



Douglas Fagner Costa Aleodin Silva

A Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson Como Uma Transição de Fase Quântica

Salvador

2022

Douglas Fagner Costa Aleodin Silva

A Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson Como Uma Transição de Fase Quântica

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Universidade Federal da Bahia – UFBA

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Massimo Ostilli

Salvador

2022

Aos meus pais ...

“Porque dele, e por ele, e para ele
são todas as coisas; glória, pois, a
ele eternamente.”

Romanos 11:36

Resumo

No limite termodinâmico, dois gases de fermiões não-interagentes confinados e à temperatura nula, que diferem apenas pela presença de uma impureza local ou por um potencial simétrico que decai rapidamente com a distância, possuem densidades de energia iguais. No mesmo limite, seus respectivos estados fundamentais, por consequência da Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson, são ortogonais. Nós estudamos esta fenomenologia, demonstramos sua universalidade, e desenvolvemos a analogia dela com a Transição de Fase Quântica de Primeira Ordem.

Palavras-chave: Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson, Universalidade, Transição de Fase Quântica.

Abstract

In the thermodynamic limit, two gases of confined non-interacting fermions at zero temperature, which differ only by the presence of a local impurity or by a symmetrical potential that decays rapidly with distance, have equal energy densities. In the same limit, their respective ground states, as a consequence of the Anderson Orthogonality Catastrophe, are orthogonal. We study this phenomenology, demonstrate its universality, and develop its analogy with the First Order Quantum Phase Transition.

Keywords: Anderson Orthogonality Catastrophe, Universality, Quantum Phase Transition.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Distribuição energética de bósons e férmions no estado fundamental	25
Figura 2 – Energia por partícula ϵ obtida por Diagonalizações Numéricas em função de g para o modelo de (5.1.12)	44
Figura 3 – Diagrama de energia da absorção e emissão	51
Figura 4 – Impacto do valor de α_l na taxa de transição da absorção	56
Figura 5 – Efeito da AOC no espectro da absorção	57
Figura 6 – Representação de um espalhamento quântico	59
Figura 7 – Seção de Choque Diferencial	61
Figura 8 – Modelo básico de dois canais para uma ressonância de Feshbach	66

Lista de tabelas

Tabela 1 – Similaridades entre a AOC e a QPT de Primeira Ordem 47

Sumário

	Sumário	11
1	INTRODUÇÃO	13
2	CATÁSTROFE DA ORTOGONALIDADE DE ANDERSON	16
2.1	Contexto Teórico-Experimental da AOC	16
2.2	Descrição	17
2.2.1	Overlap de Anderson	19
2.2.2	Caso Tridimensional	20
3	ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE FÉRMIONS NÃO-INTERAGENTES	23
3.1	Universalidade	23
3.1.1	Argumento Heurístico	24
3.2	Exemplos de Potenciais	25
3.2.1	Uma δ -Dirac confinada	25
3.2.2	Duas δ -Dirac confinadas	29
3.2.3	Modelo de Brinquedo	31
3.2.4	Contra-Exemplo	32
3.3	Variáveis de Prüfer	32
3.3.1	Caso Unidimensional	33
3.3.2	Caso Tridimensional	34
3.3.3	Caso Bidimensional	35
4	DESLOCAMENTO DE FASE	37
4.1	Teorema de Fumi	37
4.1.1	Caso Unidimensional Simétrico	38
5	TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA	40
5.1	Fundamentação Teórica	40
5.1.1	Transição de Fase Quântica de Primeira Ordem	41

5.1.2	Modelo de Grover	43
6	CONEXÃO ENTRE AOC E QPT	46
6.1	Descrição	46
6.2	Absorção de Raio-X	50
6.2.1	Segunda Quantização	53
6.2.2	Modelo Bulklike	54
6.2.3	Efeito da AOC	55
6.3	Espalhamento	57
6.3.1	Estados Ligados	61
6.3.2	Ressonâncias de Feshbach	65
7	CONCLUSÃO	67
8	ÂPENDICE	70
8.1	Teoria da Perturbação	70
8.2	Funções especiais	71
8.3	Overlap do Caso Unidimensional	73
	REFERÊNCIAS	75

1 Introdução

A Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson (Anderson Orthogonality Catastrophe ou AOC) é um efeito intrínseco dos gases de Fermi e foi estudada pelo físico P. W. Anderson [1]. Ele demonstrou que no limite termodinâmico, o estado fundamental de um sistema de N férmions não-interagentes em três dimensões espaciais, é assintoticamente ortogonal ao estado fundamental do mesmo sistema perturbado por um potencial simétrico de alcance limitado. A característica surpreendente deste resultado é que, no limite termodinâmico do sistema, a única impureza que gera a perturbação torna-se infinitamente diluída, e apesar disso, o estado fundamental do sistema original e do sistema impuro, tornam-se ortogonais (foi essa característica que levou Anderson a usar o termo *catástrofe*). Na catástrofe, o comportamento assintótico do overlap de dois estados fundamentais, ligeiramente diferentes, é da ordem de $N^{-\gamma}$, sendo $\gamma > 0$ uma constante que depende do hamiltoniano do sistema.

O trabalho original de Anderson em 1967 sobre a AOC era extremamente sintético e matematicamente obscuro. Com o passar do tempo, a literatura matemática enfrentou a AOC com técnicas rigorosas mas de difícil alcance para os físicos; por exemplo, Affleck [2] usou a sofisticada teoria de campo conforme para derivar a AOC. Em anos mais recentes, resultados da AOC foram colocados em conexão com a Transição de Fase Quântica (Quantum Phase Transition ou QPT) [3, 4] nos modelos de férmions quasi-livres [5], o modelo de Dicke e o modelo XY [6]. Especialmente visto em [7], a análise de um modelo unidimensional de férmions não-interagentes na treliça, mostra que a ortogonalidade dos estados fundamentais na QPT de primeira ordem é alcançada por uma condição análoga à da AOC, o overlap entre os estados fundamentais das duas fases tendendo a zero no limite termodinâmico. A teoria desenvolvida no capítulo 5 serve para identificar uma grande classe de QPTs de primeira ordem que levam à condensação *many-body* através de um mecanismo contraintuitivo que pode ser interpretado como uma AOC. Com esse pano de fundo, destacamos a analogia

da AOC do fenômeno da absorção dos raios-x com a QPT.

A tese é organizada como se segue. O capítulo 2 deriva a AOC e corrige algumas omissões nos passos matemáticos feitos por Anderson em seu trabalho original. Introduzimos as respectivas funções de onda do modelo, bem como as energias dos estados fundamentais. Apresentamos o Overlap de Anderson avaliando o caso unidimensional e tridimensional. Concluímos o capítulo com a generalização do overlap para qualquer dimensão.

No capítulo 3, demonstramos um dos principais resultados discutidos na tese, a universalidade da energia dos estados fundamentais de sistemas fermiônicos não-interagentes (o estudo desta universalidade, durante a escrita da tese, gerou nosso artigo publicado [8]). Consideramos N férmions não-interagentes confinados numa caixa de comprimento L e dimensão espacial D . No limite termodinâmico, com a razão N/L^D mantida constante, e à temperatura nula, a energia por partícula de dois destes sistemas, e que diferem apenas por um potencial simétrico de alcance limitado, é igual. Ou ainda, em outras palavras, a energia por partícula dos sistemas fermiônicos não-interagentes, no limite termodinâmico, não depende do potencial, e é portanto, universal. Fornecemos primeiramente um argumento heurístico para a universalidade, baseado na ausência de interação e o Princípio de Exclusão de Pauli, e depois realizamos aplicações desta universalidade considerando potenciais do tipo δ -Dirac confinados. Mostramos também um contra-exemplo à universalidade. Usamos a ferramenta matemática das variáveis de Prüfer com o propósito de generalizar a universalidade para qualquer potencial simétrico, confinado em modelos unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais. Tipicamente, a fórmula para a diferença das energias dos estados fundamentais do sistema perturbado e não-perturbado é expressa em termos de integrais das funções espectrais de deslocamento para operadores de Schrödinger de uma partícula; todavia, através das variáveis de Prüfer, nós exibimos uma maneira mais simples de demonstrar a universalidade.

Calculamos explicitamente no capítulo 4 o deslocamento de fase do caso unidimensional simétrico, via Teorema de Fumi, separando as soluções da equação de Schrödinger em pares e ímpares. Constatamos que

para as soluções pares, o deslocamento de fase só é bem definido no limite termodinâmico. Já no capítulo 5, exibimos a fundamentação teórica das QPTs de primeira ordem e o mecanismo que as identifica, sugerindo uma conexão destas transições com a AOC. No capítulo 6, comentamos as similaridades entre a AOC e a QPT de primeira ordem com o uso da tabela 1, onde listamos características que os dois fenômenos compartilham, para em seguida relacionar a absorção por raios-x como exemplo da analogia proposta entre a AOC e QPT. Logo após, associamos a seção de choque e as ressonâncias do espalhamento quântico com a AOC. No capítulo 7, concluimos a tese.

2 Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson

Neste capítulo, introduzimos a AOC, e abordamos seu caso unidimensional e tridimensional. No fim do capítulo, extrapolamos o resultado para D dimensões.

2.1 Contexto Teórico-Experimental da AOC

No limite termodinâmico (Thermodynamic Limit ou TDL), a divergência infravermelha no número de excitações produzidas por uma impureza infinitesimal em um sistema de férmions não-interagentes, provoca a ortogonalidade entre o estado fundamental do sistema com e sem a impureza. Por divergência infravermelha, se quer dizer que no TDL, os estados fundamentais do sistema com a impureza (infinitamente diluída) e do sistema sem a impureza, ficam diferentes por um número infinito de excitações de baixa energia, isto é, excitações no infravermelho (no capítulo 3, demonstramos que no TDL, a densidade das energias do sistema com a impureza e sem a impureza, são iguais). Como efeito deste fenômeno, há o surgimento de pontos não-analíticos na absorção por raios-X (no capítulo 6, o efeito da AOC na absorção dos raios-X pelos metais é discutido).

Em 1958, P.W. Anderson publicou um artigo sugerindo que certos materiais podem sofrer uma transição de fase de condutor para isolante, sob uma pequena mudança na quantidade de desordem do material [9]. Em trabalhos recentes, como o de S. Ketterman [10], a AOC é relacionada com a transição metal-isolante via fidelidade (no capítulo 6 introduzimos o conceito da fidelidade e como ela conecta a AOC com QPTs de primeira ordem). A AOC também pode suprimir o tunelamento quântico [11].

P.W. Anderson modelou um sistema com N elétrons de condução em que um átomo impuro é introduzido [12]. Este modelo ficou conhecido como Modelo da Impureza de Anderson e descreve o surgimento de momentos magnéticos locais devido à presença da impureza magnética. Experimentalmente é conhecido que certos metais em baixas temperaturas, quando

diluídos em impurezas magnéticas, apresentam um mínimo na sua resistividade elétrica. O físico J. Kondo mostrou que os elétrons de condução de tais metais são espalhados pela presença da impureza magnética local, onde a amplitude do espalhamento e a resistividade elétrica do sistema crescem logaritmicamente à medida que a temperatura vai para zero [13]. A explicação do fenômeno ficou conhecida por efeito Kondo. No TDL, os estados fundamentais do modelo de Kondo com e sem a impureza, ficam ortogonais, uma consequência direta da AOC [14].

Originalmente P.W. Anderson demonstrou a AOC considerando o gás de Fermi de elétrons não-interagentes com um potencial local separável. Em 1982, Yamada e Yosida generalizaram o resultado de Anderson para o caso de elétrons interagentes em que o potencial local é não-separável [15]. Na próxima seção, a AOC é descrita matematicamente, e torna-se imediato perceber a dificuldade em calcular os elementos da matriz do Overlap de Anderson para o caso interagente.

2.2 Descrição

No artigo de 1967 de P.W. Anderson sobre a AOC [1], ele descreve um gás de férmions não-interagentes em que o overlap do estado fundamental do sistema original e do sistema perturbado por um potencial simétrico de alcance limitado, vai para zero no TDL; isto é, os estados fundamentais do sistema sem potencial e com potencial, ficam ortogonais. Além da ortogonalidade, outro aspecto contraintuitivo dessa fenomenologia demonstrado no Capítulo 3, está no fato de que, as respectivas densidades das energias dos estados fundamentais, neste mesmo limite, se igualam [16].

O sistema reside em uma caixa finita $[0, L]^D$ (D sendo a dimensão espacial e L o comprimento da caixa). O crescimento de N e L , no TDL, é feito de tal maneira que a densidade de partícula $\rho = N/L^D$ se mantém constante. Originalmente, P.W. Anderson estudou esta assintótica numa caixa tridimensional.

Considere um gás de férmions não-interagentes e à temperatura nula, confinado numa caixa esférica ($D=3$) de raio L com uma impureza locali-

zada em seu centro $r = 0$. Em termos das funções de onda, a impureza presente no gás deve produzir pequenos deslocamentos na fase em comparação com o sistema sem a impureza. A parte radial da função de onda esférica de uma partícula do gás de massa m e com momento angular $l = 0$, no sistema sem a impureza, é dada por

$$\phi_n(r) \propto \frac{\sin(n\pi r/L)}{r} = \frac{\sin(k_n r)}{r}, \quad (2.2.1)$$

cujo espectro de energia correspondente é

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (2.2.2)$$

Por ser um sistema fermiônico não-interagente, cada autofunção do operador hamiltoniano está associado a apenas uma partícula; além disso, as energias E_n obedecem $E_1 < E_2 < E_3 \dots < E_N$. Em consequência, a energia do estado fundamental do sistema sem a impureza, será a soma das energias das partículas individuais:

$$E(N, L) = \sum_{n=1}^N E_n = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sum_{n=1}^N n^2. \quad (2.2.3)$$

Na presença da impureza, a equação de Schrödinger, em geral, não é resolvida exatamente. Contudo, sendo o potencial $V(r)$ de alcance limitado, se supormos que exista um R_0 , tal que o potencial $V(r)$ seja nulo para $r > R_0$, a equação de Schrödinger, nesta região, coincide com a do caso sem impureza: a solução permanece como a de uma onda esférica com a mesma condição de contorno em $r = L$, porém, agora com um novo número de onda \tilde{k}_n que leva em conta a presença da impureza. Do ponto de vista formal, isto é análogo a um problema de espalhamento (mais exatamente, um problema de espalhamento não-elástico para estados ligados, discutido na subseção 6.3) onde as complicações devido à presença de V são codificadas através de um único parâmetro chamado deslocamento de fase δ_n (calculado explicitamente no capítulo 4), o qual determina sejam as funções de onda por $r > R_0$, sejam os níveis energéticos. De fato, na presença da impureza, para $r > R_0$, a função de onda esférica assume a seguinte forma:

$$\psi_n(r) \propto \frac{\sin(\tilde{k}_n r - \delta_n)}{r} = \frac{\sin\{r(k_n + \delta_n/L) - \delta_n\}}{r}. \quad (2.2.4)$$

Pode-se dizer que o deslocamento de fase δ_n mede o quanto a solução assintótica da equação de Schrödinger com $V(r)$, é deslocada da solução assintótica da partícula no caso sem a impureza. O espectro de energia \tilde{E}_n do sistema impuro é também deslocado pelo termo δ_n (i.e., $(n\pi)^2 \rightarrow (n\pi + \delta_n)^2$) em relação ao sistema sem a impureza:

$$\tilde{E}_n = \frac{\hbar^2 (n\pi + \delta_n)^2}{2mL^2}. \quad (2.2.5)$$

De modo análogo ao que foi feito em (2.2.3), calculamos a energia do estado fundamental do sistema com a impureza, sendo

$$\tilde{E}(N, L) = \sum_n^N \tilde{E}_n \approx \sum_{n=1}^N \left(\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \right) + \sum_{n=1}^N \frac{n\pi \hbar^2 \delta_n}{mL^2}. \quad (2.2.6)$$

2.2.1 Overlap de Anderson

Vamos construir a função de onda deste sistema de tal forma que dois férmions não ocupem o mesmo estado, ou que dois ou mais férmions não possam ter o mesmo número quântico n_i . Por exemplo, no caso de dois férmions idênticos sem spin, a função de onda é obtida pelo produto antisimétrico:

$$\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_1 \pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi x_2}{L}\right) - \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_2 \pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n_1 \pi x_2}{L}\right) \right]. \quad (2.2.7)$$

Por conseguinte, para N férmions não-interagentes, a função de onda do sistema com a impureza é construída através do determinante de Slater:

$$\psi_{n_1, \dots, n_N}(x_1, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{1}{N!}} \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_2}(x_1) & \cdots & \psi_{n_N}(x_1) \\ \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_2}(x_2) & \cdots & \psi_{n_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_1}(x_N) & \psi_{n_2}(x_N) & \cdots & \psi_{n_N}(x_N) \end{pmatrix}, \quad (2.2.8)$$

também denotada como

$$\Psi_L^N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_n(x_j))_{n, j \leq N}. \quad (2.2.9)$$

Analogamente, a função de onda de N férmions não-interagentes do sistema sem a impureza, será

$$\Phi_L^N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\phi_n(x_j))_{n, j \leq N}. \quad (2.2.10)$$

Portanto, o produto escalar entre Ψ_L^N e Φ_L^N , realizado no espaço de N férmions de Hilbert, é

$$S_L(E) = \langle \Phi_L^N | \Psi_L^N \rangle_N = \det \{ \langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle \}_{n,n'=1,\dots,N}. \quad (2.2.11)$$

A equação (2.2.11) é conhecida na literatura da AOC pelo termo *ground state overlap* e é expressa pelo determinante de uma matriz $N \times N$:

$$S_L(E) = \det \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_1 | \psi_N \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_N | \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_N | \psi_N \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.2.12)$$

Pela desigualdade de Hadamard, demonstra-se que o ground state overlap (2.2.11) possui um limite superior. A desigualdade de Hadamard afirma que se A é uma matriz $n \times n$ que tem a_j vetores colunas, então vale que [17]

$$|\det\{A\}| \leq \prod_{j=1}^n \|a_j\|. \quad (2.2.13)$$

Usando esta desigualdade no overlap, obtém-se

$$|S_L(E)| = \left| \det \{ \langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle \}_{n,n'=1,\dots,N} \right| \leq \prod_{n=1}^N \left(\sum_{n'=1}^N |\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle|^2 \right)^{1/2}, \quad (2.2.14)$$

que pela identidade de Parseval $\sum_{n'=1}^N |\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle|^2 = 1 - \sum_{n'=N+1}^{\infty} |\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle|^2$ em (2.2.14), chega-se ao resultado apresentado por Anderson [1]:

$$|S_L(E)| \leq \prod_{n=1}^N \left(1 - \sum_{n'=N+1}^{\infty} |\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle|^2 \right)^{1/2}. \quad (2.2.15)$$

