B$  é positivo. Meden e Schollwöck[60] estudaram numericamente o sistema com interações na fase LL, através de DMRG e de Grupo de Renormalização Funcional, numa gama de valores de  $N$  em que a corrente ainda não é sinusoidal, tendo observado que o primeiro coeficiente de Fourier da corrente verifica  $I \sim N^{-1-\alpha}$ , com  $\alpha$  próximo e a convergir para  $\alpha_B$  no regime de impurezas fortes. No caso  $U/t = 0.80$  aqui considerado observamos para o primeiro coeficiente de Fourier da corrente a dependência  $I_1 \sim N^{-1-\alpha_1}$ , com  $\alpha_1 \approx 0.06$ , e a dependência do peso de Drude  $D \sim N^{-\alpha}$ , com  $\alpha \approx 0.04$ . Os resultados de bosoniza-

ção anteriormente referidos, com  $\alpha_B$  calculado pelo *ansatz* de Bethe[59], preveem que para  $U/t = 0.80$  se deve ter  $\alpha_B = 0.27$ , cerca de uma ordem de grandeza superior aos valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha$  de obtidos. Esta aparente discrepância deve-se ao facto de que na gama de valores de  $N$  considerado, de dimensões intermédias dos anéis, ainda não foi atingido o regime assintótico no qual se aplicam os resultados da bosonização. Com efeito, a segunda componente de Fourier da corrente ainda não é desprezável face à primeira, o que explica a pequena diferença que obtivemos entre os valores de  $\alpha$  e de  $\alpha_1$ , uma vez que as componentes de Fourier de ordem superior também contribuem para  $D$ . Deve notar-se que os valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha$  encontrados caracterizam o comportamento de sistemas num regime de tamanhos intermédios. Se se considerassem sistemas maiores muito provavelmente ver-se-ia  $\alpha_1$  e  $\alpha$  a dependerem de  $N$ , sendo de esperar que ambos convirjam para o valor de  $\alpha_B$  no limite de  $N$  grande. Por último, dada a variação observada do peso de Drude com o valor,  $\rho$ , do defeito, os resultados obtidos neste trabalho implicam que  $\alpha_1$  e  $\alpha$  devem crescer à medida que a impureza se torna mais forte.

Assim, para a fase LL na presença de uma impureza o peso de Drude anula-se e a corrente permanente é suprimida no limite em que  $N \rightarrow \infty$ . Este comportamento está de acordo com os resultados obtidos para uma rede de spins[57], e com argumentos obtidos através da teoria do Grupo de Renormalização[42,43], que indicam que a presença de uma impureza fraca ( $|1 - \rho| \sim 1$ ) no caso de interações repulsivas leva o sistema para um estado isolante na escala macroscópica (enquanto que no caso sem interações aquela constitui uma perturbação marginal).

Na fase CDW não existem resultados analíticos, mesmo aproximados, que caracterizem este estado na presença da impureza. Os resultados obtidos mostram que a primeira componente de Fourier da corrente permanente se comporta como  $I_1 \sim N^{-1-\delta_1} \exp(-N/\xi)$  e o peso de Drude como  $D \sim N^{-\delta_1} \exp(-N/\xi)$ , em que os comprimentos de localização,  $\xi_1$  e  $\xi$ , não são exatamente iguais na gama de valores de  $N$  considerados, devido à influência no valor de  $D$  das componentes de Fourier de ordem superior da corrente. Observa-se que  $\xi_1$  e  $\xi$  diminuem tanto com a magnitude das interações eletrónicas,  $U/t$ , como com a intensidade do defeito,  $\rho$ . Refira-se que o cálculo de correções de tamanho finito da rigidez de uma cadeia de spins pura apresenta uma forma similar à do peso de Drude determinada neste trabalho[61-63].

