

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

THIAGO BENTO DOS SANTOS

Efeitos da topologia da rede de Apolônio sobre as propriedades
termodinâmicas de gases quânticos não interagentes

Maceió

2012

THIAGO BENTO DOS SANTOS

**Efeitos da topologia da rede de Apolônio sobre as propriedades
termodinâmicas de gases quânticos não interagentes**

Dissertação apresentada ao Instituto de Física
da Universidade Federal de Alagoas como parte
dos créditos para a obtenção do título de Mestre
em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Italo Marcos Nunes de
Oliveira

Maceió

2012

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária: Helena Cristina Pimentel do Vale

S237e Santos, Thiago Bento dos.
Efeitos da topologia da rede de Apolônio sobre as propriedades termo
dinâmicas de gases quânticos não interagentes / Thiago Bento dos Santos.
- 2016.
81 f. : il., grafs.

Orientador: Italo Marcos Nunes de Oliveira.
Dissertação (doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade
Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2012.

Bibliografia: f. 77-81.

1. Rede de Apolônio. 2. Fractais. 3. Transições de fase. 4. Termodinâmica
estatística. 5. Gases quânticos. I. Título.

CDU: 536.75



PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

"Efeitos da topologia da rede de Apolônio sobre as propriedades termodinâmicas de gases quânticos não interagentes"

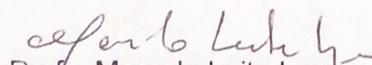
por

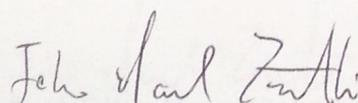
Thiago Bento dos Santos

A Banca Examinadora composta pelos professores Ítalo Marcos Nunes de Oliveira (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Marcelo Leite Lyra, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Fábio Marcel Zanetti, do Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas/Campus Arapiraca, consideram o candidato aprovado com grau "A".

Maceió, 22 de junho de 2012


Prof. Ítalo Marcos Nunes de Oliveira


Prof. Marcelo Leite Lyra


Prof. Fábio Marcel Zanetti

Aos meus pais e irmã.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a todos os professores de Instituto de Física que participaram, direta ou indiretamente da minha formação, em especial aos professores Evandro Gouveia, Thiago Mariz, Iram Gléria e Marcelo Lyra.

Um agradecimento especial a todos os colegas da pós-graduação, que tornaram essa jornada bem menos sofrida. Principalmente, aos amigos Thaila, Geovana, Samuel, Ana, Uéslen, Wesley, Wandearley, Socorro, Carlos, Tamires, Cícero Julião, Núcia, Andréa, Lidiane, Edmilson e Chico. Gostaria de agradecer a dois companheiros de todas as horas, Rafael e Felipe e as minhas companheiras de sala, Rosa e Moniellen. Obrigado pela ótima companhia, amizade, almoços intermináveis e manter a nossa “dispensa” sempre abastecida. Obrigado ao professor Italo de Oliveira, pela boa orientação, ótimos conselhos, e sobretudo, pela sua amizade.

Acima de todos, gostaria de agradecer aos meus pais que sempre são o meu maior suporte e motivação. Gostaria de agradecer a minha irmã Andréa, pelo companheirismo e carinho. E aos meus amigos e irmãos de longa data.

RESUMO

Neste trabalho, estudamos as propriedades de gases quânticos não interagentes em uma rede de Apolônio. Utilizando o modelo *tight-binding* para construir o Hamiltoniano do sistema, o espectro de energia e a densidade de estados foram calculados. Devido às características fractais da rede de Apolônio, a estrutura de bandas de energia apresenta uma distribuição multifractal. A partir do espectro de energia, as propriedades termodinâmicas de gases quânticos são estudadas. Os resultados obtidos mostram que a estrutura multifractal do espectro de energia afeta o comportamento de férmions e bósons em baixas temperaturas. No caso em particular do gás ideal de bósons, é mostrado a existência de uma condensação de Bose-Einstein, com as características de uma transição de segunda ordem.

Palavras-chave: Rede de Apolônio. Fractais. Transições de Fase. Termodinâmica.

ABSTRACT

In this work, we have studied the properties of non-interacting quantum gases in the Apollonian network. By using the tight binding approach to compute the hamiltonian of the system, the energy spectrum and the density of states are computed. Due to the fractal characteristics of the Apollonian network, the structure of the energy bands presents a multifractal distribution. From the energy spectrum, the thermodynamic properties of non-interacting quantum gases are studied. Our results show that the multifractal structure of the energy spectrum affects the behavior of fermions and bosons at low temperatures. In the particular case of the ideal gas of bosons, it is shown the existence of a Bose-Einstein condensation, with characteristics of a second order phase transition.

Keywords: Apollonian Network. Fractals. Phase Transitions. Thermodynamics.