2.2.2 Caso Tridimensional

Para avaliar o overlap (2.2.11) em $D = 3$, retomamos em mais detalhes as ideias mencionadas na introdução do capítulo. Consideramos uma partícula dentro de uma caixa esférica rígida (isto é, uma caixa com paredes impenetráveis) de raio L e apresentamos dois casos: (i) a caixa é vazia e (ii) a caixa contém uma impureza que gera um potencial $V(r)$ de simetria esférica e alcance limitado (representado, por exemplo, por uma δ -Dirac). No

primeiro caso, a função de onda da partícula no setor de momento angular nulo, $l = 0$, é

$$\phi_n(r) = N_n \frac{\sin(k_n r)}{k_n r}, \quad (2.2.16)$$

obedecendo à equação de Schrödinger

$$-\frac{d^2 \phi_n(r)}{dr^2} = k_n^2 \phi_n(r), \quad (2.2.17)$$

com $k_n = n\pi/L$. As condições de contorno são tais que $\phi_n(0) = \phi_n(L) = 0$. Considerando a perturbação $V(r)$, a equação de Schrödinger passa a ser

$$-\frac{d^2 \psi_n(r)}{dr^2} + V(r)\psi(r) = \tilde{k}_n^2 \psi_n(r), \quad (2.2.18)$$

cuja solução $l = 0$ da onda esférica na região longe do alcance do potencial, é:

$$\psi_n(r) \approx N_n \frac{\sin(k_n r - \delta_n(1 - r/L))}{k_n r}, \quad (2.2.19)$$

onde $\tilde{k}_n \approx k_n + \delta_n/L$ e $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Logo, a equação (2.2.19), é reescrita como

$$\psi_n(r) \sim N_n \frac{\sin\{r(k_n + \delta_n/L) - \delta_n\}}{k_n r} = N_n \frac{\sin\{\tilde{k}_n r - \delta_n\}}{k_n r}. \quad (2.2.20)$$

Ora, utilizando (2.2.16), o overlap $\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle$ é

$$\int_0^L 4\pi \frac{N_n N_{n'}}{k_n k_{n'}} \sin(k_n r) \sin(\tilde{k}_{n'} r - \delta_{n'}) dr. \quad (2.2.21)$$

Observando a identidade $\sin(mr) \sin(nr) = 1/2 [\cos((m-n)r) - \cos((m+n)r)]$, o cálculo da integral (2.2.21) é trivial:

$$\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle = 2\pi L \frac{N_n N_{n'}}{k_n k_{n'}} \left\{ \frac{\sin(\delta_{n'})}{\pi(n' - n) + \delta_{n'}} - \frac{\sin(\delta_{n'})}{\pi(n' + n) + \delta_{n'}} \right\}. \quad (2.2.22)$$

Pela normalização das constantes $N_n = \frac{k_n}{(2\pi L)^{1/2}}$, o resultado (2.2.22) é aproximado para

$$\langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle \approx \frac{\sin(\delta_{n'})}{\pi(n' - n) + \delta_{n'}} = A_{n,n'}, \quad (2.2.23)$$

onde foi desprezado o segundo termo de (2.2.22) devido a $n, n' > 0$ e as contribuições mais relevantes dos casos serem para os valores de $n \sim n'$,

pois no limite $\delta_{n'} \rightarrow 0$, o primeiro termo de (2.2.22) já fornece o resultado exato, ou seja

$$\lim_{\delta_{n'} \rightarrow 0} \frac{\sin(\delta_{n'})}{\pi(n' - n) + \delta_{n'}} = \lim_{\delta_{n'} \rightarrow 0} \langle \phi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{n,n'}. \quad (2.2.24)$$

O determinante do módulo de $A_{n,n'}$, de acordo com (2.2.11), é o overlap aproximado para uma partícula. Logicamente, o overlap para N partículas deve ter um limite superior na soma dos overlaps (2.2.23). Esse raciocínio está codificado na equação (2.2.15). Substituindo (2.2.23) em (2.2.15), e usando a série de potência da função exponencial, temos

$$S \leq \sim \exp \left\{ \left[-\frac{1}{2} \sum_{\substack{n < n_f \\ m > n_f}} \frac{\sin^2 \delta_n}{\pi^2(m - n + \delta_n)^2} \right] \right\}, \quad (2.2.25)$$

em que tomamos por conveniência $\tilde{k}_{n'} = (n'\pi + \delta)/L = m\pi/L$ com n_f sendo o número quântico associado à energia de Fermi; a nível de curiosidade, o fator 1/2 de (2.2.25) foi omitido no artigo original da AOC [1]. O somatório (2.2.25) para δ_n pequeno é aproximado numa integral do tipo:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\substack{n < n_f \\ m > n_f}} \frac{1}{(m - n + \delta_n)^2} \simeq \int_1^M \frac{1}{s} ds = \ln(M), \quad (2.2.26)$$

sendo M um número quântico que obedece à relação energética $k_M^2 = 2mE_M/\hbar^2$,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi M}{L} \right)^2 = E_M. \quad (2.2.27)$$

Nas unidades atômicas ($\hbar = m = 1$), a equação (2.2.27) demonstra que $M \sim N^{1/3}$, pois, E_M foi tomado para pequenos valores de δ_n . Deste modo,

$$S \leq \sim \exp \left\{ \left[-\frac{1}{2} \frac{\sin^2 \delta}{\pi^2} \ln N^{1/3} \right] \right\} = N^{-\sin^2 \delta / 6\pi^2}, \quad (2.2.28)$$

onde δ foi aproximado como o valor médio de δ_n ; mais rigorosamente, a equação (2.2.28) é válida para $\delta = \max_n \{\delta_n\}$. Em D dimensões, (2.2.28) decai como $\sim (N/\rho)^{-\sin^2 \delta / (2\pi^2 D)}$. Generalizando (2.2.28) para todos momentos angulares, temos ainda que

$$S \leq \sim \exp \left\{ \left[-\sum_l \frac{1}{2} \frac{(2l+1) \sin^2 \delta_l}{\pi^2} \ln N^{1/3} \right] \right\} = N^{-\sum (2l+1) \sin^2 \delta_l / 6\pi^2} = N^{-\gamma}. \quad (2.2.29)$$

3 Energia do Estado Fundamental de Férmi- ons Não-Interagentes

De acordo com o nosso trabalho da Ref. [8], desenvolvemos neste capítulo, a universalidade da energia do estado fundamental dos sistemas fermiônicos não-interagentes, exemplificamos essa universalidade com energias potenciais tipo δ -Dirac, e para casos mais gerais, com as variáveis de Prüfer.

3.1 Universalidade

Sistemas não-interagentes cujas soluções são analíticas, fornecem fundamentos para a compreensão de modelos mais realísticos. Tais sistemas podem ser analisados no TDL definido na divergência do número de partículas N e do volume L^D , enquanto mantêm-se a razão N/L^D fixa. Como objeto do nosso estudo, consideramos o TDL da energia do estado fundamental de um sistema fermiônico não-interagente de N partículas confinadas numa caixa de volume L^D , onde L é o comprimento e D a dimensão do espaço. As condições de contorno do problema são tais que as funções de onda, soluções da equação de Schrödinger, são nulas nas paredes da caixa. A energia do estado fundamental do sistema é denotada por $E(N, L)$; já a energia do estado fundamental de um sistema idêntico, cuja única diferença é a introdução do potencial simétrico V em que as partículas estão submetidas, é dada por $\tilde{E}(N, L)$. O resultado geral discutido é que para L grande, as energias desses dois sistemas à temperatura nula, diferem no máximo por termos $O(L)$; em outras palavras, no TDL, ambas energias divergem como $O(L^D)$, e a razão entre elas tende a 1. Mais precisamente, para um potencial contínuo $V(r)$ simetricamente esférico, tendendo a zero como $V(r) \sim 1/r^\alpha$ para r grande e que satisfaz a condição

$$\int_0^L V(r) dr = O(L^{1-\alpha}), \quad \alpha > 0, \quad (3.1.1)$$

temos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty, (N/L^D) = \rho} \frac{\tilde{E}(N, L)}{E(N, L)} = 1. \quad (3.1.2)$$

O alvo do presente trabalho é tornar clara a afirmação (3.1.2) e prová-la para $D = 1, 2$ e 3 .

3.1.1 Argumento Heurístico

Considere uma caixa D -dimensional de volume L^D de paredes rígidas com N férmions não-interagentes e sem spin submetidos a um potencial V de alcance limitado a uma região de volume l^D . Dizer que as paredes são rígidas, significa que a partícula está confinada dentro da caixa ou que a função de onda associada à partícula é nula fora da caixa. Pelo princípio de Pauli, a energia deste sistema sem spin e à temperatura nula, é a soma da energia de N partículas dispostas nos primeiros N níveis energéticos (veja a Figura 1); cada estado quântico do sistema é ocupado por apenas uma partícula (para $D \geq 2$, os níveis podem ser degenerados pelos números quânticos do momento angular; neste caso, o argumento heurístico aqui apresentado fica igualmente válido em cada setor do momento angular).

Agora, o que acontece com a energia do estado fundamental à medida que L e N crescem? Para avaliar essa questão, considere uma sequência de caixas com volume crescente L_1^D, L_2^D, \dots , e correspondente número de férmions N_1, N_2, \dots , tal que a razão $\rho = N_i/L_i^D$, $i = 1, 2, \dots$, seja mantida constante. Para índice i suficientemente grande, teremos que a razão l/L_i vai para zero quando $i \rightarrow \infty$. Se $l \ll L_i$, pelo princípio de Pauli, as partículas tendem a ocupar homoganeamente todo o espaço físico, dado que a influência do potencial V na energia de cada partícula será $O(l/L_i)$, isto é, uma contribuição cada vez menor à medida que a caixa cresce. Quer dizer, com ρ fixo, a energia do estado fundamental do sistema na presença de V vai se tornando mais próxima à energia do sistema sem V , enquanto N e L crescem. Isto, equivale a dizer que, no TDL, a energia por partícula do estado fundamental com potencial e sem potencial, se igualam, em conformidade com (3.1.2).

Por este raciocínio, também podemos afirmar que não há análogo de

(3.1.2) para bósons não-interagentes; afinal, ao contrário dos férmions, os bósons podem ocupar um mesmo estado quântico, o que implicaria para números quânticos suficientemente grandes, uma energia do estado fundamental que não é homoganeamente distribuída na caixa; os bósons seriam distribuídos próximos da região em que o potencial V é mínimo, formando um condensado no nível mais baixo da energia.

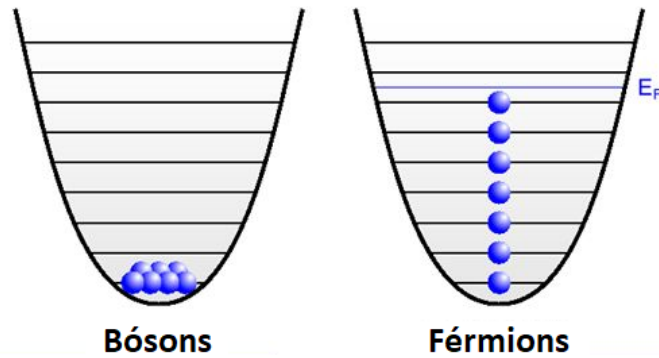


Figura 1 – Distribuição energética de bósons e férmions no estado fundamental [18]

Para demonstrar a validade desse raciocínio e de (3.1.2), vamos considerar primeiramente o potencial δ -Dirac.

3.2 Exemplos de Potenciais

3.2.1 Uma δ -Dirac confinada

Considere o potencial atrativo da Delta de Dirac dentro de uma barreira potencial infinita:

$$V(x) = \begin{cases} -\beta\delta(x) & \text{para } -L/2 < x < L/2, \\ \infty & \text{para } |x| \geq L/2. \end{cases} \quad (3.2.1)$$

A equação de Schrödinger é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -V(x)\psi(x) + \tilde{E}\psi(x), \quad (3.2.2)$$

com $V(x) = \tilde{V}(x) - \beta\delta(x)$ e $k^2 = \frac{2m\tilde{E}}{\hbar^2}$ na região $-L/2 < x < L/2$. Assim,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [\tilde{V}(x) - \tilde{E}]\psi(x) - \frac{2m\beta}{\hbar^2} \delta(x)\psi(x). \quad (3.2.3)$$

Vamos integrar (3.2.3) num intervalo infinitesimal Δ em torno de 0:

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\Delta}^{\Delta} [\tilde{V}(x) - \tilde{E}] \psi(x) dx - \frac{2m\beta}{\hbar^2} \int_{-\Delta}^{\Delta} \delta(x) \psi(x) dx, \quad (3.2.4)$$

logo,

$$\psi'(\Delta) - \psi'(-\Delta) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\Delta}^{\Delta} [\tilde{V}(x) - \tilde{E}] \psi(x) dx - \frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(0). \quad (3.2.5)$$

No limite $\Delta \rightarrow 0$,

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(0). \quad (3.2.6)$$

A barreira potencial pode ser dividida em duas regiões, cujas respectivas funções de onda são

$$\psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx); \quad -L/2 < x < 0, \quad (3.2.7)$$

$$\psi_2(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx); \quad 0 < x < L/2. \quad (3.2.8)$$

As equações (3.2.7) e (3.2.8) admitem duas famílias de soluções; as soluções pares quando $\psi_1(x) = \psi_2(-x)$ e as soluções ímpares $\psi_1(x) = -[\psi_2(-x)]$. Começando com as soluções pares, temos que:

$$\psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (3.2.9)$$

$$\psi_2(x) = -A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (3.2.10)$$

assim, $A = -C$ e $B = D$. Sabendo que $\psi_1(x = -L/2) = 0$ e que $\psi_2(x = L/2) = 0$, vem que

$$\psi_1(x = -L/2) = \psi_2(x = L/2) = -A \sin(kL/2) + B \cos(kL/2) = 0 \Rightarrow \tan(kL/2) = \frac{B}{A}. \quad (3.2.11)$$

Substituindo (3.2.9) e (3.2.10) em (3.2.6):

$$\begin{aligned} [-kA \cos(kx) - kB \sin(kx)] \Big|_{x=0^+} - [kA \cos(kx) - kB \sin(kx)] \Big|_{x=0^-} &= -\frac{2m\beta B}{\hbar^2}, \\ \Rightarrow -2kA &= -\frac{2m\beta B}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

mas, como vimos

$$B = A \tan(kL/2) \Rightarrow \tan(kL/2) = \frac{\hbar^2 k}{m\beta}; \quad (3.2.13)$$

com $z \equiv kL/2$, vem

$$\tan(z) = \frac{\hbar^2}{m\beta L/2} z. \quad (3.2.14)$$

No limite quando $L \rightarrow \infty$, a equação (3.2.14) tem solução para $z = n\pi$, que independe de β , e fornece o espectro de energia para L grande e finito

$$\tilde{E}_n = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + O\left(\frac{\hbar^4 n^2}{m^2 \beta L^3}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.15)$$

Note que no caso $V = 0$, a eq. (3.2.2) resulta nos conhecidos autovalores $E_n = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$.

Já para as soluções ímpares

$$\psi_1(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (3.2.16)$$

$$\psi_2(x) = A \sin(kx) - B \cos(kx), \quad (3.2.17)$$

com a condição $x = 0 \Rightarrow B = 0$ temos

$$\psi(x) = A \sin(kx), \quad (3.2.18)$$

que para $x = L/2 \Rightarrow A \sin(kL/2) = 0 \Rightarrow kL/2 = n\pi$, fornece a igualdade exata

$$\tilde{E}_n = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.19)$$

Agora, considere os autovalores negativos da energia. As funções de onda que correspondentes às regiões $-L/2 < x < 0$ e $0 < x < L/2$, são respectivamente:

$$\psi_1(x) = A e^{Kx} + B e^{-Kx}, \quad (3.2.20)$$

$$\psi_2(x) = C e^{Kx} + D e^{-Kx}. \quad (3.2.21)$$

Pela equação de Schrödinger,

$$K = \sqrt{\frac{-2m\tilde{E}}{\hbar^2}}. \quad (3.2.22)$$

Em $x = -L/2$, a função de onda $\psi_1(x)$ deve ser nula (da mesma forma para $x = L/2$ com ψ_2), ou seja

$$\psi_1(-L/2) = 0 \Rightarrow A e^{-KL/2} + B e^{KL/2} = 0, \quad (3.2.23)$$

$$\psi_2(L/2) = 0 \Rightarrow Ce^{KL/2} + De^{-KL/2} = 0. \quad (3.2.24)$$

Em $x = 0$, onde se localiza a δ -Dirac, as funções de onda das duas regiões são iguais:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = 0 \Rightarrow A + B = C + D. \quad (3.2.25)$$

No caso com os autovalores positivos da energia, demonstramos a validade da equação (3.2.6). Substituindo os resultados anteriores nela, encontramos

$$K(C - D) - K(A - B) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}(A + B). \quad (3.2.26)$$

Note que pelas equações (3.2.23) e (3.2.24) podemos determinar as constantes

$$A = -Be^{KL}, \quad (3.2.27)$$

$$C = -De^{-KL}; \quad (3.2.28)$$

usando essas relações na equação (3.2.25), obtemos $A = D$. Assim, a equação (3.2.26) fica como

$$-De^{-KL} - D - D - De^{-KL} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 K} D(1 - e^{-KL}), \quad (3.2.29)$$

que com algum algebrismo resulta em

$$\frac{1 + e^{-KL}}{1 - e^{-KL}} = \frac{m\beta}{\hbar^2 K}. \quad (3.2.30)$$

O termo do lado esquerdo de (3.2.30) é a cotangente hiperbólica de $KL/2$. Finalmente,

$$\tanh(KL/2) = \frac{\hbar^2 K}{m\beta} = \tanh(Z) = \frac{2\hbar^2 Z}{m\beta L}, \quad (3.2.31)$$

que nos permite calcular possíveis K que geram energias de estados ligados e onde definimos $Z = KL/2$. A equação (3.2.31) admite uma única solução não-trivial se $b \equiv \frac{2\hbar^2}{m\beta L} < 1$, que é satisfeita para $L \rightarrow \infty$, levando a $Z \rightarrow \pm[3(1 - b)]^{1/2}$, e conseqüentemente a

$$\tilde{E} = -\frac{6\hbar^2}{mL^2} + O\left(\frac{\hbar^4}{m^2\beta L^3}\right). \quad (3.2.32)$$

Considere agora N férmions não-interagentes na barreira potencial infinita. A energia $E(N, L)$ do estado fundamental é dada por:

$$\sum_{n=1}^N \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left(\frac{N^3}{3} + \frac{N^2}{2} + \frac{N}{6} \right). \quad (3.2.33)$$

De modo similar, usando as equações (3.2.15), (3.2.19) e (3.2.32) (que contribui no estado fundamental com um único autoestado na mais baixa energia), temos para a δ -Dirac confinada pela barreira potencial infinita que

$$\begin{aligned} \tilde{E}(N, L) &= 2 \sum_{n=1}^{N/2} \left[\frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + O\left(\frac{\hbar^4 n^2}{m^2 \beta L^3}\right) \right] + O\left(\frac{\hbar^2 N^2}{mL^2}\right) \\ &= \left[\frac{8\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + O\left(\frac{\hbar^4 n^2}{m^2 \beta L^3}\right) \right] \times \left(\frac{(N/2)^3}{3} + \frac{(N/2)^2}{2} + \frac{(N/2)}{6} \right) + O\left(\frac{\hbar^2 N^2}{mL^2}\right). \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

Fazendo a razão entre (3.2.34) e (3.2.33), obtemos

$$\frac{\tilde{E}(N, L)}{E(N, L)} = \frac{8(N/2)^3}{N^3} + O\left(\frac{\hbar^2}{m\beta L}\right) + O\left(\frac{1}{N}\right), \quad (3.2.35)$$

que tende a 1 no TDL, confirmando a universalidade expressa na equação (3.1.2).