## Conclusões e Perspetivas

Em resumo, podemos concluir, através dos resultados obtidos neste trabalho, que no sistema interativo a impureza condiciona fortemente as propriedades do sistema, levando a que este se torne sempre um isolante no limite macroscópico. Por outro lado, observamos que a amplitude da corrente permanente é sempre diminuída pelas interações, sendo este efeito tanto mais forte quanto maior a magnitude das interações eletrônicas. Assim, neste modelo, as correlações introduzidas pelas interações não são suficientes para contrabalançar o efeito supressor da corrente gerado pela impureza, não sendo assim possível explicar os elevados valores da amplitude observados experimentalmente.

Estes resultados estão de acordo com a análise do sistema efetuada por Eggert e Affleck[43] através das técnicas do grupo de renormalização, que indica que para interações repulsivas e vários tipos de impurezas, à exceção do caso em que existem exatamente duas impurezas, o ponto fixo estável do sistema corresponde sempre à cadeia aberta, ou seja à situação em que o anel não conduz. Por outro lado, o mesmo estudo mostra que no caso de interações atrativas o ponto fixo do sistema se traduz numa situação em que a corrente permanente não é suprimida.

É assim extremamente importante estudar o sistema com interações atrativas no regime de tamanhos do anel correspondente à escala mesoscópica, por forma a determinar se a intensidade da corrente permanente aumenta face à situação não-interativa. Sendo esse o caso, será então fundamental perceber qual o mecanismo que poderá ser responsável pela criação de uma interação efetiva atrativa entre os eletrões.

Permanece ainda por compreender qual a razão pela qual a corrente permanente é invariante, na presença de interações, para a transformação na intensidade do defeito, sendo também necessário verificar se esta invariância se mantém válida para o caso das interações atrativas.

## Agradecimentos

Este artigo constitui uma adaptação de uma parte da Tese de Doutoramento do autor, apresentada à Universidade de Lisboa. O trabalho apresentado foi realizado em colaboração com a Orientadora de Doutoramento do autor, Professora Doutora Iveta R. Pimentel, da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, também com o Professor Doutor Malte Henkel, da Université Henri Poincaré, em Nancy, França.

## Referências

- [1] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press (1997)
- [2] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics – Third Edition*, John Wiley & Sons (1999)
- [3] M. Büttiker, Y. Imry, and R. Landauer, *Phys. Lett.* **96A**, 365 (1983)
- [4] F. Carvalho Dias, *Supercondutividade – Um Tema em Aberto*, Revista de Humanidades e Tecnologias **3**, 13 (2000)
- [5] V. L. Ginzburg & E. A. Andryushin, *Superconductivity – Revised Edition*, World Scientific (2004)
- [6] J. B. Ketterson & S. N. Song, *Superconductivity*, Cambridge University Press (1999),
- [7] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics – International Edition*, W. B. Saunders Company (1976)
- [8] W. Kohn, *Phys. Rev.* **133**, A171 (1964)
- [9] B. S. Shastry and B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 243 (1990)
- [10] H. F. Cheung, Y. Gefen, E. K. Riedel, and W. H. Shih, *Phys. Rev. B* **37**, 6050 (1988)
- [11] H. F. Cheung, E. K. Riedel, and Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 587 (1989)
- [12] U. Eckern and P. Schwab, *Adv. Phys.* **44**, 387 (1985)
- [13] U. Eckern and P. Schwab, *J. of Low Temp. Physics* **126**, 1291 (2002)
- [14] L. Pauling, *J. Chem. Phys.* **4**, 673 (1936)
- [15] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, and H. Bouchiat, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2074 (1990)
- [16] V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Gallagher, and A. Kleinsasser, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3578 (1991)
- [17] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2020 (1993)
- [18] A. Altland, S. Iida, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller, *Ann. Phys.* **219**, 148 (1992)
- [19] A. Müller-Groeling, H. A. Weidenmüller, and C. H. Lewenkopf, *Europhys. Lett.* **22**, 193 (1993)
- [20] A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller, *Phys. Rev. B* **49**, 4752 (1994)
- [21] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York (1971)
- [22] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics – 2<sup>nd</sup> edition*, Plenum Press, New York (1990)
- [23] A. O. Gogolin, *Phys. Rev. Lett* **71**, 2995 (1993)
- [24] A. O. Gogolin, and N. V. Prokofev, *Phys. Rev. B* **50**, 4921 (1994)
- [25] N. Byers and C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 46 (1961)
- [26] M. Henkel, *Conformal Invariance and Critical Phenomena*, Springer (1999)
- [27] M. Henkel and D. Karevski, *Eur. Phys. J. B* **5**, 787 (1998)
- [28] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961)
- [29] C. N. Yang and C. P. Yang, *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966)
- [30] J. des Cloiszeaux and M. Gaudin, *J. Math. Phys.* **7**, 1384 (1966)
- [31] C. J. Hamer, G. R. W. Quispel, and M. T. Batchelor, *J. Phys. A* **20**, 5677 (1987)
- [32] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 771 (1987)
- [33] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, and M. T. Batchelor, *Ann. Phys.* **182**, 280 (1988)