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Gases quânticos	14
1.1.1	Férmions	14
1.1.2	Bósons	17
1.2	Cristais e Quasicristais	20
1.2.1	Sólidos Cristalinos	20
1.2.2	Sistemas Amorfos	21
1.2.3	Quasicristais	22
1.3	Redes complexas e Estruturas Aperiódicas	24
1.3.1	Grafos	25
2	Gases quânticos	31
2.1	Introdução	31
2.2	Simetria - Férmions e Bósons	31
2.2.1	Mecânica estatísticas de baixa temperatura	33
2.3	Gás ideal de Fermi	34
2.3.1	Introdução	34
2.3.2	Fenômenos Quânticos com Férmions	34
2.3.3	Descrição Estatística de Férmions	35
2.3.4	Gás real de Fermi	45
2.3.5	Efeito da topologia nas propriedades do gás	45
2.4	Gás de Bósons	47
2.4.1	Introdução	47
2.4.2	Experimentos	48
2.4.3	Termodinâmica	49
2.4.4	Condensação de Bose-Einstein	51
2.4.5	Gás real de Bose	56
2.4.6	Efeito da topologia nas propriedades do gás de Bose	56
2.5	Gases quânticos em uma rede de Apolônio - Métodos utilizados	59
2.5.1	Geração da rede de Apolônio	59
2.5.2	Cálculo do espectro de energias	60
3	Resultados	63
3.1	Espectro de energia da rede de Apolônio	63
3.2	Gás de elétrons em uma rede de Apolônio	64
3.3	Gás de bósons em uma rede de Apolônio	66
3.3.1	Expoentes críticos	71
4	Conclusão	75

Lista de Figuras

1	Quebra da degenerescência dos níveis de energia decorrente da superposição das funções de onda de átomos idênticos. $\Delta\varepsilon$ representa o deslocamento dos níveis de energia do sistema formado pelos dois átomos. . .	15
2	Estruturas de banda observadas em sólidos.	15
3	Diagrama de fases do 3He	16
4	O calor específico no modelo de Einstein é exponencial para baixas temperaturas, diferente do modelo de Debye.	19
5	Diagrama de fases do 4He	19
6	(a) Célula unitária da rede cúbica de corpo centrado e (b) a respectiva célula primitiva de Wigner-Seitz. (c) Célula unitária da rede cúbica de faces centradas e (d) a respectiva célula primitiva de Wigner-Seitz.	21
7	(a) Feixe de elétrons sendo difratado por uma amostra de cristal. (b) Padrão de difração de elétrons de um cristal.	23
8	Padrão de difração com simetria de rotação de grau dez observado por Dan Shechtman em 1984.	23
9	Padrão de difração de elétrons de um liga metálica quasicristalina de alumínio, níquel e cobalto.	24
10	Modelo de uma estrutura formada por decágonos orientados na mesma direção, mas sem ordem posicional periódica.	24
11	O número de conexões de uma rede livre de escala segue um lei de potência.	26
12	(a) Rede aleatória - os sítios têm a mesma conectividade em média. (b) Rede livre de escala - alguns sítios têm uma conectividade maior que os demais.	27
13	(a) Formação da rede de Apolônio através do preenchimento do espaço com discos. (b) Rede de Apolônio.	28
14	Temperatura de transição em função do número de sítios de uma rede de Apolônio de spins com interação ferromagnética. α é um parâmetro que regula o decaimento da interação com a distância entre sítios. Note que a temperatura de transição diverge com o número de sítios.	28
15	Calor específico por elétron como função da temperatura em uma rede de Apolônio com $n = 8$ gerações e diferentes preenchimentos de banda $N_e/N = 1/4, 1/8$ e $1/16$. Note o surgimento de oscilações log-periódicas no limite em que $N_e/N \rightarrow 0$	29