3.2.2 Duas δ -Dirac confinadas

Agora, vamos tomar duas δ 's confinadas por duas barreiras infinitas. O potencial tem a forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{para } |x| \geq L/2, \\ -\beta\delta(x-x_0) - \beta\delta(x+x_0) & \text{para } |x| < L/2, \end{cases} \quad (3.2.36)$$

e a função de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{-ikx} + B_1 e^{ikx} & \text{para } x \leq -x_0, \\ \psi_2(x) = A_2 e^{-ikx} + B_2 e^{ikx} & \text{para } -x_0 < x < x_0, \\ \psi_3(x) = A_3 e^{-ikx} + B_3 e^{ikx} & \text{para } x \geq x_0. \end{cases} \quad (3.2.37)$$

O potencial é simétrico, portanto, $\psi(x)$ será uma função par ou ímpar. Para $\psi(x)$ par, i.e., $\psi(x) = \psi(-x)$, teremos que $A_1 = B_3$, $B_1 = A_3$ e $A_2 = B_2$. Pela continuidade da função de onda,

$$\psi_1(-x_0) = \psi_2(-x_0) \Rightarrow B_1 e^{-ikx_0} + A_1 e^{ikx_0} = A_2 e^{-ikx_0} + A_2 e^{ikx_0}, \quad (3.2.38)$$

e pela descontinuidade (3.2.6) da derivada de $\psi(x)$, vem que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} = [-ikB_1e^{-ikx_0} + ikA_1e^{ikx_0} + ikA_2e^{-ikx_0} - ikA_2e^{ikx_0}] = \beta(B_1e^{-ikx_0} + A_1e^{ikx_0}). \quad (3.2.39)$$

Aplicando a condição de contorno $\psi(x = L/2) = 0$ encontra-se $B_1 = -A_1e^{ikL}$. Substituindo este resultado em (3.2.38), segue que:

$$A_1(e^{ikx_0} - e^{-ikx_0 - ikL}) = A_2[e^{-ikx_0} + e^{ikx_0}] = 2A_2 \cos(kx_0). \quad (3.2.40)$$

Utilizando (3.2.40) em (3.2.39) chega-se na expressão

$$\frac{ik\hbar^2}{2m} \left[\frac{2A_2 \cos(kx_0) (e^{ikx_0} + e^{-ikx_0 + ikL})}{e^{ikL - ikx_0} - e^{ikx_0}} + 2iA_2 \sin(kx_0) \right] = 2\beta A_2 \cos(kx_0), \quad (3.2.41)$$

que com algum algebrismo resulta em

$$\frac{\hbar^2}{m\beta L} = \cos^2\left(\frac{2Zx_0}{L}\right) \frac{\tan(Z)}{Z} - \frac{\sin\left(\frac{2Zx_0}{L}\right) \cos\left(\frac{2Zx_0}{L}\right)}{Z}, \quad (3.2.42)$$

com $Z = KL/2$. Para $L \rightarrow \infty$, a equação (3.2.42) se reduz a

$$\frac{\tan(Z)}{Z} \rightarrow 0, \quad (3.2.43)$$

que tem solução para $Z = n\pi$. Assim, L grande e finito, o espectro de energia das autofunções pares fica como

$$\tilde{E}_n = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + O\left(\frac{\hbar^4 n^2}{m^2 \beta L^3}\right) + O\left(\frac{2x_0 \hbar^2 n^2}{mL^3}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.44)$$

Já para as autofunções ímpares $\psi(-x) = -\psi(x)$, temos que

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{-ikx} + B_1 e^{ikx} & \text{para } x \leq -x_0, \\ \psi_2(x) = 2iB_2 \sin(kx) & \text{para } -x_0 < x < x_0, \\ \psi_3(x) = -A_1 e^{ikx} - B_1 e^{-ikx} & \text{para } x \geq x_0 \end{cases} \quad (3.2.45)$$

A continuidade da função de onda em $x = x_0$, garante

$$\psi_1(-x_0) = \psi_2(-x_0) \Rightarrow -B_1 e^{-ikx_0} - A_1 e^{ikx_0} = 2iB_2 \sin(kx_0), \quad (3.2.46)$$

e a descontinuidade da derivada de $\psi(x)$ resulta em

$$-\frac{\hbar^2}{2m} = [-ikB_1e^{-ikx_0} - ikA_1e^{ikx_0} - 2ikB_2 \cos(kx_0)] = -\beta(B_1e^{-ikx_0} + A_1e^{ikx_0}). \quad (3.2.47)$$

Aplicando a condição de contorno $\psi(x = L/2) = 0$ encontra-se $B_1 = -A_1e^{ikL}$. Substituindo B_1 em (3.2.47), segue

$$-\frac{ik\hbar^2}{2m}[-A_1e^{ikL-ikx_0} - A_1e^{ikx_0} - 2B_2 \cos(kx_0)] = \beta[e^{ikL-ikx_0} - e^{ikx_0}], \quad (3.2.48)$$

que com algum algebrismo resulta em

$$\frac{\hbar^2 k}{2m\beta} \tan\left(\frac{kL}{2}\right) [\sin(kx_0) + \cos^2(kx_0)] = \tan\left(\frac{kL}{2}\right) [\cos(kx_0) - \sin(kx_0)]. \quad (3.2.49)$$

A equação (3.2.49) tem solução padrão para $\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = 0 \Rightarrow kL = (2n)\pi$, o que gera o mesmo espectro de energia da barreira potencial infinita com $V = 0$:

$$\tilde{E}_n = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.50)$$

Possivelmente a equação (3.2.49) tem solução para $\frac{\hbar^2 k}{2m\beta} [\sin(kx_0) + \cos^2(kx_0)] = [\cos(kx_0) - \sin(kx_0)]$; porém, esta solução, caso exista, não será periódica e não dependerá de L . Por (3.2.44) e (3.2.50), de modo análogo ao que foi feito na subseção anterior, a razão entre as energias será

$$\frac{\tilde{E}(N, L)}{E(N, L)} = \frac{8(N/2)^3}{N^3} + O\left(\frac{\hbar^2}{m\beta L}\right) + O\left(\frac{1}{N}\right), \quad (3.2.51)$$

que tende a 1 no TDL.

3.2.3 Modelo de Brinquedo

Acima foram apresentados exemplos de potenciais com $\alpha = 1$. Agora, vamos considerar um $\alpha > 0$ genérico do potencial $V(x)$ cuja integral diverge fracamente no TDL. O potencial para a caixa 1D de condições de contorno $\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0$, é dado por:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 = v_0 L^{-\alpha}, & x < 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases} \quad (3.2.52)$$

onde v_0 é uma constante positiva. Para L suficientemente grande, as autoenergias de todos os autoestados são $E_n > V_0 > 0$. Pela Teoria da Perturbação (ver Apêndice 8.1),

$$\tilde{E}_n = E_n + \langle n|V|n\rangle = E_n + \frac{v_0}{2L^\alpha}, \quad (3.2.53)$$

com $|n\rangle$ sendo os autoestados da Barreira Potencial Infinita, $\langle n|n\rangle = 1$, e a função de onda $\psi_n(x)$ simétrica na região $[-L/2, L/2]$. No TDL, conforme esperado, a equação (3.2.53) leva à (3.1.2).

3.2.4 Contra-Exemplo

Como contra-exemplo da equação (3.1.2), consideramos um potencial $V(x)$ com $\alpha = 0$ e cuja integral (3.1.1) escala como $O(L)$:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 = V_0 > 0, & x < 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (3.2.54)$$

As condições de contorno são tais que $\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0$. De forma análoga à subseção anterior, temos que as autoenergias de todos os autoestados, obedecem a relação

$$\tilde{E}_n = E_n + \langle n|V|n\rangle = E_n + \frac{V_0}{2}, \quad (3.2.55)$$

para $E > V_0 > 0$. É evidente que no TDL, a equação (3.2.55) não resulta em (3.1.2): $\tilde{E}(N, L)/E(N, L) \rightarrow 1 + 3mV_0/(\pi\hbar\rho)^2$. Já para $0 > E > V_0$, o número de autoestados numa barreira de profundidade V_0 e comprimento L é da ordem de $O(\sqrt{mV_0L^2/\hbar^2})$; isto significa que no TDL à $\rho = N/L$ constante, podemos acomodar N férmions nestes autoestados. Ainda mais, os N estados mais baixos podem ser aproximados por aqueles da Barreira Potencial Infinita com $V = 0$ e $L \rightarrow L/2$. Desta forma, é trivial ver que no TDL, a razão $\tilde{E}(N, L)/E(N, L) \rightarrow 4$.

3.3 Variáveis de Prüfer

Demonstramos explicitamente nas seções anteriores que a equação (3.1.2) é válida para um ou dois potenciais do tipo δ -Dirac (possivelmente,

tal resultado se sustenta para qualquer número de potenciais δ -Dirac). É conhecido que qualquer potencial V pode ser aproximado por uma soma conveniente de potenciais δ -Dirac; sendo assim, em princípio, poderíamos tentar uma derivação geral da (3.1.2) através dessa abordagem. No entanto, parece ser tecnicamente muito difícil generalizar a álgebra envolvida para um número qualquer de δ -Dirac. Nesse sentido, as variáveis de Prüfer [19], uma ferramenta matemática usada na Teoria de Sturm-Liouville, se fazem oportunas.

3.3.1 Caso Unidimensional

Considere os seguintes problemas de autovalores:

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = k^2u, \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (3.3.1)$$

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + \mathcal{V}u = \tilde{k}^2u. \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (3.3.2)$$

onde $\mathcal{V} = (2m/\hbar^2)V$. Supomos que o potencial \mathcal{V} é uma função definida em trechos através de uma região compacta de uma caixa $[0, L]$ de paredes rígidas. Buscamos por autovalores da energia positivos, k e \tilde{k} são reais, com $E = \hbar^2k^2/2m$ e $\tilde{E} = \hbar^2\tilde{k}^2/2m$. A equação (3.3.1) fornece os resultados $k = \frac{n\pi}{L}$ da Barreira Potencial Infinita, enquanto que para a equação (3.3.2) introduzimos as variáveis de Prüfer ρ e θ [20]:

$$u(x) = \rho(x) \sin(\theta(x)), \quad (3.3.3)$$

$$u'(x) = \tilde{k} \rho(x) \cos(\theta(x)). \quad (3.3.4)$$

A motivação da escolha dessas variáveis se dá na garantia de que para $\mathcal{V} \rightarrow 0$, a variável ρ torna-se constante com $\theta = kx$ e $\tilde{k} \rightarrow n\pi/L$. Por outro lado, com $\mathcal{V} \neq 0$, ρ não é constante, $\tilde{k} \neq n\pi/L$, e geralmente, $\delta = \theta(x) - \tilde{k}x$, sendo o deslocamento de fase. Pelas equações (3.3.3) e (3.3.4), nota-se que a (3.3.2) é equivalente ao seguinte sistema de EDO de primeira ordem:

$$\rho' = \frac{1}{\tilde{k}} \mathcal{V}(x) \sin(\theta(x)) \cos(\theta(x)) \rho(x), \quad \rho(x) > 0, \quad (3.3.5)$$

$$\theta' = \tilde{k} - \frac{1}{\tilde{k}} \mathcal{V}(x) \sin^2(\theta(x)), \quad \theta(0) = 0, \quad \sin(\theta(L)) = 0. \quad (3.3.6)$$

Integrando a equação (3.3.6) entre $r = 0$ e $r = L$ e usando a condição de contorno $\theta(L) = n\pi = k_n L$, obtemos

$$\tilde{k}_n = k_n + \frac{1}{L\tilde{k}_n} \int_0^L dx \mathcal{V}(x) \sin^2(\theta_n(x)) = k_n + \frac{\delta_n(x)}{L}. \quad (3.3.7)$$

O segundo termo do lado direito de (3.3.7) é o deslocamento de fase.

Reescrevendo a equação (3.3.7) como uma equação dos autovalores da energia \tilde{E}_n em função de E_n , multiplicando então o resultado por \tilde{k}_n e elevando ao quadrado, obtemos

$$\tilde{E}_n^2 - (E_n + 2b)\tilde{E}_n + b^2 = 0, \quad (3.3.8)$$

onde

$$b = \frac{1}{L} \int_0^L \mathcal{V}(x) \sin^2(\theta_n(x)) dx. \quad (3.3.9)$$

As raízes de (3.3.8) são:

$$\tilde{E}_n = \frac{1}{2}E_n + b \pm \frac{1}{2}\sqrt{E_n^2 + b^2(4E_n/b)}. \quad (3.3.10)$$

O último termo da raiz quadrada de (3.3.10) pode ser desconsiderado a menos de um número de baixo nível de energia que escala como $O(L^{D(1-\alpha/2)})$. Escolhendo a raiz consistente com $\mathcal{V} \rightarrow 0$ chega-se a

$$\tilde{E}_n = E_n + O\left(\frac{1}{L^\alpha}\right), \quad (3.3.11)$$

que no TDL leva a

$$\tilde{E}(N, L)/N = E(N, L)/N, \quad (3.3.12)$$

confirmando assim a equação (3.1.2).

3.3.2 Caso Tridimensional

Em três dimensões, o potencial $\mathcal{V}(r)$ tem simetria esférica, as coordenadas, portanto, são esféricas, bem como as condições de contorno. A parte radial da equação de Schrödinger 3D entre $r = 0$ e $r = L$, escrita em termos da função $u(r) = rR(r)$, analogamente ao que foi feito na subseção anterior (com acréscimo da contribuição centrífuga), é

$$-\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{l(l+1)u}{r^2} = k^2u, \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (3.3.13)$$

$$-\frac{d^2u}{dr^2} + \mathcal{V}u + \frac{l(l+1)u}{r^2} = \tilde{k}^2u, \quad u(0) = u(L) = 0. \quad (3.3.14)$$

Buscamos por autovalores positivos das energias $E = \hbar^2k^2/2m$ e $\tilde{E} = \hbar^2\tilde{k}^2/2m$. As soluções da equação (3.3.13) são dadas pela função de Bessel $u = A_{jl}(kr)$ e as condições de contorno, nesse caso, são diferentes de $n\pi/L$. No entanto, nós podemos proceder assim como em $D = 1$ e adaptar as variáveis de Prüfer para o caso $3D$. Ao compararmos as equações (3.3.13) e (3.3.14) com as equações (3.3.1) e (3.3.2), notamos que não se pode repetir o argumento do caso $D = 1$ com a substituição de \mathcal{V} por $\mathcal{V} + l(l+1)/r^2$, visto que o termo centrífugo produz uma integral divergente. Todavia, podemos integrar o análogo de (3.3.6) entre um $\epsilon > 0$ fixo e L , e ao final levar ϵ para zero satisfazendo a condição de contorno $\theta(0) = 0$. Teremos, portanto, duas equações: uma com θ que se refere ao caso $\mathcal{V} = 0$, e outra com $\tilde{\theta}$ que se refere ao caso $\mathcal{V} \neq 0$. Procedendo,

$$n\pi - \theta_n(\epsilon) = k_n(L - \epsilon) - \frac{1}{k_n} \int_{\epsilon}^L dr \frac{l(l+1)}{r^2} \sin^2(\theta_n(r)), \quad (3.3.15)$$

$$n\pi - \tilde{\theta}_n(\epsilon) = \tilde{k}_n(L - \epsilon) - \frac{1}{\tilde{k}_n} \int_{\epsilon}^L dr \left[\mathcal{V}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \sin^2(\tilde{\theta}_n(r)) \right]. \quad (3.3.16)$$

Subtraindo (3.3.15) de (3.3.16), chegamos a

$$\begin{aligned} \tilde{k}_n &= k_n + \frac{1}{(L - \epsilon)\tilde{k}_n} \int_{\epsilon}^L dr \left[\mathcal{V}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \sin^2(\tilde{\theta}_n(r)) + \\ &- \frac{1}{(L - \epsilon)k_n} \int_{\epsilon}^L dr \frac{l(l+1)}{r^2} \sin^2(\theta_n(r)) + \frac{\theta_n(\epsilon) - \tilde{\theta}_n(\epsilon)}{L - \epsilon}, \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

que com a escolha conveniente $\epsilon(L) \rightarrow 0$ para $L \rightarrow \infty$, de modo análogo ao caso $1D$, levará a $\tilde{E}(N, L)/N = E(N, L)/N$ no TDL.