[34] B. Sutherland and B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **65**, 1833 (1990)  
 [35] G. Bouzerar, D. Poiblan, and G. Montambaux, Phys. Rev. B **49**, 8258 (1994)  
 [36] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995)  
 [37] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981)  
 [38] G. Grüner, *Density Waves in Solids*, Addison-Wesley Publishing Company (1994)  
 [39] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982)  
 [40] W. Apel and T. M. Rice, Phys. Rev. B **26**, R7063 (1982)  
 [41] T. Giamarchi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988)  
 [42] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **46**, 15233 (1992)  
 [43] S. Eggert and I. Affleck, Phys. Rev. B **46**, 10866 (1992)  
 [44] D. S. Watkins, *Fundamentals of Matrix Computations*, John Wiley and Sons (1991)  
 [45] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press (1987)  
 [46] M. Abraham and R. Berkovits, Rev. Lett. **70**, 1509 (1993)  
 [47] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992)  
 [48] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993)  
 [49] K. A. Hallberg, Phys. Rev. B **52**, R9827 (1995)  
 [50] S. Nishimoto, E. Jeckelmann, F. Gebhard, and R. Noack, Phys. Rev. B **65**, 165114 (2002)  
 [51] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg (Eds.), *Density-Matrix Renormalization – A New Numerical Method in Physics*, Springer (1999)  
 [52] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005)  
 [53] S. Östlund and S. Rommer, Phys. Rev. Lett. **75**, 3537 (1995)  
 [54] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77 – The Art of Scientific Computing (Second Edition)*, Cambridge University Press (2001)  
 [55] M. Metcalf and J. Reid, *FORTAN 90/95 Explained (Second Edition)*, Oxford University Press (2002)  
 [56] P. Schmitteckert, T. Schulze, C. Schuster, P. Schwab, and U. Eckern, Phys. Rev. Lett. **80**, 560 (1998)  
 [57] D. Weinmann, P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, and J. L. Pichard, Eur. Phys. J. B **19**, 139 (2001)  
 [58] T. M. R. Byrnes, R. J. Bursil, H. P. Eckerle, C. J. Hamer, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **66**, 195313 (2002)  
 [59] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **45**, 1358 (1980)  
 [60] V. Meden and U. Schollwöck, Phys. Rev. B **67**, 035106 (2003)  
 [61] S.-J. Gu, V. M. Pereira, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **66**, 235108 (2002)  
 [62] N. Laflorencie, S. Caponni, and E. S. Sørensen, Eur. Phys. J. B **24**, 77 (2001)  
 [63] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, D. C. Cabra, and W. Brenig, Phys. Rev. B **68**, 134436 (2003)

Figura 1  
 Anel de perímetro  $L$  imerso num campo magnético constante, através do qual passa o fluxo  $F$

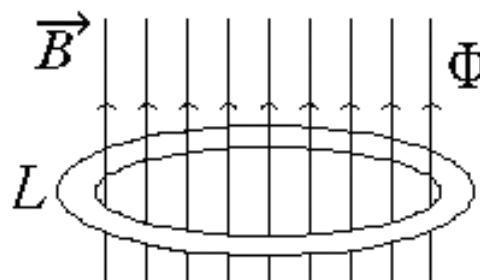


Figura 2  
 Valores próprios do momento linear para diferentes fluxos magnéticos aplicados. As retas a cheio diferem em  $2p$  no respetivo valor de fluxo  $f$ , definindo os mesmos estados de  $p$