16	Fração de partículas N_0/N_p no estado fundamental como função da temperatura para redes de Apolônio com diferentes números de gerações: $g = 6$ (linha sólida), $g = 7$ (linha pontilhada), $g = 8$ (linha tracejada) e $g = 9$ (linha pontilhada-tracejada). Aqui o número de partículas é $N_p/N = 1/2$. Em detalhe, é mostrada a dependência da temperatura de transição, T_c , com o número de sítios da rede, N . A linha tracejada mostra que T_c diverge com $N^{1/3}$	29
17	Número de ocupação média dos estados de energia para um sistema de partículas não interagentes: Curva 1 para férmions, curva 2 para bósons e curva 3 para um gás ideal clássico.	37
18	função $f_\nu(z)$ diferentes valores de ν	40
19	Distribuição de Fermi para $T = 0$, onde todas as partículas têm energia menor ou igual à μ_0 . Para T não muito maior que zero, as partículas que ocupam níveis no intervalo da ordem de $k_B T$, abaixo da energia de Fermi, são excitadas para um intervalo de energia da ordem de $k_B T$, acima da energia de Fermi.	42
20	Calor específico de um gás ideal de Fermi.	44
21	Raio da nuvem de átomos de ${}^6\text{Li}$, aprisionados, normalizada pelo raio de Fermi, em função da temperatura, onde R_F é o raio da nuvem na temperatura de Fermi. Os círculos abertos são os dados experimentais obtidos por Truscott e colaboradores. A linha contínua é o comportamento previsto para o gás ideal de Fermi e a linha tracejada é o comportamento do gás ideal Clássico.	46
22	Calor específico do hélio-4 líquido obtido experimentalmente por Keesom em 1927.	48
23	$g_\nu(z)$ em função de z , para valores diferentes de ν . Note que $g_\nu(z)$ diverge para $\nu \geq 1$ e $z = 1$	50
24	Frações da fase normal (curva 1) e da fase condensada (curva 2) em um gás ideal de Bose como função da temperatura.	52
25	Fugacidade de um gás ideal de Bose em função de (ν/λ^3)	53
26	Pressão em função da temperatura para um gás de bósons não interagentes.	54
27	Calor específico de um gás ideal de Bose em função da temperatura.	55
28	Estágios da formação de um condensado de Bose-Einstein observado em laboratório por Cornell e colaboradores. A escala de cores indica a distribuição de velocidades das partículas. Quanto mais próximo do branco, menor a velocidade das partículas. Na figura (A), vemos a distribuição de velocidades no momento da formação do condensado. A medida que a temperatura abaixa, temos as distribuições de velocidades em (B), onde podemos ver o início da formação do condensado, e finalmente em (C) vemos a distribuição de velocidades de um condensado de Bose-Einstein.	57
29	(a) Densidade de estados do mapa logístico e (b) Densidade de estado do mapa circular.	58
30	Dependência térmica da fugacidade de um gás de bósons não interagentes com diferentes espectros multifractais. A linha sólida representa a fugacidade de gás com espectro obtido a partir do mapa circular. A linha tracejada corresponde a a fugacidade de gás cujo espectro de energias foi obtido a partir do mapa logístico.	58

31	(a) Preenchimento do espaço bidimensional por discos, correspondendo à solução clássica do problema proposto por Apolônio de Perga; (b) Rede de Apolônio com 3 gerações.	60
32	A rede do tipo estrela é formada por um sítio central do qual partem ligações para sítios periféricos.	62
33	Densidade de estados integrada para uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações. As linhas verticais de gráfico correspondem à existência de estados degenerados, e as horizontais são as lacunas de energia. No detalhe, a densidade de estados integrada escala com $E^{0,5}$	64
34	Diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado como função do número de sítios da rede rede Apolônio. As energias de <i>hopping</i> foram reescaladas pela média geométrica da conectividade dos sítios, dada pela equação 2.92. Note que $\Delta E_0 \propto N^{-1/2}$. No detalhe, a diferença de energia entre os níveis para o caso em que as energias de hopping não foram reescaladas, com $\Delta E_0 \propto N^{1/3}$	65
35	Calor específico por partícula de uma gás de elétrons não interagentes confinados em redes de Apolônio com diferentes gerações. O número de partículas foi fixado em $N_e/N = 1/2$	67
36	Calor específico em função da temperatura de um gás de férmions em rede de Apolônio com $n = 9$ gerações e diferentes valores de ocupação. É observado uma oscilação log-periódica, como esperado para sistemas cujo espectro de energias apresenta uma distribuição multifractal.	67
37	(a)Fugacidade em função da temperatura em redes de Apolônio com diferentes gerações e número de ocupação fixo em $N_p/N = 1/2$. Note que $z \rightarrow 1$ em $k_B T/t < 10^{-1}$, indicando a existência de uma condensação de Bose-Einstein. (b)Fugacidade em função da temperatura para uma rede de Apolônio com número de gerações $n = 9$ e diferentes números de ocupação.	69
38	(a)Fração de partículas no estado fundamental em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede de Apolônio: $n = 6$ (linha contínua), $n = 7$ (linha pontilhada), $n = 8$ (linha tracejada), $n = 9$ (linha traço-pontilhada). A densidade de partículas foi fixada em $N_p/N = 1/2$. Em (b), é apresentada a dependência de temperatura crítica com o tamanho da rede. Note que T_c não varia com o tamanho da rede.	69
39	Número de partículas no estado fundamental em função da temperatura em uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações, para diferentes valores de ocupação: $N_p/N = 2$ (linha sólida), $N_p/N = 1$ (linha pontilhada), $N_p/N = 1/2$ (linha tracejada), $N_p/N = 1/4$ (linha traço-pontilhada). A dependência da temperatura de transição com o número de ocupação é mostrada no detalhe.	70
40	(a) Calor específico por partícula em função da temperatura para um gás bósons não interagentes confinados em redes de Apolônio com diferentes números de gerações. O número de ocupação foi mantido em $N_p/N = 1/2$. No detalhe, a existência de uma descontinuidade na temperatura de ocorrência da condensação de Bose-Einstein. (b) Calor específico por partícula em função da temperatura para um gás bósons não interagentes confinados em uma rede de Apolônio com número de gerações $n = 9$	71