3.3.3 Caso Bidimensional

Em duas dimensões, o problema é descrito em coordenadas polares, com condições de contorno circulares e um potencial simétrico $\mathcal{V} = \mathcal{V}(r)$. Nesse caso, a parte radial da equação de Schrödinger é

$$-\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} + \frac{m^2u}{r^2} = k^2u, \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (3.3.18)$$

$$-\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} + \frac{m^2u}{r^2} + \mathcal{V}u = \tilde{k}^2u, \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (3.3.19)$$

onde m se refere ao número quântico do momento angular. Diferentemente do caso $1D$ e $3D$, a condição de contorno em $u(r=0)$, não necessariamente precisa ser zero. No entanto, por simplicidade e conformidade com os casos anteriores, tomamos $u(r=0) = 0$. Note também que no caso $2D$ há uma derivada de primeira ordem em u ; porém, isso não impede que usemos as variáveis de Prüfer de acordo com (3.3.3) e (3.3.4). Ao aplicá-las em (3.3.18) e (3.3.19) (note que as variáveis ρ e θ se referem ao caso $\mathcal{V} = 0$, enquanto que para $\mathcal{V} \neq 0$ usamos a notação $\tilde{\rho}$ e $\tilde{\theta}$),

$$\tilde{\rho}' = \left(\frac{1}{\tilde{k}} \mathcal{V}(r) \sin(\tilde{\theta}(r)) \cos(\tilde{\theta}(r)) + \frac{m^2 \sin(\tilde{\theta}(r))}{\cos(\tilde{\theta}(r))} k r^2 + \frac{\cos^2(\tilde{\theta}(r))}{r} \right) \tilde{\rho}(r), \quad (3.3.20)$$

$$\tilde{\theta}' = \tilde{k} - \frac{1}{\tilde{k}} \mathcal{V}(r) \sin^2(\tilde{\theta}(r)) - \frac{m^2 \sin^2(\tilde{\theta}(r))}{k r^2} - \frac{\sin(\tilde{\theta}(r)) \cos(\tilde{\theta}(r))}{r}, \quad (3.3.21)$$

com condições de contorno análogas de (3.3.5) e (3.3.6). Fazendo o mesmo procedimento da subseção anterior, integrando (3.3.21) para o caso $\mathcal{V} = 0$ e $\mathcal{V} \neq 0$, e depois subtraindo um do outro, obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{k}_n &= k_n + \frac{1}{(L-\epsilon)\tilde{k}_n} \int_{\epsilon}^L dr \mathcal{V}(r) \sin^2(\tilde{\theta}_n(r)) + \\ &+ \frac{m^2}{(L-\epsilon)\tilde{k}_n} \int_{\epsilon}^L dr \frac{1}{r^2} \left[\sin^2(\tilde{\theta}_n(r)) - \frac{\tilde{k}_n}{k_n} \sin^2(\theta_n(r)) \right] + \frac{\theta_n(\epsilon) - \tilde{\theta}_n(\epsilon)}{L-\epsilon} + \\ &+ \frac{1}{L-\epsilon} \int_{\epsilon}^L dr \frac{1}{r} [\sin(\tilde{\theta}_n(r)) \cos(\tilde{\theta}_n(r)) - \sin(\theta_n(r)) \cos(\theta_n(r))]. \end{aligned} \quad (3.3.22)$$

Escolhendo apropriadamente $\epsilon(L) = d/L^{1-\delta}$ com d constante e $1 > \delta > 0$, temos no TDL a mesma conclusão das seções anteriores, $\tilde{E}(N, L)/N = E(N, L)/N$.

4 Deslocamento de fase

Aqui calculamos explicitamente o deslocamento de fase para o caso $D = 1$ do capítulo 2.

4.1 Teorema de Fumi

O deslocamento da energia do estado fundamental provocado pela introdução do potencial do tipo $\beta\delta(x)$ pode ser calculado. Para isso, devemos tomar a diferença entre (2.2.6) e (2.2.3):

$$\tilde{E}(N, L) - E(N, L) = \frac{\hbar^2}{mL^2} \sum_{n=1}^N n\pi\delta_n, \quad (4.1.1)$$

onde desprezamos o termo δ_n^2 pois $\delta_n^2 \ll n\pi|\delta_n|$. Ainda, por (2.2.2), $\Delta E_n = E_n - E_{n-1} = (\hbar^2/2m)(2n-1)\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$, nos mostra que para L grande e n pequeno, o termo $-(\pi/L)^2$ é desprezível; de modo que, nessa configuração, $\Delta E_n \approx (\hbar^2/2m)(2n)\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$. Assim, reescrevemos (4.1.1) como

$$\tilde{E}(N, L) - E(N, L) = \frac{\hbar^2}{m\pi} \sum_{n=1}^N n \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \delta_n = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \Delta E_n \delta_n, \quad (4.1.2)$$

que no limite $N, L \rightarrow \infty$, é uma integral na energia da partícula livre até a energia de Fermi,

$$\tilde{E}(N, L) - E(N, L) = \lim_{N, L \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_0^{\epsilon_F} dE \delta(E), \quad (4.1.3)$$

e relaciona o deslocamento de fase (aka *phase-shift*) com o deslocamento de energia (aka *energy-shift*): derivar (4.1.3) em relação à energia de Fermi, faz com que o deslocamento de fase seja escrito em função do deslocamento de energia. Este resultado é o Teorema de Fumi para uma impureza imóvel que interage com interações de contato num gás de Fermi à temperatura nula [21]. A equação (4.1.3) é geral e independe da geometria ou da condição de contorno [22].

4.1.1 Caso Unidimensional Simétrico

Para calcular o deslocamento de fase δ_n em $D = 1$, vamos considerar a Barreira Potencial Infinita numa caixa $[-L/2, L/2]$ perturbada pelo potencial $V = \beta\delta(x)$. Desde que limitamos a discussão às ondas com momento angular nulo, a respectiva função de onda ψ_n , solução da equação de Schrödinger, com a condição de ser nula em $|x| \geq L/2$, é dividida nas famílias de soluções pares e ímpares, cf visto na subseção 3.2.1. As soluções ímpares são

$$\psi_{n\text{ímpar}}(x) = A \sin(\tilde{k}_n x). \quad (4.1.4)$$

Ao compararmos a solução exata (4.1.4) com a solução (2.2.4) adaptada ao caso unidimensional simétrico com potencial confinado do tipo δ -Dirac, notamos que (4.1.4) pode ser escrita também por

$$\psi_{n\text{ímpar}}(x) = A \sin(\tilde{k}_n x - \delta_n), \quad (4.1.5)$$

onde identificamos para as soluções ímpares

$$\delta_n = 0. \quad (4.1.6)$$

Já para as soluções pares perturbadas, dividimos a função de onda em duas regiões, a região (I) e a região (II), usando (3.2.13) e as soluções (3.2.9) e (3.2.10):

$$\psi_{n\text{par}}(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A \sin(\tilde{k}_n x) + A \tan(\tilde{k}L/2) \cos(\tilde{k}_n x) & \text{para } -L/2 < x < 0, \\ \psi_{II}(x) = -A \sin(\tilde{k}_n x) + A \tan(\tilde{k}L/2) \cos(\tilde{k}_n x) & \text{para } 0 < x < L/2. \end{cases} \quad (4.1.7)$$

Sabendo que $L \rightarrow \infty \Rightarrow z = \tilde{k}_n L/2 = n\pi$ (veja a equação (3.2.14)) e ao compararmos no TDL tanto a solução exata (4.1.7) quanto a correspondente solução par de (2.2.4) adaptada ao caso unidimensional simétrico com potencial confinado do tipo δ -Dirac, notamos que (4.1.7) pode ser escrita por

$$\psi_{n\text{par}}(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A \cos(\tilde{k}_n x - \delta_n) & \text{para } -L/2 < x < 0, \\ \psi_{II}(x) = A \cos(\tilde{k}_n x + \delta_n) & \text{para } 0 < x < L/2. \end{cases} \quad (4.1.8)$$

onde identificamos para as soluções pares

$$|\delta_n| = \pi/2. \quad (4.1.9)$$

Fora do TDL, o deslocamento de fase δ_n das soluções pares obtido pela comparação de (4.1.8) com (4.1.7), não é bem definido.

Agora, tomando a diferença entre (3.2.34) e (3.2.33), o Teorema de Fumi fornece para a energia de fermi $\epsilon_f = \frac{N^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$, no TDL, que

$$\frac{d}{d\epsilon_f} \left[\lim_{N,L \rightarrow \infty, (N/L^D)=\rho} (\tilde{E}(N,L) - E(N,L)) \right] = \frac{d}{d\epsilon_f} \left(\frac{1}{2} \epsilon_f \right) = \frac{1}{\pi} \delta_n, \quad (4.1.10)$$

assim,

$$|\delta_n| = \pi/2, \quad (4.1.11)$$

confirmando (4.1.9).

5 Transição de Fase Quântica

Neste capítulo, apresentamos um mecanismo que identifica a Transição de Fase Quântica de Primeira Ordem, abordagem desenvolvida por M. Ostilli e C. Presilla na Ref. [16].

5.1 Fundamentação Teórica

As transições de fase são fenômenos que ganharam notável interesse na física da matéria condensada por descrever como mudanças qualitativas nas propriedades dos sistemas físicos podem ocorrer quando parâmetros tais como a temperatura ou pressão são variados. Exemplos de transições de fases são vistos no nosso dia a dia desde o derretimento ou desmagnetização de um metal à vaporização da água. Em termos matemáticos, as transições de fase estão relacionadas com singularidades nas derivadas da energia livre de um sistema no limite termodinâmico [23].

Pela classificação de Ehrenfest, as transições de fase podem ser divididas em duas categorias: as transições de primeira ordem (first-order phase transitions) ou de segunda ordem (second-order phase transitions) [24]. As transições de primeira ordem apresentam uma descontinuidade, ou singularidade, na primeira derivada da energia livre em relação a alguma variável termodinâmica; enquanto que as transições de segunda ordem apresentam descontinuidade na segunda derivada da energia livre. As transições de fase também são classificadas em Transição de Fase Clássica (Classical Phase Transition ou CPT) ou Transição de Fase Quântica.

Enquanto as CPTs ocorrem variando a temperatura e por uma competição entre minimização de energia e maximização da entropia (que normalmente corresponde a uma competição entre ordem e desordem); as QPTs ocorrem variando um ou mais parâmetros hamiltonianos e se realizam através de uma competição entre diferentes estados fundamentais (cada um possuindo diferentes propriedades qualitativas). Os pontos não-analíticos da densidade de energia do estado fundamental de um sistema

são referidos como *pontos críticos* e definem a QPT.

A abordagem chamada *fidelidade* identifica QPTs através do overlap de dois estados fundamentais com parâmetros do hamiltoniano ligeiramente diferentes ao redor do suposto ponto crítico [3]. Surge, então, a questão: já que as QPTs são identificadas através da mudança abrupta do estado fundamental, o overlap nulo de dois estados fundamentais de um sistema, com parâmetros muito próximos, pode ser entendido como uma QPT? Como medida de distância, a fidelidade descreve a proximidade de dois estados quânticos e pode ser usada para caracterizar as mudanças drásticas que os estados fundamentais sofrem numa QPT [4]; ela tem sido empregada na investigação de transições de fase de primeira ou segunda ordem [25], em transições de fase de temperatura finita [26] e transições de fase fora do equilíbrio [27]. Em [28] é apontado que esta fenomenologia lembra fortemente a AOC.

No limite termodinâmico de uma QPT, dois estados fundamentais tomados em dois pontos próximos do espaço dos parâmetros do hamiltoniano do sistema, se tornam mutuamente ortogonais. Por exemplo, em [16] é mostrado como um sistema de férmions em uma treliça, é capaz de sofrer QPTs de primeira ordem com o overlap entre os estados fundamentais das duas fases tendendo a zero no TDL. A seguir vamos apresentar os princípios deste mecanismo.

5.1.1 Transição de Fase Quântica de Primeira Ordem

Considere uma hamiltoniana $H(g)$ definida sobre uma treliça de N sítios com N_p partículas (cuja razão $\frac{N_p}{N} = \rho$) e que varia como função do acoplamento adimensional positivo g :

$$H(g) = H_0 + gV, \quad (5.1.1)$$

onde H_0 e V são operadores que não comutam. O operador V do sistema em questão, tem um conjunto ortonormal completo de autovetores $|n\rangle$ tal que

$$V |n\rangle = V_n |n\rangle, \quad (5.1.2)$$

com $n = 1, \dots, M$ e valores ordenados do potencial $V_1 \leq V_2 \leq \dots \leq V_M$; o espaço de Hilbert \mathbb{F} em que $H(g)$ atua, é decomposto numa soma direta de dois subespaços vetoriais de \mathbb{F} , isto é,

$$\mathbb{F} = \mathbb{F}_{cond} \oplus \mathbb{F}_{norm}, \quad (5.1.3)$$

onde $\mathbb{F} = \text{span} \{|n\rangle\}_{n=1}^M$, $\mathbb{F}_{cond} = \text{span} \{|n\rangle\}_{n=1}^{M_{cond}}$ e $\mathbb{F}_{norm} = \text{span} \{|n\rangle\}_{n=M_{cond}+1}^M$. A dimensão M_{cond} é a degenerescência do valor mínimo do potencial V . O espaço completo dos estados é definido de tal forma que $\mathbb{F}_{norm} = \mathbb{F}_{cond}^\perp$, com \mathbb{F}_{cond} sendo o espaço dos autoestados de V com autovalor mínimo. Qualquer autovetor $|u\rangle$ que pertence ao espaço \mathbb{F} pode ser decomposto numa parte condensada e normal que pertencem, respectivamente, a \mathbb{F}_{cond} e \mathbb{F}_{norm} : $|u\rangle = |u\rangle_{cond} + |u\rangle_{norm}$.

Como o objetivo é estudar QPTs, o sistema é posto à temperatura nula; dessa forma, o sistema coincide com o estado fundamental de H . Definimos as energias dos estados fundamentais de cada um dos três espaços como se segue:

$$E = \inf_{|u\rangle \in \mathbb{F}} \frac{\langle u|H|u\rangle}{\langle u|u\rangle}, \quad (5.1.4)$$

$$E_{cond} = \inf_{|u\rangle \in \mathbb{F}_{cond}} \frac{\langle u|H|u\rangle}{\langle u|u\rangle}, \quad (5.1.5)$$

$$E_{norm} = \inf_{|u\rangle \in \mathbb{F}_{norm}} \frac{\langle u|H|u\rangle}{\langle u|u\rangle}. \quad (5.1.6)$$

A energia E do estado fundamental, e as energias E_{cond} e E_{norm} , divergem linearmente no limite termodinâmico $N, N_p \rightarrow \infty$, entretanto, ficam finitas quando divididas por N_p e dependem de ρ e g neste mesmo limite [16]:

$$\lim_{N, N_p \rightarrow \infty, N_p/N = \rho} \frac{E(N, N_p)}{N_p} = \epsilon(\rho, g), \quad (5.1.7)$$

$$\lim_{N, N_p \rightarrow \infty, N_p/N = \rho} \frac{E_{cond}(N, N_p)}{N_p} = \epsilon_{cond}(\rho, g), \quad (5.1.8)$$

$$\lim_{N, N_p \rightarrow \infty, N_p/N = \rho} \frac{E_{cond}^\perp(N, N_p)}{N_p} = \epsilon_{norm}(\rho, g). \quad (5.1.9)$$

Além disso, assumindo a condição de que $M_{cond}/M \rightarrow 0$ no limite termodinâmico e que os autovalores H_0 e V escalam linearmente com N_p , então

$$\epsilon(\rho, g) = \min \{ \epsilon_{cond}(\rho, g), \epsilon_{norm}(\rho, g) \}. \quad (5.1.10)$$

A demonstração de (5.1.10) consiste em provar dois passos: (i) $\epsilon \leq \min \{ \epsilon_{norm}, \epsilon_{cond} \}$ (trivial) e (ii) $\epsilon \geq \min \{ \epsilon_{norm}, \epsilon_{cond} \}$ (não trivial) [16]. A equação (5.1.10) estabelece a possibilidade de uma QPT entre duas fases denominadas fase condensada e fase normal, caracterizadas respectivamente pelas energias (5.1.8) e (5.1.9), que quando iguais, definem a superfície de coexistência pela equação:

$$\epsilon_{cond}(\rho, g) = \epsilon_{norm}(\rho, g). \quad (5.1.11)$$

As QPTs de primeira ordem ocorrem à temperatura nula no TDL, quando um parâmetro (ou mais de um), digamos um parâmetro g , assume um valor crítico g_c . No ponto crítico, $g = g_c$, as energias das duas fases coexistentes (a fase associada com $g < g_c$ e da fase associada com $g > g_c$), se igualam; enquanto que os correspondentes estados fundamentais ficam ortogonais. Note que a hamiltoniana $H(g)$ depende de um único parâmetro, e portanto, a solução da equação (5.1.11) pode representar uma QPT de primeira ordem com ponto crítico $g = g_c$, onde os autovalores da energia do estado fundamental do sistema na fase condensada e na fase normal, em função de g , se cruzam. A decomposição do espaço \mathbb{F} dos estados, torna possível a condensação do estado fundamental em \mathbb{F}_{cond} . A palavra *condensação* quer dizer que, na fase condensada, devido a condição $M_{cond}/M \rightarrow 0$, o estado fundamental ocupa uma parte infinitesimal do espaço \mathbb{F} .