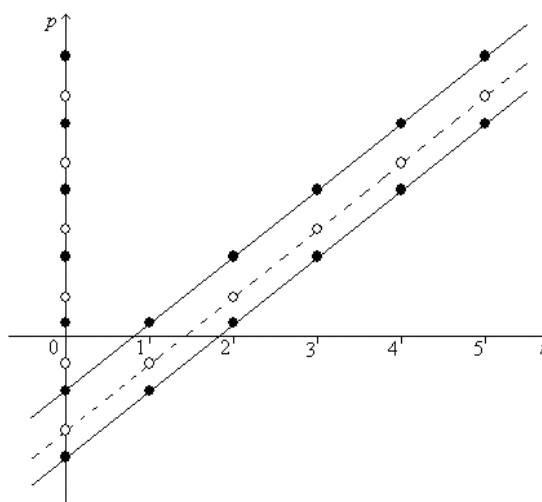
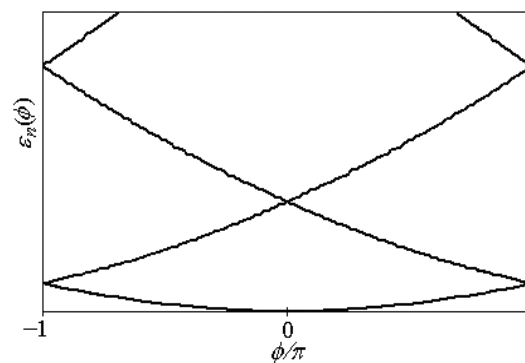
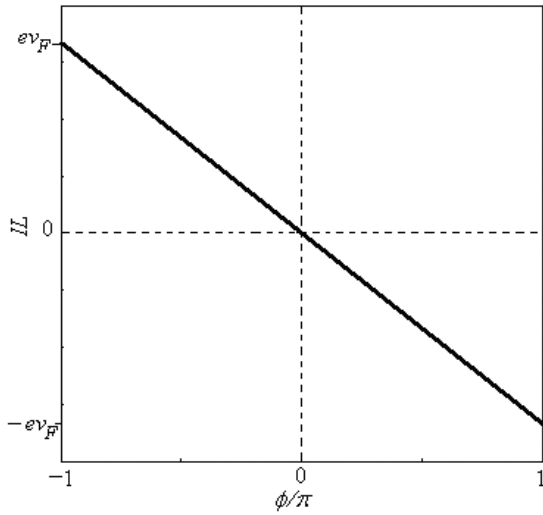


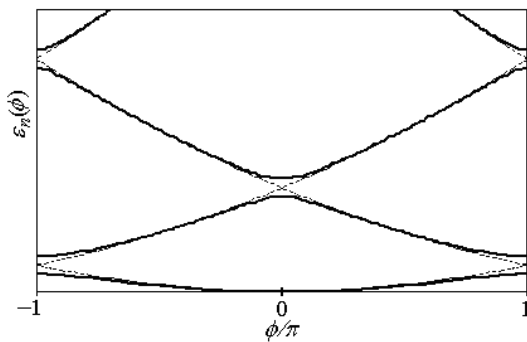
Figura 3  
 Espectro de um eletrão livre num anel sem impurezas e interações



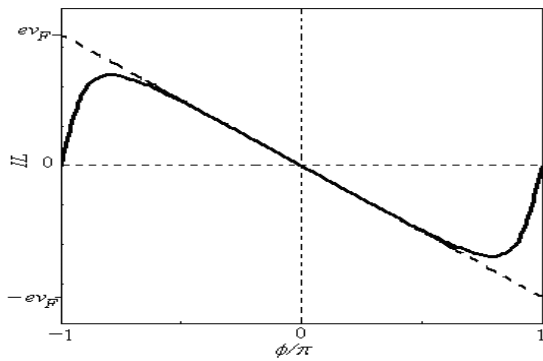
**Figura 4**  
Corrente permanente num anel sem impurezas e interações ( $M$  ímpar)