5.1.2 Modelo de Grover

Para exemplificar o papel e a validade das equações (5.1.10) e (5.1.11), tomemos o modelo de Grover de N spins cuja hamiltoniana é dada por:

$$H = - \sum_{i=1}^N \sigma_i^x - gN \bigotimes_{i=1}^N \frac{1 - \sigma_i^z}{2}, \quad (5.1.12)$$

com σ_i^x e σ_i^z sendo as matrizes de Pauli, e a dimensão M do espaço $\mathbb{F} = \text{span} \{ |s_1\rangle \otimes \dots \otimes |s_n\rangle \}$ dos estados é igual à 2^N , onde $|s_i\rangle$ são os autoestados de σ_i^z . Todos os sítios são ocupados por uma partícula, o que significa

que $N_p = N$. A hamiltoniana (5.1.12) tem a mesma forma de (5.1.1) com $H_0 = -\sum_{i=1}^N \sigma_i^x$ e $V = -N \otimes_{i=1}^N \frac{1-\sigma_i^z}{2}$. Note que o valor mínimo do potencial V é $-N$ e corresponde ao autoestado $|1\rangle = |s_1 = -1\rangle \otimes \dots \otimes |s_N = -1\rangle$. Considerando que $M_{cond.}$ é a degenerescência do autoestado de V com autovalor mínimo, tem-se que $M_{cond.} = 1$ e, conseqüentemente, $\mathbb{F}_{cond.} = span\{|1\rangle\}$. Usando (5.1.8), temos que $E_{cond.} = -gN$ com $\epsilon_{cond.} = -g$. Apenas os autoestados do primeiro termo de (5.1.12) correspondem aos autovalores da energia $E_{norm.}$ da fase normal relativa ao espaço $\mathbb{F}_{norm.}$; logo, $E_{norm.}$ não depende de g . Assim, usando (5.1.9),

$$\epsilon_{norm.} = \lim_{N \rightarrow \infty} E(g=0)/N = -1. \quad (5.1.13)$$

Conforme os resultados obtidos acima, a energia por partícula ϵ assume os valores [7]

$$\epsilon = \begin{cases} -1, & g < 1 \\ -g, & g \geq 1 \end{cases}. \quad (5.1.14)$$

A Figura 2 mostra que, no limite termodinâmico, a energia $\epsilon(g)$ tem uma

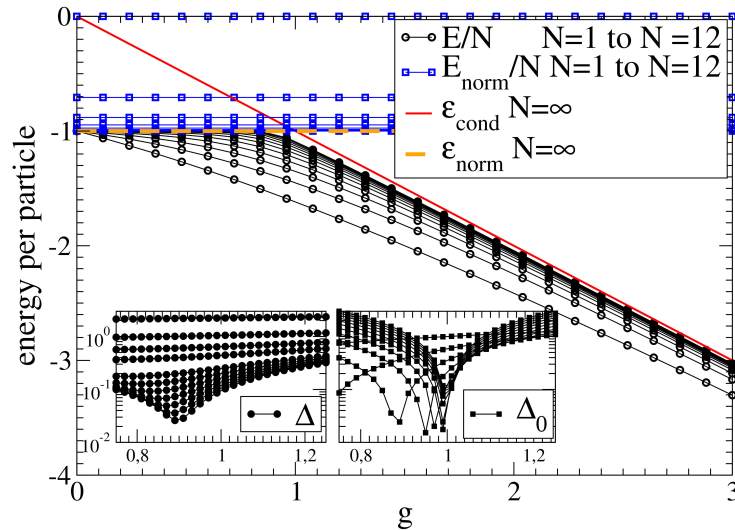


Figura 2 – Energia por partícula ϵ obtida por Diagonalizações Numéricas em função de g para o modelo de (5.1.12)

descontinuidade (ou ponto crítico g_c) na primeira derivada para $g_c = 1$. Isso confirma (5.1.14).

Pela abordagem da fidelidade, o overlap entre dois estados fundamentais próximos do ponto crítico, entre $g < g_c$ e $g + \delta g > g_c$, sendo δg pequeno e fixo, é mínimo e possivelmente zero. Na construção do espaço \mathbb{F}

com $\mathbb{F}_{norm.} = \mathbb{F}_{cond.}^\perp$, o overlap entre o estado fundamental de $\mathbb{F}_{norm.}$ e o estado fundamental de $\mathbb{F}_{cond.}$, é zero independente do tamanho do sistema: $\langle E_{norm.} | E_{cond.} \rangle = 0$. Além disso, as equações (5.1.10) e (5.1.14) dizem que, no limite termodinâmico, o estado fundamental do sistema é $|E_{norm.}\rangle$ ou $|E_{cond.}\rangle$, para $g < g_c$ ou $g > g_c$, respectivamente. No limite termodinâmico, as energias por partícula $\epsilon_{norm.}$ e $\epsilon_{cond.}$ coincidem no ponto crítico, e o overlap $\langle E_{norm.} | E_{cond.} \rangle$ neste mesmo ponto, deverá ser zero. Em outras palavras, o mecanismo é compatível com a abordagem da fidelidade que identifica QPTs de primeira ordem através do overlap dos estados fundamentais no ponto crítico do sistema. O mínimo da equação

$$\Delta_0 = |E_{cond.} - E_{norm.}|, \quad (5.1.15)$$

permite localizar o ponto crítico do sistema para N, N_p suficientemente grande.

É interessante também mencionar que em [29], as energias por partícula no limite termodinâmico da AOC para o sistema original e para o sistema perturbado por um potencial vetor, são iguais. À vista disto, caso estas energias possam ser identificadas como energias de duas respectivas fases de um sistema, a equação (5.1.11) é satisfeita em [29]. Ademais, como visto, a condição $M_{cond.}/M \rightarrow 0$, possibilita a ocorrência de uma QPT no modelo (5.1.12), e exerce um papel paralelo à ortogonalidade alcançada pela diluição de uma impureza (um átomo da treliça substituído por um átomo impuro, por exemplo) no limite termodinâmico da AOC.

6 Conexão entre AOC e QPT

Neste capítulo, procuramos elucidar as analogias entre a Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson e as Transições de Fase Quânticas (QPT).

6.1 Descrição

Nas seções anteriores, nós demonstramos que a energia do estado fundamental de sistemas fermiônicos não-interagentes no TDL, é universal, ou seja, ela não depende do potencial aplicado V , desde que o potencial decaia rapidamente com a distância. Escrevemos a equação de Schrödinger para uma partícula, tanto na presença do potencial, quanto na ausência dele, e usamos as variáveis de Prüfer para calcular a desigualdade entre as energias E_n e \tilde{E}_n . Para uma caixa finita de volume L^D , encontramos que $\tilde{E}_n = E_n + O\left(\frac{1}{L^\alpha}\right)$ com α positivo representando o decaimento do potencial V . Ora, esse resultado demonstra imediatamente a igualdade no TDL (mantendo N/L fixo) das energias por partícula do estado fundamental dos sistemas com V e sem V , isto é, $\tilde{E}(N, L)/N \approx E(N, L)/N$. Por outro lado, na AOC, o overlap do estado fundamental de dois sistemas fermiônicos não-interagentes, definidos nas mesmas condições descritas acima, decai como [30]

$$|\langle E(N, L) | \tilde{E}(N, L) \rangle|^2 \simeq L^{-\gamma}, \quad (6.1.1)$$

onde γ é uma constante de decaimento proporcional ao quadrado do seno do deslocamento de fase que vimos em (2.2.29). A equação (6.1.1) implica que os dois estados fundamentais se tornam ortogonais no TDL, enquanto que suas respectivas densidades de energia, de acordo com (3.1.2), ficam iguais; isto encontra um análogo com as QPTs de primeira ordem exemplificadas no capítulo anterior. No TDL, a analogia AOC-QPT se fundamenta pela (i) ortogonalidade dos estados fundamentais, (ii) a universalidade do expoente γ , (iii) a igualdade da energia por partícula do estado fundamental, (iv) a quebra de simetria, e (v) o parâmetro de ordem. Na tabela abaixo, há uma esquematização das similaridades entre a AOC e QPT.

Tabela 1 – Similaridades entre a AOC e a QPT de Primeira Ordem

No TDL	AOC (entre dois sistemas)	QPT (entre duas fases do mesmo sistema)
Ortogonalidade dos Estados Fundamentais	Sim (sempre)	Sim (no ponto crítico)
Universalidade dos Expoentes Característicos	Expoente de Anderson (sempre)	Expoentes Críticos (no ponto crítico)
Igualdade da Energia por Partícula do Estado Fundamental	Sim (sempre)	Sim (no ponto crítico)
Quebra de Simetria	?	Sim (no ponto crítico)
Parâmetro de Ordem	Fidelidade	Fidelidade

- (i) Na AOC, os estados fundamentais de dois sistemas fermiônicos não-interagentes que diferem apenas pela presença de um potencial de alcance limitado, ficam ortogonais no TDL. No ponto crítico de uma QPT de primeira ordem, os estados fundamentais de duas fases distintas do sistema também ficam ortogonais no TDL.
- (ii) Na vizinhança do ponto crítico da transição de fase de um sistema, fenômenos críticos descritos por leis de potência ocorrem. Os expoentes críticos que aparecem nestas leis de potência são universais (ou seja, dependem apenas das simetrias do hamiltoniano do sistema e não dos seus parâmetros) e descrevem a não-analiticidade ao ponto crítico da energia por partícula no TDL para um sistema à temperatura nula (isto é, nas QPTs de primeira ordem). Hamiltonianos diferentes que possuem simetrias iguais, tem os mesmos expoentes críticos, e conseqüentemente, estão sob a mesma classe de universalidade. A universalidade dos expoentes críticos das QPTs é um fato bem conhecido e a sua hipótese foi demonstrada usando o grupo de renormalização [31]. É plausível que os deslocamentos de fase satisfaçam um critério de universalidade análogo (ou talvez idêntico) ao dos expoentes críticos. Se assumirmos válida a universalidade dos deslocamentos de fase, então, o expoente de Anderson (γ nas AOCs) também seria universal entre sistemas que possuem as mesmas simetrias do hamiltoniano, pois, conforme a Eq. (2.2.29),

γ é determinado apenas pelo conjunto do deslocamento de fase e da dimensão física do sistema. De fato, no caso $D = 1$ estudado no capítulo 4, encontramos que o deslocamento de fase não dependia dos parâmetros do hamiltoniano.

- (iii) Diferentes sistemas físicos, mas que possuem a mesma simetria, podem ter propriedades críticas iguais. É dito que tais sistemas são universais. Por exemplo, no caso da AOC, a universalidade foi demonstrada no TDL para a energia por partícula do estado fundamental, com a condição de que o potencial seja simétrico, de alcance limitado, e que satisfaça a condição (3.1.1). Isto é, na AOC, a densidade das energias dos estados fundamentais de dois sistemas fermiônicos não-interagentes que diferem apenas pela presença de um potencial simétrico de alcance limitado, são sempre iguais no TDL. No ponto crítico de uma QPT de primeira ordem, as energias por partícula dos estados fundamentais de duas fases distintas do sistema, também são iguais no TDL; no entanto, em geral, não há universalidade da energia por partícula do estado fundamental nas QPTs, pois quando existe interação entre as partículas, o mecanismo da universalidade que estudamos no capítulo 3 não pode ser aplicado.
- (iv) Na AOC, o overlap de dois estados fundamentais ligeiramente diferentes por um potencial de alcance limitado, vai para zero no TDL; pelo critério da fidelidade, isto quer dizer que os dois estados fundamentais são totalmente distintos (poderia ser visto como uma quebra de simetria caso a AOC aconteça para dois estados fundamentais de um mesmo sistema? Veremos na subseção 6.2 um exemplo de AOC para um mesmo sistema). Na vizinhança do ponto crítico de uma QPT de primeira ordem, o overlap de dois estados fundamentais (cada um representando uma fase do sistema) com parâmetros ligeiramente diferentes, vai para zero; o que indica, segundo a fidelidade, uma quebra de simetria ou mudança de fase. Diferente das QPTs de primeira ordem em que a transição de fase acontece de maneira abrupta (descontínua) no ponto crítico da energia do estado fundamental; nas QPTs de segunda ordem, a mudança de fase

ocorre continuamente enquanto a energia do estado fundamental do sistema é variada. Dado que a fidelidade mede a similaridade entre dois estados quânticos, justifica-se então que para dois estados fundamentais com parâmetros ligeiramente diferentes ao redor do ponto crítico, a fidelidade deverá ser sempre nula em QPTs de primeira ordem e mínima em QPTs de segunda ordem [4].

- (v) A fidelidade F é definida pelo módulo do overlap de dois estados fundamentais ligeiramente diferentes: $F(g, g + \delta g) = |\langle \Psi(g) | \Psi(g + \delta g) \rangle|$. Para uma hamiltoniana do tipo $H(g) = H_0 + gV$, podemos reescrever pela teoria da perturbação, sua autofunção normalizada $|\Psi(g + \delta g)\rangle$ com correção até a segunda ordem:

$$|\Psi(g + \delta g)\rangle = |\Psi(g)\rangle - \frac{1}{2}\delta g^2 |\Psi(g)\rangle \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_n(g) | V | \Psi_0(g) \rangle|^2}{[E_n(g) - E_0(g)]^2} + \dots \quad (6.1.2)$$

Usando (6.1.2), a fidelidade é

$$F = \left| 1 - \frac{1}{2}\delta g^2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_n(g) | V | \Psi_0(g) \rangle|^2}{[E_n(g) - E_0(g)]^2} + \dots \right|, \quad (6.1.3)$$

onde define-se a susceptibilidade da fidelidade (*fidelity susceptibility* ou FS) χ_F :

$$\chi_F(g) \equiv \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_n(g) | V | \Psi_0(g) \rangle|^2}{[E_n(g) - E_0(g)]^2}. \quad (6.1.4)$$

Exceto pelo expoente no denominador, (6.1.4) é a perturbação de segunda ordem para a energia do estado fundamental. Isto é, a FS está relacionada com a segunda derivada da energia do estado fundamental em relação ao parâmetro de controle e pode, portanto, descrever a ordem de uma QPT: vimos no capítulo 5 que a transição de fase quântica ocorre quando a derivada (de primeira ordem ou de ordem superior) da energia do estado fundamental em relação ao parâmetro de controle é descontínua no ponto crítico.

Além disso, tendo em vista que a fidelidade é quase igual à unidade numa região distante do ponto crítico, e tende a zero na vizinhança do ponto crítico, chega-se à percepção de que a FS sendo o termo de maior contribuição da fidelidade F entre dois estados fundamentais

diferenciados por um pequeno deslocamento no parâmetro g , pode ser usada para caracterizar a classe da universalidade em fenômenos críticos [4], seja na AOC ou seja na QPT. Por exemplo, a susceptibilidade da fidelidade para uma hamiltoniana do tipo $H(g) = H_0 + gV$, ao redor do ponto crítico λ_c no TDL, escala como [32]

$$\frac{\chi_F}{N} \propto \frac{1}{|\lambda_c - \lambda|^\mu}, \quad (6.1.5)$$

sendo μ um expoente crítico. Transições de fase de diferentes sistemas, geralmente são caracterizadas por uma mesma classe universal destes expoentes críticos. A drástica mudança da fidelidade próxima do ponto crítico, é interpretada como uma quebra de simetria do sistema, assim, a fidelidade pode ser vista como um parâmetro de ordem; e de forma análoga à QPT, a fidelidade na AOC também é nula no TDL e apenas no TDL.

A seguir, vamos ilustrar a analogia AOC-QPT com o fenômeno da absorção de raios-X.

6.2 Absorção de Raio-X

Uma das aplicações físicas da AOC pode ser vista na absorção de raio-X pelos elétrons de um metal. Nesse fenômeno, um elétron interno absorve raio-X, tornando-se um elétron de condução. Essa emergência súbita do elétron de condução cria um ‘buraco’ (core hole) na banda dos elétrons internos; buraco este representado por um potencial estático V . Os elétrons de condução, então, sentem a presença deste potencial V . Consideramos um modelo em que os elétrons de condução, antes da absorção, são inicialmente livres. Já após a absorção, o surgimento do potencial V pela excitação do elétron interno para a banda de condução, faz com que a função de onda de cada elétron da banda de condução seja perturbada por um deslocamento de fase. O overlap entre o estado fundamental do sistema com o potencial do buraco e do sistema sem o potencial do buraco, no TDL, vai para zero, o que constitui uma AOC.

Na absorção do raio-X, diversos processos de decaimento e efeitos, como por exemplo o Efeito Auger [33], podem ocorrer. No entanto, nos restringimos a estudar o sistema ao processo em que a energia do fóton do raio-X excita um elétron interno para um estado desocupado na banda de condução (à temperatura nula, os únicos estados desocupados da banda de condução estão acima da energia de Fermi). Consideramos que: (i) o buraco atua como um potencial atrativo apenas para os elétrons de condução, (ii) a interação coulombiana entre os elétrons de condução é ignorada, (iii) qualquer processo envolvendo transições ou trocas entre os elétrons internos é ignorado, (iv) o tempo de vida dos estados excitados pela absorção do raio-x não é levado em conta.

A figura 3 [22], é o diagrama do nível de energia para um modelo de elétrons num metal cuja estrutura atômica é a de um cristal periódico. Numa descrição para apenas um elétron, a absorção advém a partir de $E_F + E_C = \hbar\omega_T$, sendo E_F a energia de Fermi, $\hbar\omega_T$ a energia do fóton absorvida pelo elétron, e E_C a energia que separa a banda de condução da banda dos elétrons mais internos. Há um valor crítico para o parâmetro de

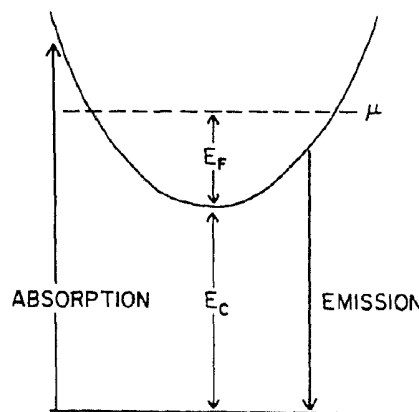


Figura 3 – Diagrama de energia da absorção e emissão

controle w em $w = w_T$. Para os valores de $w > w_T$, há absorção; enquanto que para $w < w_T$, não há absorção.

Depreciando os graus de liberdade do buraco, que aqui vai ser modelado como um potencial estático, podemos imediatamente entender a AOC envolvida no processo da absorção por raio-X pelo simples modelo a seguir.

A hamiltoniana que descreve o elétron na banda de condução, em $D = 1$, pode ser escrita como

$$H(w) = H_0 + gV = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - \lambda(w)\delta(x), \quad (6.2.1)$$

com

$$\lambda(w) = \begin{cases} 0 & \text{para } w < w_T, \\ \lambda_0 & \text{para } w > w_T, \end{cases} \quad (6.2.2)$$

onde λ_0 é uma constante. Para gerar um termo gV adequado, estimamos pela interpretação física imediata do modelo (6.2.1) que $\lambda_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2}$, sendo e a carga do elétron, r_0 o valor médio do raio da órbita do elétron e ϵ_0 a constante de permissividade do vácuo.

A solução da equação de Schrödinger para (6.2.1) pode ser avaliada em duas regiões: $w > w_T$, representando a região em que o potencial do tipo δ -Dirac não é nulo; e outra para a região $w < w_T$, onde o potencial δ -Dirac é nulo. Definindo que o potencial $\delta(x)$ é de alcance limitado e que não há interação entre os elétrons confinados que sentem a influência deste potencial, o modelo (6.2.1) terá o mesmo tipo de solução e deslocamento de fase no TDL, $\delta_n = \pi/2$, independente do parâmetro hamiltoniano, que vimos na subseções 3.2.1 e 4.1.1 para uma δ -Dirac confinada numa caixa unidimensional simétrica.

As QPTs acontecem num mesmo sistema físico; por outro lado, a AOC que abordamos no capítulo 2 é obtida pelo overlap de dois sistemas físicos diferentes, um com o potencial devido a impureza e o outro sem potencial. Todavia, para o fenômeno da absorção do raio-x, não é necessário considerar um sistema físico diferenciado por um potencial de alcance limitado para obter a AOC: o potencial $\delta(x)$ do buraco que surge na absorção do raio-x, emerge de um mesmo sistema físico, não de outro. Assim, para o fenômeno da absorção, não precisamos escrever duas hamiltonianas de dois sistemas físicos diferentes, basta escrever apenas a hamiltoniana (6.2.1) de acordo com (6.2.2). Além disso, as QPTs são conhecidas por geralmente quebrarem a simetria do sistema em que ocorrem. Ora, na absorção dos raios-x, a simetria entre os elétrons de condução e os elétrons mais internos é quebrada pela criação de pares elétron-buraco, o que permite uma

transição. Vemos, portanto, nestas semelhanças, a sugestão de uma analogia mais forte entre a QPT de primeira ordem e a AOC da absorção do raio-x, do que da analogia da AOC de um gás de Fermi e a QPT de primeira ordem. O modelo (6.2.1) não tem interações e conseqüentemente não pode levar a uma QPT *stricto sensu*: a descontinuidade no TDL da primeira derivada da energia do estado fundamental por partícula em relação ao parâmetro w , é devido à descontinuidade de $\lambda(w)$ em (6.2.2); contudo, do ponto de vista experimental, o sistema responde na absorção do raio-X como uma QPT, tornando a conexão do modelo (6.2.1) com a QPT, maior do que uma mera analogia.

A seguir, vamos usar o formalismo da segunda quantização para ampliar (6.2.1) num modelo mais realístico que considera um potencial periódico adicional.

6.2.1 Segunda Quantização

Em modelos mais realísticos, um potencial puramente periódico V_0 criado pelos íons do cristal, pode ser inserido ao modelo (6.2.1). Nesse caso, na ausência do potencial $\delta(x)$ (sistema não-perturbado), os elétrons da banda de condução seriam descritos por autofunções de onda de Bloch (que são o produto de uma função periódica com a onda plana e^{ikx}); enquanto que para o sistema perturbado pelo potencial $\delta(x)$, estas autofunções sofreriam um deslocamento de fase. Isto posto, vamos introduzir através da abordagem da segunda quantização, operadores de criação e aniquilação para adicionar ou remover uma partícula do sistema many-body de N partículas. Consideramos que um potencial de curto alcance é criado pelo buraco quando um elétron interno é excitado para a banda de condução. A hamiltoniana do sistema não-perturbado, isto é, do sistema que não foi excitado pela absorção do raio-X, é [34]

$$\hat{H}_0 = \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (6.2.3)$$

onde c_k^\dagger é o operador que cria uma partícula no autoestado $\phi_k(x)$ de auto-energia ϵ_k , do sistema não-perturbado. A energia ϵ_k é a energia de Bloch

de um elétron sujeito ao potencial puramente periódico V_0 . Desta maneira, (6.2.3) é um modelo mais geral do que (6.2.1) com $\delta(x)$ nulo, pois leva em consideração o potencial periódico V_0 ao qual o elétron do cristal está submetido.

O potencial \hat{V} que atua apenas no buraco localizado em $x = x_c$ é do tipo

$$\hat{V} = \beta\Omega f^\dagger(x_c)f(x_c), \quad (6.2.4)$$

em que β é um parâmetro que mede a intensidade do potencial, Ω é o comprimento da região em que os elétrons estão confinados e $f(x_c) = \sum_k \phi_k(x_c)c_k$. Portanto, para o sistema perturbado, a hamiltoniana será

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \sum_\kappa \lambda_\kappa \tilde{c}_\kappa^\dagger \tilde{c}_\kappa, \quad (6.2.5)$$

com \tilde{c}_κ^\dagger sendo o operador de criação de uma partícula no sistema perturbado, cujos autoestados são $\psi_\kappa(x)$ com autoenergias λ_κ . O estado fundamental do sistema perturbado é denotado por $|\Psi_0\rangle$, e do sistema não-perturbado por $|\Phi_0\rangle$. O overlap entre estes dois estados fundamentais é $\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle$.

6.2.2 Modelo Bulklike

O potencial (6.2.4) é invariante por rotação, o que significa que devemos considerar apenas o setor com momento angular $l = 0$ para o caso perturbado. Assumimos que: (i) os níveis de energia $\{\epsilon_k\}$, próximos da energia de Fermi, são espaçados equidistantemente e (ii) as autofunções $\phi_k(r_c) = 1/\sqrt{\Omega}$ são constantes. Modelos assim caracterizados são chamados de *bulklike*. Sob essas considerações, o potencial \hat{V} passa então a ser escrito como

$$\hat{V} = v_c \sum_{kk'} c_k^\dagger c_{k'}. \quad (6.2.6)$$

Com o uso de uma matriz de transformação $a_{k\kappa}$, escrevemos as autofunções perturbadas ψ_κ a partir das autofunções não-perturbadas ϕ_k :

$$\psi_k = \sum_{k=0}^{N-1} a_{k\kappa} \phi_k. \quad (6.2.7)$$

Pelas equações (6.2.3), (6.2.5) e (6.2.6), obtemos

$$v_c \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\lambda_\kappa - \epsilon_k} = 1, \quad (6.2.8)$$

que nos permite relacionar os autovalores λ_κ da energia perturbada com os autovalores ϵ_k da energia não-perturbada, e também com o coeficiente v_c da intensidade da perturbação.

O deslocamento de fase δ_l das autofunções, causado pela perturbação do buraco, obedece a chamada Regra de Soma de Friedel [35]:

$$Z = \sum_l 2(2l + 1)\delta_l/\pi, \quad (6.2.9)$$

que para o caso $l = 0$ e $Z = -1$ (absorção) nos leva a $\delta_0 = -\pi/2$.

6.2.3 Efeito da AOC

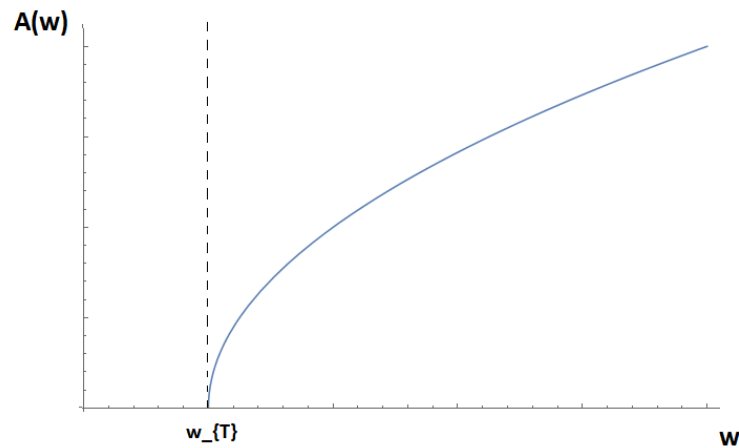
Como explicado por Mahan [22], o espectro da absorção de raios-x pelos metais apresenta uma descontinuidade finita no ponto limiar $\omega = \omega_T$, ou ainda, uma singularidade de segunda ordem caracterizada por uma lei de potência [34] (veja a figura 4) dada por

$$A(\omega) \simeq A^{(0)}(\omega - \omega_T)^{-\alpha_l} \Theta(\omega - \omega_T), \quad (6.2.10)$$

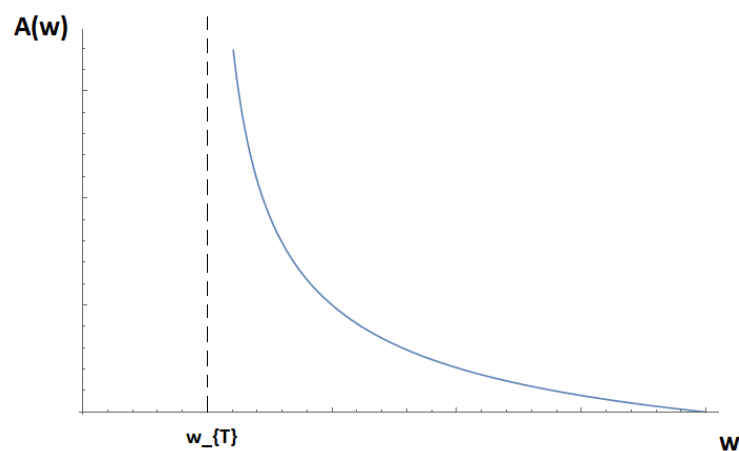
onde $A^{(0)}$ e α_l são duas constantes, com $\Theta(\omega - \omega_T)$ sendo a função de Heaviside. Nossa observação é que esta singularidade de segunda ordem, conhecida como *Fermi-edge singularity* (FES), presente tanto na absorção quanto na emissão, é uma manifestação da presença de uma QPT. Para baixas energias, uma divergência na taxa de transição da absorção descrita por uma lei de potência é expressa pela FES. A FES foi originalmente descoberta na Ref. [33] que prevê que o expoente α_l de (6.2.10) é uma função do deslocamento de fase dos elétrons de condução após sentirem a influência do potencial do buraco.

A teoria de Mahan-Nozières-de Dominics (MND theory) [22] demonstra que pelo valor do expoente da lei de potência (6.2.10), a tendência da curva do espectro da absorção pode ser inferida: seja pela predominância da AOC que faz a curva do espectro da absorção tender a um limite de convergência (veja a figura 5), ou seja pela predominância dos excítons que faz o espectro da absorção divergir. Na teoria MND, o expoente da lei de potência de (6.2.10) é generalizado e dado pela relação $\alpha_l = \frac{2\delta_l(k_F)}{\pi} - \alpha$: o primeiro

termo, $\frac{2\delta_l(k_F)}{\pi}$, vem do fenômeno dos excítons, e é geralmente positivo; o segundo termo, $\alpha = 2\sum_l(2l + 1)\delta_l^2/\pi^2$, vem da catástrofe da ortogonalidade, é sempre positivo, e relaciona-se com o coeficiente γ da equação (2.2.29) do Overlap de Anderson com $\gamma \approx \alpha/4D$. Assim, a depender do valor de α_l (positivo ou negativo) dado pela competição entre a AOC e os excítons, a curva do espectro da absorção pode divergir (para expoente $\alpha_l > 0$) ou convergir (para expoente $\alpha_l < 0$). No fenômeno da absorção, com $V = 0$, o espectro tem o fator de uma função degrau $\Theta(\omega - \omega_T)$, que é modificado na AOC pela presença do potencial V de acordo com uma lei de potência do tipo (6.2.10).



(a) Absorção para $\alpha_l = -0.5$.



(b) Absorção para $\alpha_l = 0.5$

Figura 4 – Impacto do valor de α_l na taxa de transição da absorção

Uma breve explicação do porquê a AOC influencia na transição da absorção pode ser visualizada pelos elementos de matriz do Overlap de Anderson entre os estados iniciais e finais do sistema. Não há ortogonalidade entre os estados do overlap de cada elemento da matriz (2.2.12) para uma partícula. Porém, quando calculado pelo determinante com todas as combinações possíveis dos estados de uma partícula, o resultado vai assintoticamente para zero enquanto $N \rightarrow \infty$. De forma análoga ocorre para o caso dos metais com $N \approx 10^{23}$ elétrons: o overlap de cada elemento da matriz (2.2.12), é menor que a unidade, o que produz um resultado que vai assintoticamente para zero quando todos elementos da matriz (2.2.12) são multiplicados pelo determinante no Overlap de Anderson.



Figura 5 – Efeito da AOC no espectro da absorção [22].

Na próxima seção, vamos mostrar que há uma conexão entre o espalhamento e a AOC, onde as ressonâncias do espalhamento são análogas aos pontos críticos da QPT.

6.3 Espalhamento

O decaimento do overlap de Anderson em $D = 3$ foi interpretado em trabalhos recentes como uma quantidade da teoria do espalhamento [36]. Gostaríamos então de aclarar esta conexão e o respectivo significado físico dela. Por motivos de simplificação e sem perda de generalidade para nossa comparação com a AOC, a teoria de espalhamento que abordaremos a seguir é para o caso elástico cujas transições são entre estados livres (no fim do capítulo falaremos também do espalhamento para estados ligados).

Considere o estado fundamental $|\Phi_N\rangle$ de N férmions não-interagentes dentro de uma caixa esférica de raio R (isto é, o caso sem perturbação), e o estado fundamental para o respectivo sistema perturbado por um po-

tencial esférico de alcance limitado V , $|\Psi_N\rangle$. Como vimos no Capítulo 2 e 4, cada função de onda perturbada $\psi_n(r)$ de (2.2.9), em relação à função de onda não-perturbada, sofre um deslocamento de fase pela presença do potencial V . Nossa observação é que este potencial desempenha papel análogo ao de um potencial espalhador. Na busca da analogia entre o espalhamento e a AOC, um cuidado importante a ser aludido é o de que a teoria de espalhamento é desenvolvida para um sistema não-confinado, enquanto que na AOC consideramos sistemas de caixas finitas (portanto, sistemas confinados) crescentes. Contudo, assim como acontece nas AOCs onde, no TDL, as energias por partícula do sistema com ou sem a perturbação, são as mesmas (Capítulo 3), e assim como acontece nas QPTs de primeira ordem onde, no TDL ao ponto crítico, as energias por partícula são as mesmas nas duas fases; no espalhamento, o estado inicial e final dos pacotes de onda também possuem a mesma energia, pelo menos no TDL. Sugerimos, portanto, um paralelo interessante entre a AOC e a teoria do espalhamento: o Overlap de Anderson pode ser visto como um mecanismo não-trivial de espalhamento que leva à AOC? Qual o significado físico da seção de choque nessa analogia?

Vamos considerar o espalhamento elástico de partículas do tipo a e de momento \mathbf{k} que incidem frontalmente no alvo de partículas do tipo b limitadas pela área A . O número de partículas a e b varridas nessa área de sobreposição é N_a e N_b , respectivamente. Logo, o número N_S de dispersões é diretamente proporcional a N_a e N_b , e inversamente a A :

$$N_S = \sigma \frac{N_a N_b}{A}, \quad (6.3.1)$$

onde σ é a constante de proporcionalidade chamada seção de choque. Distante da região de alcance do potencial, a função de onda correspondente aos estados de espalhamento se comporta como

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (6.3.2)$$

O primeiro termo de (6.3.2) corresponde à onda plana incidente e o segundo termo à onda espalhada que é esférica (Figura 6), sendo $f(\theta)$ a amplitude do espalhamento, que pode ser vista como o somatório das amplitudes das

ondas parciais:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta), \quad (6.3.3)$$

onde $f_l(k)$ são as amplitudes parciais de momento angular l , e P_l é o po-

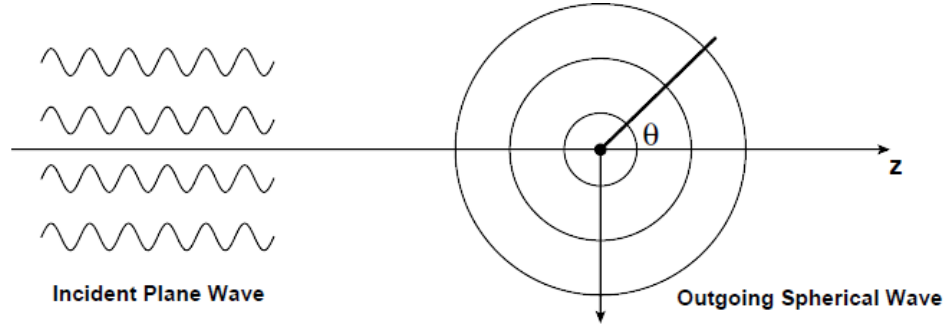


Figura 6 – Representação de um espalhamento quântico

linômio de Legendre. Vamos considerar que a onda plana incidente propaga-se no eixo x positivo. A função de onda plana incidente pode ser expandida como uma soma de ondas esféricas:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta). \quad (6.3.4)$$

A equação (6.3.4) é provada usando a representação das funções de Bessel $j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 e^{ikrcos\theta} P_l(\cos\theta) d(\cos\theta)$. Substituindo (6.3.3) e (6.3.4) em (6.3.2), temos que

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\sum_l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) + \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \right], \quad (6.3.5)$$

tomando o limite $j_l(kr) \xrightarrow{kr \gg 1} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{2ikr}$ em (6.3.5), vem

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \left[[1 + 2ik f_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr)}}{r} \right]. \quad (6.3.6)$$

O fluxo de probabilidade \mathbf{j} desse espalhamento deve satisfazer a equação da continuidade [37]

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (6.3.7)$$

onde

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (6.3.8)$$

isto é, os estados são estacionários e não há fonte ou sorvedouro de partículas no processo de espalhamento: o fluxo das partículas incidentes deve ser igual ao fluxo das partículas espalhadas. Fazendo a igualdade entre o fluxo da onda incidente (em que a função de onda é o primeiro termo de (6.3.2)) com o fluxo da onda espalhada (em que a função de onda é o segundo termo de (6.3.2)) chega-se a

$$|1 + 2ikf_l(k)| = |1| \Rightarrow 1 + 2ikf_l(k) = e^{2i\delta_l}, \quad (6.3.9)$$

logo,

$$f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_l(k)} \sin \delta_l}{k} = \frac{k^{2l}}{k^{2l+1} \cot \delta_l - ik^{2l+1}}. \quad (6.3.10)$$

Para baixas energias, o primeiro termo do denominador é expandido em [38]

$$k^{2l+1} \cot \delta_l \approx -\frac{1}{a_l} + \frac{r_l}{2} k^2 - \dots, \quad (6.3.11)$$

sendo r_l o alcance efetivo. Para $l = 0$, o termo a_0 é chamado de comprimento do espalhamento.