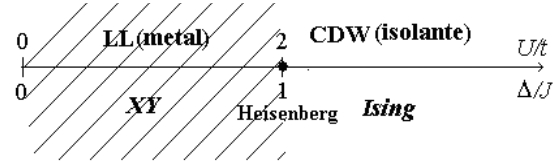
**Figura 5**  
Espectro de um elétron num anel com desordem fraca (curva a cheio). O tracejado corresponde a um elétron livre



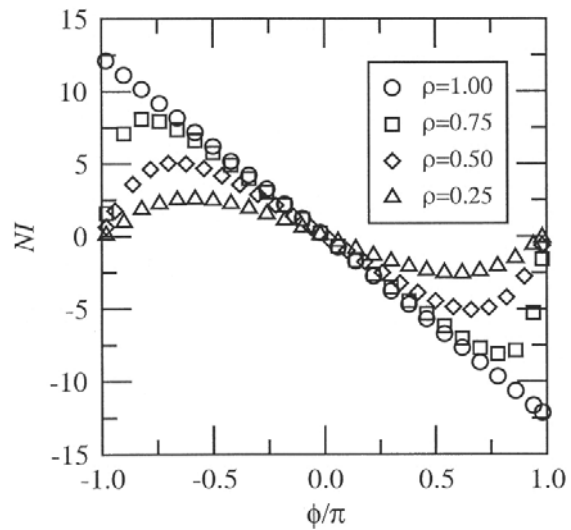
**Figura 6**  
Corrente permanente com desordem fraca. (O tracejado corresponde ao anel puro)



**Figura 7**  
Diagrama de fases para o sistema de elétrons e o sistema de spins, sem defeito ( $r = 1$ )



**Figura 8**  
Corrente permanente  $I(f)$  vs  $f$  para  $U/t=0.80$  e vários valores de  $r$ , com  $N=26$



**Figura 9**  
Corrente permanente  $I(f)$  vs  $f$  para  $U/t=3.00$  e vários valores de  $r$ , com  $N=26$

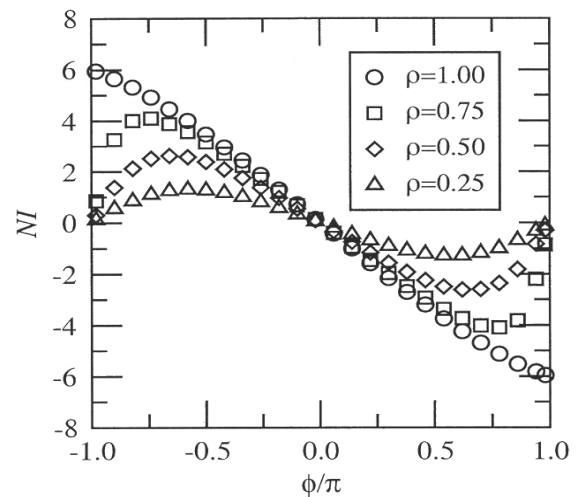


Figura 10

Invariância  $r @ 1/r$  da corrente permanente, para  $U/t=0.80$  (círculos) com  $N=18$ , e para  $U/t=3.00$  (losangos) com  $N=58$

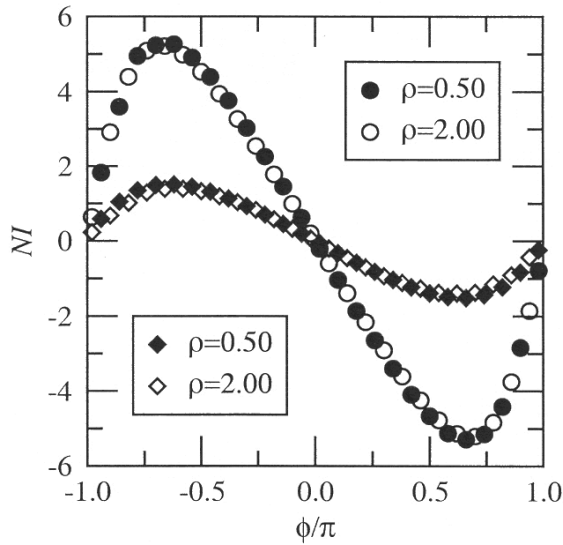


Figura 12

Corrente permanente  $I(f)$  vs  $f$  para vários valores de  $N$ , com  $U/t=3.00$  e  $r=0.50$

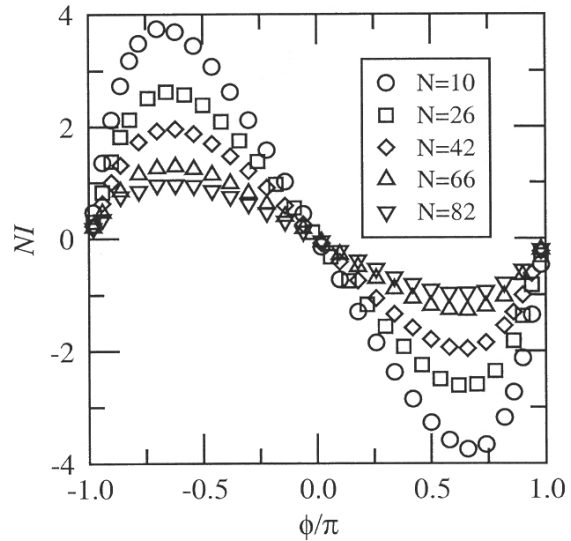


Figura 11

Corrente permanente  $I(f)$  vs  $f$  para vários valores de  $N$ , com  $U/t=0.80$  e  $r=0.50$

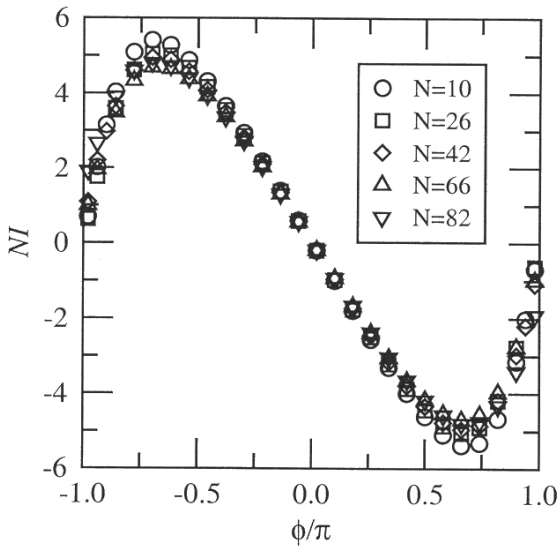


Figura 13

Reconstituição da corrente permanente usando as duas primeiras componentes de Fourier (curvas a cheio), para  $U/t=0.80$  e  $r=0.50$

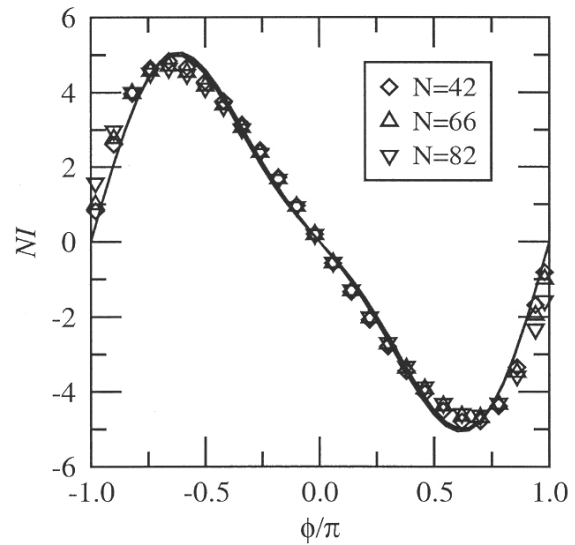


Figura 14

Reconstituição da corrente permanente usando as duas primeiras componentes de Fourier (curvas a cheio), para  $U/t=3.00$  e  $r=0.50$