Agora, vamos relacionar estes resultados com a seção de choque. Pela seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (6.3.12)$$

obtemos a seção de choque total

$$\sigma_{\text{tot}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega, \quad (6.3.13)$$

com Ω sendo o ângulo sólido. Substituindo (6.3.3) em (6.3.13) e conhecendo a relação de ortogonalidade $\int d\Omega P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = 4\pi \delta_{ll'}/(2l+1)$, temos que

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l(k)|^2. \quad (6.3.14)$$

Com uso (6.3.10) chega-se a

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (6.3.15)$$

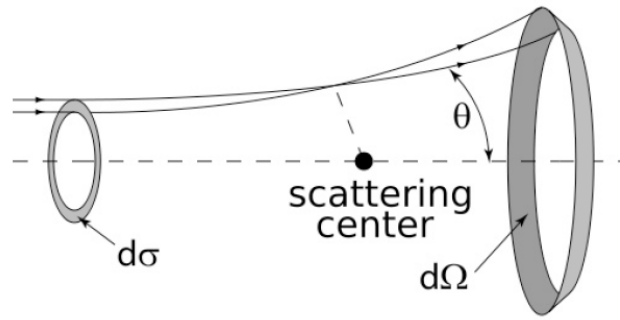


Figura 7 – Seção de Choque Diferencial

Comparando $N^{-\gamma}$ de (2.2.29) com (6.3.15), encontramos

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{24\pi^3}{k^2} \gamma. \quad (6.3.16)$$

A relação (6.3.16) conecta a AOC ao espalhamento: o coeficiente γ característico do overlap da AOC, é diretamente proporcional a uma quantidade inerente do espalhamento, a seção de choque total vezes a energia por partícula, $\hbar^2 k^2 / 2m$, a qual como antecipado, é a mesma energia seja para a onda incidente quanto para a onda espalhada, sendo o choque elástico (pelo menos no TDL).

6.3.1 Estados Ligados

Para $l = 0$ e desprezando termos de segunda ordem em k , temos por (6.3.10) e (6.3.11) que

$$f_0(k) = \frac{1}{k(\cot \delta_0 - i)} = -\frac{1}{ik + 1/a_0}. \quad (6.3.17)$$

Substituindo (6.3.17) em (6.3.9) para $l = 0$, encontramos

$$e^{2i\delta_0(k)} = -\frac{k + (i/a_0)}{k - (i/a_0)}. \quad (6.3.18)$$

A equação (6.3.18) tem um pólo no plano complexo em $k = i/a_0$. Pólos em (6.3.18) correspondem a estados ligados. Sabendo que a energia de ligação deve ser real e negativa, tomamos $k = i\kappa$, que nos fornece a energia do estado ligado como $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$.

Por (6.3.15), a seção de choque total é máxima para $\delta_l = \pi/2$; essa condição é chamada de ressonância. Ora, próximo da energia ressonante, ou

próximo do deslocamento de fase ressonante (que é uma função da energia), o termo $\cot\delta_l$ é aproximadamente zero. Se E é a energia total da partícula, e E_R é o valor da energia da partícula na ressonância, então, na vizinhança da ressonância, $\cot\delta_l$ pode ser expandindo como uma série de Taylor:

$$\cot[\delta_l(E)] = \cot[\delta_l(E_R)] + (E - E_R) \frac{d}{dE} \{\cot[\delta_l(E)]\}_{E=E_R} + \dots \quad (6.3.19)$$

Na ressonância, $\cot[\delta_l(E_R)] = 0$, e se definirmos a quantidade Γ através da relação [39]

$$\frac{2}{\Gamma} = \frac{d}{dE} \cot[\delta_l(E)], \quad (6.3.20)$$

junto com (6.3.10), chegamos a

$$f_l(k) = -\frac{\Gamma/2k}{E - E_R + i\Gamma/2}, \quad (6.3.21)$$

que é conhecida como a fórmula de Breit-Wigner [40]. Substituindo (6.3.21) na seção de choque total (6.3.14), obtemos a seção de choque ressonante:

$$\sigma_l(res) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \frac{\Gamma^2}{4(E - E_R)^2 + \Gamma^2}, \quad (6.3.22)$$

que quando relacionada com (2.2.29) nos fornece

$$\sigma_l(res) = \frac{24\pi^3 \gamma}{k^2 \sin^2 \delta_l} \frac{\Gamma^2}{4(E - E_R)^2 + \Gamma^2}, \quad (6.3.23)$$

com Γ sendo um fator que tem o papel de uma largura na distribuição de $\sigma_l(res)$ em relação aos momentos k .

Fisicamente, uma partícula num estado ligado, não pode ser encontrada em $x \rightarrow \pm\infty$. Quer dizer, a partícula está confinada e seu estado é normalizável. Esta característica dos estados ligados, tendo em vista analogia AOC-espalhamento que desenvolvemos, fortalece a conexão com os sistemas confinados da AOC considerados anteriormente. Também observamos que as ressonâncias desempenham um papel análogo aos dos pontos críticos de uma QPT. Além disso, a condição de ressonância é alcançada para $\delta_l = \pi/2$, que coincide com o deslocamento de fase em $D = 1$ da AOC do Capítulo 4.

Agora, substituindo os termos de segunda ordem da expansão efetiva (6.3.10), em (6.3.17), temos

$$\frac{1}{k(\cot\delta_0 - i)} \approx \frac{1}{-1/a_0 + r_0 k^2/2 - ik}, \quad (6.3.24)$$

que é válida para pequenos momentos k . O parâmetro a_0 nos permite avaliar a dependência do deslocamento de fase com a energia; a depender do valor de a_0 e dada uma região de δ_F (o deslocamento de fase calculado na energia de Fermi), podemos avaliar para qualquer energia E da partícula, se o deslocamento de fase $\delta(E) \equiv \delta_{k=\sqrt{2mE}/\hbar^2}$ é positivo ou negativo. Nesse cenário, três regimes de interação do potencial são identificados: atrativo, misto e repulsivo. No regime atrativo (a), o parâmetro a_0 é negativo e δ_F é positivo não excedendo $\pi/2$, o que resulta em um deslocamento de fase $\delta(E)$ positivo para qualquer energia. No regime misto (b), o parâmetro a_0 é negativo enquanto $\pi/2 < \delta_F < \pi$, fazendo com que o deslocamento de fase $\delta(E)$ também seja positivo para qualquer energia. E por fim, no regime repulsivo (c), o parâmetro a_0 é positivo, o que implica num deslocamento de fase $\delta(E)$ negativo para todas as energias. A nível de curiosidade, no contexto do gás de Fermi acoplado a uma impureza imóvel, como o da Ref. [21], a interação das partículas (fermiônicas) com a impureza é controlada pela equação (6.3.24), e os regimes de interação (a), (b) e (c) foram identificados como sendo universalmente determinados pelo deslocamento de fase na energia de Fermi.

Como vimos no capítulo 2, Anderson considerou o efeito de uma perturbação local num gás de N férmions sem spin, e mostrou que o overlap entre os estados do sistema many-body perturbado e não-perturbado é escrito como $\langle \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) | \Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \rangle$. Como consequência, mesmo uma pequena perturbação que diferencia os dois estados many-body, já é suficiente para que eles se tornem ortogonais enquanto N cresce. Embora o tratamento de Anderson se concentre em estados estacionários, podemos aplicar uma ortogonalidade dinâmica à teoria do espalhamento. Considere um sistema de partículas não-interagentes descritas por uma hamiltoniana \hat{H} em que para $t < 0$: não há perturbação e o estado fundamental é $|\Phi\rangle$, de energia E_i . Este cenário é análogo ao da partícula incidente que não sofre influência de um potencial espalhador. Já em $t = 0$, considere que

o cenário análogo ao da partícula espalhada acontece: surge um potencial local de espalhamento que causa uma mudança no estado fundamental do sistema, agora descrito pela atuação de um operador \hat{X}^\dagger em $|\Phi\rangle$, que faz emergir em $t = 0^+$ um novo estado fundamental $\hat{X}^\dagger |\Phi\rangle = |\psi_i\rangle$, e que troca a hamiltoniana inicial do sistema, $\hat{H} = \hat{H}_i$, para uma hamiltoniana final $\hat{H} = \hat{H}_f$ (de forma análoga, a atuação de \hat{X} em $\langle\Phi|$ faz a troca de \hat{H}_f para \hat{H}_i). Esta dinâmica é caracterizada pelo propagador

$$G(t) \equiv -i\Theta(t) \langle\Phi| e^{i\hat{H}t} \hat{X} e^{-\hat{H}t} \hat{X}^\dagger |\Phi\rangle \quad (6.3.25)$$

com

$$e^{-i\hat{H}_i t} \hat{X}^\dagger |\Phi\rangle = e^{-it(\hat{H}_f + w_0)} \hat{X}^\dagger |\Phi\rangle, \quad (6.3.26)$$

$$\langle\Phi| e^{i\hat{H}_f t} \hat{X} = \langle\Phi| e^{i\hat{H}_i t} \hat{X}, \quad (6.3.27)$$

sendo $e^{iw_0 t}$ um fator de fase. Assim, a função (6.3.25) pode ser expressa como

$$G(t) = -i\Theta(t) e^{-iw_0 t} \langle\Phi| \hat{X}(t) \hat{X}^\dagger |\Phi\rangle, \quad (6.3.28)$$

com $\hat{X}(t) = e^{i\hat{H}_i t} \hat{X} e^{-\hat{H}_f t}$.

A equação (6.3.28) nos diz que uma vez que a energia das partículas no estado fundamental se ajusta em reação à mudança súbita no potencial local em $t = 0$, o overlap (6.3.25) diminui com o tempo de acordo com uma lei de potência [33], refletindo a catástrofe da ortogonalidade de Anderson. Podemos ainda entender (6.3.25) heurísticamente, a partir do overlap

$$S(t) = \langle\Phi| e^{\hat{H}_f t} e^{-\hat{H}_i t} |\Phi\rangle, \quad (6.3.29)$$

onde o estado $|\Phi\rangle$ do sistema antes do espalhamento, é um autoestado da hamiltoniana inicial \hat{H}_i , enquanto $\hat{H}_f = \hat{H}_i + \hat{V}$ é a hamiltoniana final do sistema depois do espalhamento. Desde que $\hat{H}_i |\Phi\rangle = \epsilon_i |\Phi\rangle$, temos que

$$S(t) = \langle\Phi| e^{\hat{H}_f t} |\Phi\rangle e^{-\epsilon_i t}, \quad (6.3.30)$$

$$= \langle\Phi_0| \Phi_t\rangle e^{-\epsilon_i t}, \quad (6.3.31)$$

com $|\Phi_t\rangle = e^{\hat{H}_f t} |\Phi\rangle$ representando a evolução temporal para $t > 0$ e $\Phi = \Phi_0$. Definindo, respectivamente, $|n\rangle$ e ϵ_n como um conjunto completo de

autoestados e autoenergias da hamiltoniana \hat{H}_f , reescrevemos (6.3.31):

$$S(t) = e^{-\epsilon_i t} \sum_n e^{-i\epsilon_n t} |\langle \Phi | n \rangle|^2. \quad (6.3.32)$$

No limite em que $t \rightarrow \infty$, a equação (6.3.32) vai ser dominada pelo estado fundamental final de \hat{H}_f , denotado por $|\tilde{E}_f\rangle$ e com autoenergia \tilde{E}_f ; dando uma contribuição $|\langle \Phi | \tilde{E}_f \rangle|^2$ que escala como $N^{-\beta}$, sendo β o expoente que governa o decaimento tipo AOC de (6.3.32).

6.3.2 Ressonâncias de Feshbach

O modelo Anderson-Fano [22], abundantemente investigado na Ref. [21], descreve a resposta dinâmica de um Gás de Fermi acoplado a uma impureza imóvel em que a impureza pode ligar-se a um átomo do mar de Fermi e formar uma molécula. O modelo é caracterizado por diferentes regimes de interação controlados por ressonâncias de Feshbach. Uma característica chave das ressonâncias de Feshbach é a presença de um canal de entrada (ou aberto) e um canal fechado com estados ligados [41]. Pode acontecer que um estado ligado do canal fechado seja acoplado ressonantemente com uma colisão de dois átomos do canal de entrada, influenciando o processo de espalhamento.

Para um processo de colisão com energia muito pequena E , pode-se definir um potencial do canal energeticamente aberto e outro do canal energeticamente fechado; assim, duas curvas de potenciais são consideradas: no canal aberto, $V_{bg}(R)$, que assintoticamente conecta dois átomos livres num gás ultrafrio; e $V_c(R)$, do canal fechado, que suporta estados moleculares ligados com energia E_c próxima do limiar de ionização do canal aberto (veja a Figura 8). Em outros termos, uma ressonância de Feshbach ocorre quando o estado molecular ligado do canal fechado se aproxima energeticamente do estado de espalhamento do canal aberto. Este processo é descrito como um espalhamento virtual com um estado metaestável.

A diferença de energia entre o canal aberto e fechado pode ser controlada através de um campo magnético, quando os momentos magnéticos destes dois canais são diferentes [42]. O acoplamento ressonante é então convenientemente realizado ajustando magneticamente E_c perto do limite

$E \rightarrow 0$. Assim, ao ajustar o campo magnético é possível induzir uma transição de fase do sistema entre dois átomos em colisão para um estado molecular ligado. Na literatura, foi obtida uma fórmula relacionando o com-

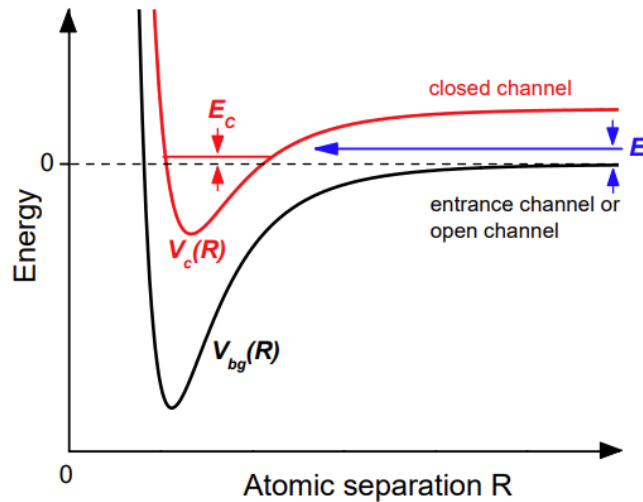


Figura 8 – Modelo básico de dois canais para uma ressonância de Feshbach [41]

primento de espalhamento com o campo magnético B em torno do valor da ressonância de Feshbach [43]:

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (6.3.33)$$

sendo a_{bg} o comprimento de espalhamento relacionado ao potencial V_{bg} , Δ conhecido como a largura da ressonância, e B_0 denota a intensidade do campo magnético na qual o comprimento de espalhamento diverge, $a \rightarrow \infty$. As ressonâncias de Feshbach, portanto, controlam a interação dos átomos constituintes deste sistema e determinam a transição entre diferentes regimes quânticos e fases quânticas. Na Ref. [21], o modelo de espalhamento nas proximidades de uma ressonância de Feshbach é demonstrado ser equivalente ao modelo Anderson-Fano que manifesta a AOC, confirmando a tripla conexão Espalhamento-AOC-QPT, cujo denominador comum é a ortogonalidade do estado fundamental discutida no capítulo 2.

7 Conclusão

Nós revisamos a Catástrofe da Ortogonalidade de Anderson (AOC) e estudamos sistemas de N férmions não-interagentes confinados em uma caixa de volume L^D . Demonstramos que no TDL, mantendo a razão N/L^D fixa enquanto $N, L \rightarrow \infty$, a energia por partícula do estado fundamental destes sistemas confinados para potenciais radialmente simétricos de alcance limitado, é universal, isto é, independe do potencial $V(r)$ aplicado cuja única condição necessária é a de que sua integral sob a coordenada radial r convirja ou divirja como $L^{1-\alpha}$ para $\alpha > 0$, α representando o expoente de decaimento do potencial com a distância: $V(r) = O(1/L^\alpha)$.

Confirmamos a universalidade, primeiramente, em sistemas unidimensionais com uma partícula e potenciais tipo δ -Dirac. Depois, através das variáveis de Prüfer aplicadas na equação de Schrödinger, obtivemos a universalidade destes sistemas para qualquer potencial simétrico de alcance limitado em $D = 1, 2, 3$, explicitando rigorosamente a diferença das energias do sistema perturbado e não-perturbado como sendo $\tilde{E}_n = E_n + O(L^{-\alpha})$, que no TDL, leva à igualdade $\tilde{E}(N, L)/N = E(N, L)/N$ das respectivas energias por partícula dos estados fundamentais.

Ao compararmos a solução exata da equação de Schrödinger do caso unidimensional simétrico, com a função de onda perturbada da AOC original adaptada para o caso simétrico em $D = 1$, calculamos explicitamente o deslocamento de fase $\delta_n = \pi/2$, e percebemos que as famílias de soluções ímpares da equação de Schrödinger não exercem nenhum papel na perturbação, visto que, o deslocamento de fase foi encontrado ser não-nulo apenas para as soluções pares, estando bem definido somente no TDL (o que foi verificado via Teorema de Fumi).

Analizamos a conexão entre a AOC e a Transição de Fase Quântica (QPT). Usamos uma abordagem que identifica QPTs de primeira ordem através da condensação do espaço dos estados e notamos, através deste mecanismo, que as energias por partícula dos estados fundamentais envolvidas no fenômeno da AOC, que sempre se igualam no TDL, exercem

um papel paralelo às energias de duas fases de um sistema que sofre uma QPT de primeira ordem onde, no ponto crítico, isto é, no ponto onde as duas fase coexistem, também as duas energias por partícula se igualam no TDL. Para reforçar esta observação, discutimos a relação entre a fenomenologia AOC da absorção de raios-X com a QPT. Nesse propósito, construímos um modelo cuja hamiltoniana fornece uma analogia mais forte entre a QPT e a AOC do que da analogia para com sistemas do Gás de Fermi. Ampliando o modelo para cenários mais realísticos, fizemos a segunda quantização considerando um potencial adicional periodico V_0 inerente ao sistema, calculando o deslocamento de fase causado pela perturbação no fenômeno da absorção como sendo $\delta_l = \pi/2$, nos remetendo ao deslocamento de fase das AOCs vistas anteriormente.