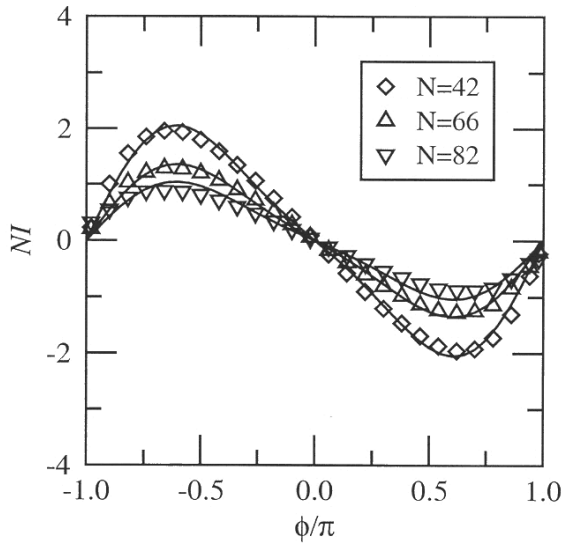


Figura 15

Coefficientes de Fourier  $I_k$  ( $k=1,2$ ) da corrente permanente, para  $U/t=0.80$  (círculos) e  $U/t=3.00$  (losangos), com  $r=0.50$

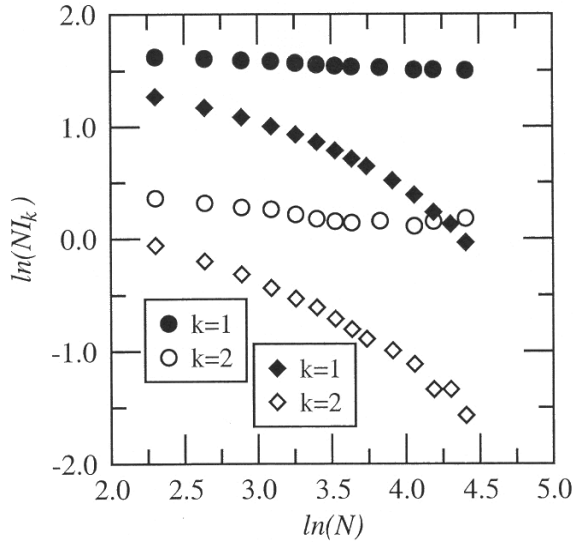


Figura 16

Dependência do primeiro coeficiente de Fourier,  $I_1$ , em  $N$ , para diferentes valores de  $U$  (em unidades de  $t$ ) e  $r=0.50$ . a. Na fase LL; b. Na fase CDW

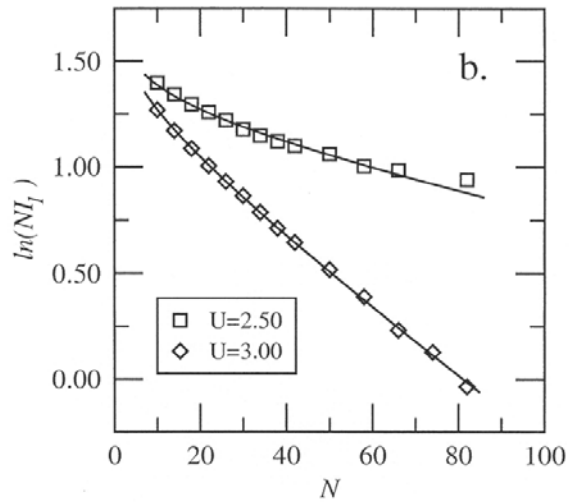
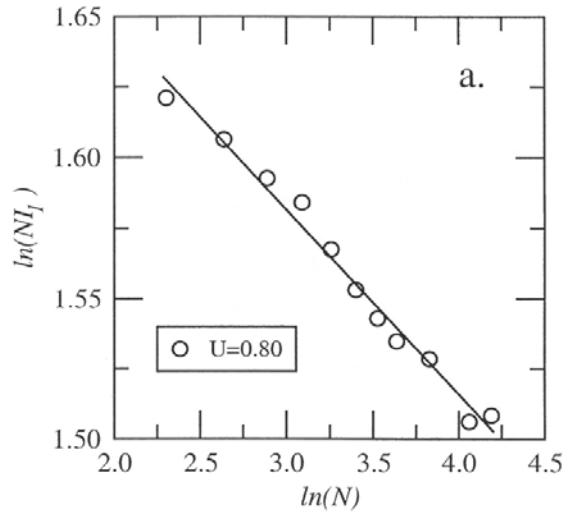