Por fim, estabelecemos a relação entre a AOC e o espalhamento elástico quântico (onde, então, as energias antes e depois do espalhamento também se igualam) e encontramos uma equação que conecta o coeficiente γ característico do overlap da AOC com uma quantidade do espalhamento, a seção de choque, multiplicada pela energia por partícula. O paralelo AOC-Espalhamento também foi visualizado na seção de choque total do espalhamento, onde a condição de ressonância é alcançada para $\delta_l = \pi/2$, coincidindo com o deslocamento de fase em $D = 1$ da AOC. Observamos que os estados ligados envolvidos no espalhamento, por serem normalizáveis, fornecem uma analogia mais forte com a AOC de sistemas confinados do que os estados de espalhamento não-ligados, e sugerem que as ressonâncias de Feshbach desempenham papel análogo aos dos pontos críticos de uma QPT.

Como perspectiva para ser desenvolvida, tendo em vista que uma AOC é distinta de uma QPT, em quais aspectos dos dois fenômenos a analogia não pode ser estabelecida? O que acontece com a universalidade se passarmos a considerar sistemas fermiônicos interagentes? A AOC pode ser generalizada para sistemas interagentes? A analogia AOC-QPT seria mantida para sistemas interagentes? Se sim, a analogia AOC-QPT de sistemas não-interagentes poderia ser vista como um caso particular de uma abordagem mais geral? Essas e outras questões são tópicos abertos para

potenciais novos estudos e melhor compreensão.

8 Âpendice

8.1 Teoria da Perturbação

A introdução do potencial na caixa, desloca a solução da equação de Schrödinger em comparação com o caso de potencial nulo dentro da caixa. Pela teoria da perturbação, a correção em primeira ordem é

$$\psi_n \approx \psi_n^0 + \psi_n^1, \quad (8.1.1)$$

onde ψ_n^0 é a função de onda da partícula sem a perturbação, enquanto que ψ_n^1 é a correção em primeira ordem causada pela presença do potencial. Em primeira ordem, o operador hamiltoniano \hat{H} será dado pela soma do operador \hat{H}^0 (que corresponde ao sistema sem a perturbação) com o operador de correção $\lambda\hat{H}^1$, ou seja

$$\hat{H} \approx \hat{H}^0 + \lambda\hat{H}^1. \quad (8.1.2)$$

Aplicando \hat{H} nos autoestados $|n\rangle = \sum_{i=0}^1 \lambda^i |n^i\rangle$ da partícula:

$$\hat{H}|n\rangle \approx (\hat{H}^0 + \lambda\hat{H}^1) \sum_{i=0}^1 \lambda^i |n^i\rangle, \quad (8.1.3)$$

que leva a

$$\hat{H}^0 |n^0\rangle + \lambda (\hat{H}^1 |n^0\rangle + \hat{H}^0 |n^1\rangle) = E_n^0 |n^0\rangle + \lambda (E_n^1 |n^0\rangle + E_n^0 |n^1\rangle), \quad (8.1.4)$$

onde E_n^0 e E_n^1 são, respectivamente, os autovalores de \hat{H}^0 e $\lambda\hat{H}^1$. Escolhendo apenas os termos de primeira ordem em λ vem

$$\hat{H}^0 |n^1\rangle + \hat{H}^1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle. \quad (8.1.5)$$

Pela ortonormalidade $\langle n^0 | n^0 \rangle = 1$, temos que o produto de (8.1.5) com $\langle n^0 |$, fornece o termo da correção em primeira ordem das energias devido a presença do potencial:

$$E_n^1 = \langle n^0 | \hat{H}^1 | n^0 \rangle, \quad (8.1.6)$$

isto é,

$$E_n \approx E_n^0 + \langle n^0 | \hat{H}^1 | n^0 \rangle. \quad (8.1.7)$$

nos permitindo calcular exatamente $\langle n^0 | \hat{H}^1 | n^0 \rangle$ como

$$\begin{aligned} \langle n^0 | \hat{H}^1 | n^0 \rangle &= \int_{-L/2}^0 \sqrt{2/L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) [-\beta\delta(x)] \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + \\ &+ \int_0^{L/2} \sqrt{2/L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) [-\beta\delta(x)] \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \end{aligned} \quad (8.1.8)$$

que é nulo. Em outras palavras, para as soluções ímpares de (3.2.7) e (3.2.8), não há perturbação nos autovalores positivos da energia por conta da presença do potencial. O deslocamento no espectro de energia pela presença do potencial (3.2.1), deve então pertencer às soluções pares da função de onda.

8.2 Funções especiais

Considere o potencial esférico

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r > R_0, \\ V_0 & \text{para } r < R_0, \end{cases} \quad (8.2.1)$$

R_0 é o alcance do potencial. A equação de Schrödinger do problema é

$$-\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[\mathcal{V} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l = k^2 u_l, \quad (8.2.2)$$

com $u_l = rA_l(r)$ em que $A_l(r)$ é a parte radial da solução da Eq. de Schrödinger 3D completa. Definimos $\mathcal{V} = (2m/\hbar^2)V$ e consideramos a condição $u(r=0) = 0$. A solução para a região $r > R_0$ é dada pela combinação linear das funções de Hankel esféricas

$$h_l^{(1)}(kr) = j_l(kr) + in_l(kr), \quad (8.2.3)$$

$$h_l^{(2)}(kr) = j_l(kr) - in_l(kr), \quad (8.2.4)$$

sendo que j_l e n_l são, respectivamente, as funções de Bessel e Neumann. Pelas propriedades dessas duas funções, para o limite assintótico de r

grande

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{kr} \cos \left[kr - \frac{(l+1)\pi}{2} \right], \quad (8.2.5)$$

$$n_l(kr) \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{kr} \sin \left[kr - \frac{(l+1)\pi}{2} \right]. \quad (8.2.6)$$

Assim, podemos calcular também o limite assintótico das funções (8.2.3) e (8.2.4):

$$h_l^{(1)} \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{ikr} e^{i \left[kr - \frac{l\pi}{2} \right]}, \quad (8.2.7)$$

$$h_l^{(2)} \xrightarrow{r \text{ grande}} -\frac{1}{ikr} e^{-i \left[kr - \frac{l\pi}{2} \right]}. \quad (8.2.8)$$

Pela Teoria do Espalhamento, a função de onda completa para um $r > R_0$ qualquer será dada por

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum i^l (2l+1) A_l(r) P_l(\cos \theta), \quad (8.2.9)$$

onde $P_l \cos(\theta)$ são os polinômios de Legendre. Para $r > R_0$, a função de onda radial é

$$A_l(r) = c_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr). \quad (8.2.10)$$

Para r grande, (8.2.9) fica como

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum (2l+1) P_l \left[\frac{e^{2i\delta_l} e^{ikr}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr} \right]. \quad (8.2.11)$$

Comparando (8.2.11) com (8.2.10) no limite de r grande, é evidente que

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{2i\delta_l}, \quad c_l^{(2)} = \frac{1}{2}. \quad (8.2.12)$$

Portanto, a função de onda radial para $r > R_0$ pode ser escrita como

$$A_l(r) = e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)]. \quad (8.2.13)$$

No caso da função de onda nula em $r = R_0$, temos que $A_l(r = R_0) = 0$, ou ainda

$$\cos \delta_l j_l(kR_0) - \sin \delta_l n_l(kR_0) = 0, \quad (8.2.14)$$

ou

$$\tan \delta_l = \left(\frac{j_l(kR_0)}{n_l(kR_0)} \right). \quad (8.2.15)$$

Para o cenário específico $l = 0$ (espalhamento de onda-S), a equação (8.2.15) é

$$\tan(\delta_0) = -\tan(kR_0), \quad (8.2.16)$$

com $\delta_0 = -kR_0$. A função de onda (8.2.13), omitindo o termo $e^{i\delta_0}$, torna-se

$$A_{l=0}(r) \propto \frac{\sin(kr)}{kr} \cos(\delta_0) + \frac{\cos(kr)}{kr} \sin(\delta_0) = \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0). \quad (8.2.17)$$

Notamos que, para $l = 0$, não é necessário introduzir as funções especiais para resolver (8.2.2). Também é curioso mencionar que caso façamos um gráfico de (8.2.17) em função de r , ele será deslocado por um fator R_0 em relação à onda sinusoidal livre.

8.3 Overlap do Caso Unidimensional

Vamos calcular de modo semelhante ao que foi feito na subseção 2.2.2, o overlap (2.2.15) numa caixa $[-L/2, L/2]$ de dimensão $D = 1$ com um potencial δ -Dirac, idêntico ao potencial (3.2.1). A solução ímpar da Barreira Potencial Infinita sem a δ -Dirac confinada, com a condição de ser nula em $|x| \geq L/2$, é

$$\phi_n(x) = A \sin(k_n x), \quad (8.3.1)$$

igual à solução ímpar (3.2.18) para a Barreira Potencial Infinita com a presença do potencial $\beta\delta(x)$; ou seja, a presença do potencial perturba apenas as soluções pares da função de onda (ver Apêndice 8.1). Portanto, o overlap entre ϕ_n e a solução ímpar da Eq. de Schrödinger perturbada é obviamente

$$\langle \phi_n | \psi_{n' \text{ ímpar}} \rangle = \delta_{n,n'}, \quad (8.3.2)$$

o resultado encontrado em (2.2.24).

Para a solução par, o procedimento será separar a função de onda em duas regiões, a região (I) e a região (II), cf (3.2.9) e (3.2.10):

$$\psi_{n \text{ par}}(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A \sin(\tilde{k}_n x) + B \cos(\tilde{k}_n x) & \text{para } -L/2 < x < 0, \\ \psi_{II}(x) = -A \sin(\tilde{k}_n x) + B \cos(\tilde{k}_n x) & \text{para } 0 < x < L/2. \end{cases} \quad (8.3.3)$$

O overlap de ϕ_n com ψ_I é então

$$\langle \phi_n | \psi_I \rangle = \langle A \sin(k_n x) | A \sin(\tilde{k}_{n'} x) \rangle + \langle A \sin(k_n x) | B \cos(\tilde{k}_{n'} x) \rangle; \quad (8.3.4)$$

e o overlap de ϕ_n com ψ_{II} é

$$\langle \phi_n | \psi_{II} \rangle = -\langle A \sin(k_n x) | A \sin(\tilde{k}_{n'} x) \rangle + \langle A \sin(k_n x) | B \cos(\tilde{k}_{n'} x) \rangle. \quad (8.3.5)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \psi_{n'par} \rangle &= \langle \phi_n | \psi_I \rangle + \langle \phi_n | \psi_{II} \rangle, \\ &= 2AB \langle \sin(k_n x) | \cos(\tilde{k}_{n'} x) \rangle, \end{aligned} \quad (8.3.6)$$

que na forma integral é escrito por

$$\langle \phi_n | \psi_{n'par} \rangle = 2AB \int_{-L/2}^{L/2} \sin(k_n x) \cos(\tilde{k}_{n'} x) dx. \quad (8.3.7)$$

Usando a identidade $\sin(nx)\cos(mx) = 1/2[\sin((m-n)x) + \sin((m+n)x)]$, a integral (8.3.7) é trivial e nula. Restando, portanto, calcular o overlap entre as funções de onda pares.

Referências

- [1] P. W. Anderson, “Infrared catastrophe in fermi gases with local scattering potentials,” *Physical Review Letters*, vol. 18, no. 24, p. 1049, 1967.
- [2] I. Affleck, “Boundary condition changing operations in conformal field theory and condensed matter physics,” *Nuclear Physics B- Proceedings Supplements*, vol. 58, pp. 35–41, 1997.
- [3] P. Zanardi and N. Paunković, “Ground state overlap and quantum phase transitions,” *Physical Review E*, vol. 74, no. 3, p. 031123, 2006.
- [4] S.-J. Gu, “Fidelity approach to quantum phase transitions,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 24, no. 23, pp. 4371–4458, 2010.
- [5] P. Zanardi, M. Cozzini, and P. Giorda, “Ground state fidelity and quantum phase transitions in free fermi systems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2007, no. 02, p. L02002, 2007.
- [6] T. Liu, Y.-Y. Zhang, Q.-H. Chen, and K.-L. Wang, “Large- n scaling behavior of the ground-state energy, fidelity, and the order parameter in the dicke model,” *Physical Review A*, vol. 80, no. 2, p. 023810, 2009.
- [7] M. Ostilli and C. Presilla, “First-order quantum phase transitions as condensations in the space of states,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2020.
- [8] D. F. C. A. Silva, M. Ostilli, and C. Presilla, “Ground-state-energy universality of noninteracting fermionic systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 104, p. 023309, 2021.
- [9] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical review*, vol. 109, no. 5, p. 1492, 1958.

- [10] S. Kettemann, “Exponential orthogonality catastrophe at the anderson metal-insulator transition,” *Physical Review Letters*, vol. 117, no. 14, p. 146602, 2016.
- [11] K. Michaeli and A. Finkelstein, “Suppression of tunneling of superconducting vortices caused by a remote gate: Example of an extended object tunneling,” *Physical Review B*, vol. 76, no. 6, p. 064506, 2007.
- [12] P. W. Anderson, “Ground state of a magnetic impurity in a metal,” *Physical Review*, vol. 164, no. 2, p. 352, 1967.
- [13] J. Kondo, “Resistance minimum in dilute magnetic alloys,” *Progress of theoretical physics*, vol. 32, no. 1, pp. 37–49, 1964.
- [14] P. Anderson, “A poor man’s derivation of scaling laws for the kondo problem,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 3, no. 12, p. 2436, 1970.
- [15] K. Yamada and K. Yosida, “Orthogonality catastrophe for a system of interacting electrons. iii,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 68, no. 5, pp. 1504–1517, 1982.
- [16] M. Ostilli and C. Presilla, “First-order quantum phase transitions as condensations in the space of states,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 54, no. 5, p. 055005, 2021.
- [17] J. Hadamard, “Étude sur les propriétés des fonctions entières et en particulier d’une fonction considérée par riemann,” *Journal de mathématiques pures et appliquées*, pp. 171–216, 1893.
- [18] L. Sonderhouse, C. Sanner, R. B. Hutson, A. Goban, T. Bilitewski, L. Yan, W. R. Milner, A. M. Rey, and J. Ye, “Thermodynamics of a deeply degenerate su (n)-symmetric fermi gas,” *Nature Physics*, vol. 16, no. 12, pp. 1216–1221, 2020.
- [19] M. Gebert, “Finite-size energy of non-interacting fermi gases,” *Mathematical Physics, Analysis and Geometry*, vol. 18, no. 1, pp. 1–13, 2015.

- [20] M. Gebert, *Spectral and Eigenfunction correlations of finite-volume Schrödinger operators*. PhD thesis, lmu, 2015.
- [21] R. Schmidt, M. Knap, D. A. Ivanov, J.-S. You, M. Cetina, and E. Demler, “Universal many-body response of heavy impurities coupled to a fermi sea: a review of recent progress,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 81, no. 2, p. 024401, 2018.
- [22] G. D. Mahan, “Many-particle physics,” 1995.
- [23] K. Huang, *Introduction to statistical physics*. CRC press, 2009.
- [24] G. Jaeger, “The ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution,” *Archive for history of exact sciences*, vol. 53, no. 1, pp. 51–81, 1998.
- [25] D. Rossini and E. Vicari, “Ground-state fidelity at first-order quantum transitions,” *Physical Review E*, vol. 98, no. 6, p. 062137, 2018.
- [26] P. Zanardi, H. Quan, X. Wang, and C. Sun, “Mixed-state fidelity and quantum criticality at finite temperature,” *Physical Review A*, vol. 75, no. 3, p. 032109, 2007.
- [27] C. De Grandi, V. Gritsev, and A. Polkovnikov, “Quench dynamics near a quantum critical point,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 1, p. 012303, 2010.
- [28] A. Carollo, D. Valenti, and B. Spagnolo, “Geometry of quantum phase transitions,” *Physics Reports*, vol. 838, pp. 1–72, 2020.
- [29] H. K. Knörr, P. Otte, and W. Spitzer, “Andersons orthogonality catastrophe in one dimension induced by a magnetic field,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 48, no. 32, p. 325202, 2015.
- [30] M. Gebert, H. Küttler, P. Müller, and P. Otte, “The exponent in the orthogonality catastrophe for fermi gases,” *Journal of Spectral Theory*, vol. 6, no. 3, pp. 643–683, 2016.

- [31] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, vol. 3. Elsevier, 2013.
- [32] S.-J. Gu, H.-M. Kwok, W.-Q. Ning, H.-Q. Lin, *et al.*, “Fidelity susceptibility, scaling, and universality in quantum critical phenomena,” *Physical Review B*, vol. 77, no. 24, p. 245109, 2008.
- [33] P. Nozieres and C. De Dominicis, “Singularities in the x-ray absorption and emission of metals. iii. one-body theory exact solution,” *Physical Review*, vol. 178, no. 3, p. 1097, 1969.
- [34] M. Hentschel, D. Ullmo, and H. U. Baranger, “Fermi edge singularities in the mesoscopic regime: Anderson orthogonality catastrophe,” *Physical Review B*, vol. 72, no. 3, p. 035310, 2005.
- [35] A. Georges, “The beauty of impurities: Two revivals of friedel’s virtual bound-state concept,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 17, no. 3-4, pp. 430–446, 2016.
- [36] M. Gebert, H. Küttler, and P. Müller, “Andersons orthogonality catastrophe,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 329, no. 3, pp. 979–998, 2014.
- [37] J. J. Sakurai and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” 1995.
- [38] H. A. Bethe, “Theory of the effective range in nuclear scattering,” *Physical Review*, vol. 76, no. 1, p. 38, 1949.
- [39] W. E. Burcham, M. Jobes, and E. M. Henley, *Nuclear and particle physics*. Longman Burnt Mill, 1995.
- [40] S. Ceci, M. Hadžimehmedović, H. Osmanović, A. Percan, and B. Zauner, “Fundamental properties of resonances,” *Scientific reports*, vol. 7, no. 1, pp. 1–7, 2017.
- [41] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, no. 2, p. 1225, 2010.

-
- [42] R. Carlone and D. Finco, “Expansion of the resolvent in a feshbach model,” *arXiv preprint arXiv:1902.03626*, 2019.
- [43] A. Moerdijk, B. Verhaar, and A. Axelsson, “Resonances in ultracold collisions of li 6, li 7, and na 23,” *Physical Review A*, vol. 51, no. 6, p. 4852, 1995.