Figura 17

Peso de Drude em função de  $r$ , para diferentes valores de  $U$  (em unidades de  $t$ ), com  $N=26$

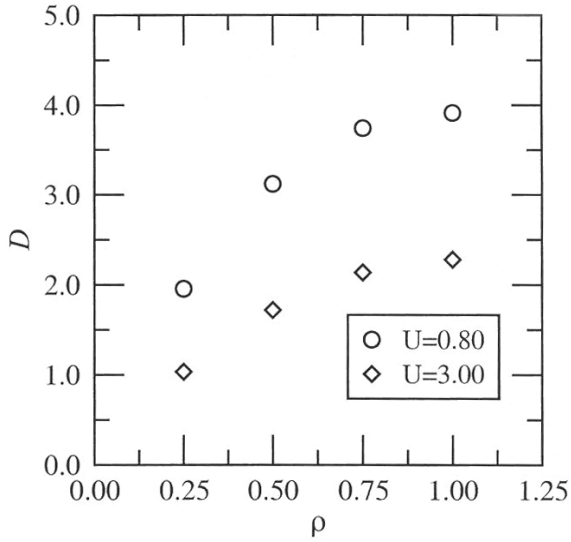


Figura 19

Dependência do peso de Drude em  $N$ , para diferentes valores de  $U$  (em unidades de  $t$ ) e  $r=0.50$ . a. Na fase LL; b. Na fase CDW

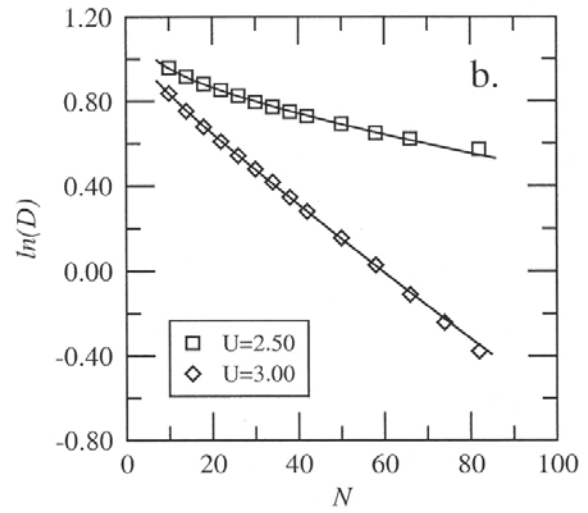
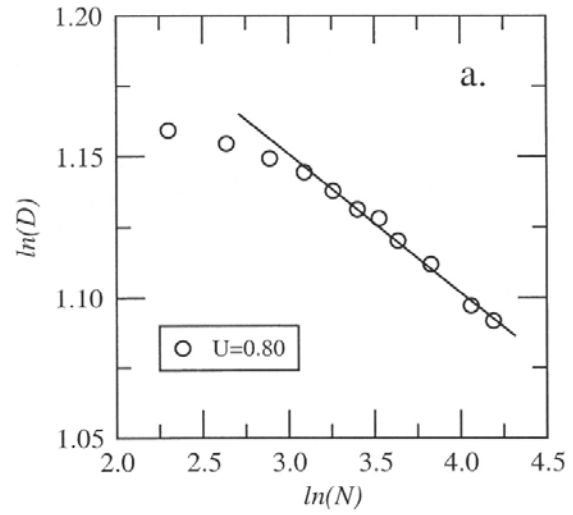


Figura 18

Peso de Drude vs  $1/N$ , para diferentes valores de  $U$  (em unidades de  $t$ ), com  $r=0.50$