41	Funções de escala auxiliares $f(N, N', T)$ contra a temperatura usando $N = 9844$ e $N' = 3283(g = 8)$, $N' = 1096(g = 7)$ e $N' = 367(g = 6)$. Onde foi usada a densidade de partículas $N/N_p = 1/2$. O ponto de cruzamento indica a transição para condensado de Bose-Einstein em $k_B T_c/t = 0,1124$	72
42	(a) A fração de partículas condensadas, escala com o número de sítios N com o expoente $\beta/\nu \approx 0.36$ na temperatura crítica, (b) e $\frac{d}{dT}[\ln \rho_0(N, T)]$ escala com N com o expoente $1/\nu \approx 0.42$	73
43	Parte singular do calor específico na temperatura de transição, $C_v(N \rightarrow \infty, T_c) - C_v(N, T)$, contra o tamanho da rede, de onde podemos estimar o expoente crítico $\alpha/\nu \approx 0.26$	73

Introdução

É um fato que sistemas macroscópicos são compostos por um grande número de partículas. Geralmente conseguimos medir experimentalmente a média de algumas quantidades, tais como temperatura, volume e pressão. Essas quantidades são variáveis que dependem do comportamento conjunto de todas as partículas do sistema. Por exemplo, a pressão é resultado de um enorme número de colisões das moléculas de um gás nas paredes do recipiente que o contém. A posição, o momento, ou qualquer outra propriedade dinâmica de uma única partícula não pode ser observada. É evidente que é impossível acompanhar todas as partículas desse sistema, mas podemos usar a mecânica estatística para explorar as propriedades de sistemas com um grande número de partículas. Apesar de termos acesso a uma pequena quantidade de variáveis, as flutuações destas são extremamente pequenas em sistemas grandes [1, 2, 3].

As propriedades termodinâmicas de um conjunto de partículas tem três diferentes tipos de comportamento termodinâmico. Podem obedecer a estatística de Maxwell-Boltzmann, a de Fermi-Dirac ou a de Bose-Einstein. A estatística de Maxwell-Boltzmann é aplicada quando pensamos em partículas completamente distinguíveis. No contexto de Maxwell-Boltzmann, onde as partículas são consideradas clássicas, podemos identificar e descrever a trajetória de duas partículas, antes e depois de uma colisão. Desta maneira, o estado físico do sistema após uma colisão e sua evolução temporal são bem definidos. No contexto da Mecânica Quântica, a definição do estado físico do sistema e sua subsequente evolução temporal não podem mais ser descritos em termos da trajetória das partículas devido ao princípio da incerteza de Heisenberg. Como consequência, é necessário utilizar distribuições estatísticas que respeitem a indistinguibilidade das partículas. Como veremos, há duas distribuições estatísticas adequadas para descrição de um sistema formado por partículas indistinguíveis dentro do formalismo da Mecânica Quântica. Estas distribuições estão associadas à simetria dos estados físicos que formam o espaço de estados do sistema de partículas em estudo: a distribuição de Fermi-Dirac - para um sistema de partículas cujo o espaço de estados é formado por estados completamente antissimétricos; e a distribuição de Bose-Einstein - para um sistema de partículas cujo o espaço de estados é formado por estados completamente simétricos. Partículas distinguíveis da mesma espécie não existem na natureza de fato, mas podem ser tratadas teoricamente, segundo a estatística de Maxwell-Boltzmann ou estatística clássica [1, 3, 4].

1.1 Gases quânticos

A descrição da mecânica quântica de sistemas com partículas indistinguíveis requer simetrias definidas para as funções de onda do sistema quando os estados de duas partículas são trocados [4]. Isto ocorre porque a permutação dos estados das duas partículas não corresponde a um novo estado do sistema. Ao levar em conta os possíveis distintos estados acessíveis ao gás, as partículas devem ser consideradas indistinguíveis. Isso quer dizer que não importa qual partícula está em um determinado estado, mas somente quais os estados ocupados pelas partículas que formam o sistema. Neste caso, é necessário usar o postulado da simetrização para descrever o estado físico do sistema [4, 5]. O postulado determina que apenas os estados completamente simétricos ou completamente antissimétricos correspondem aos estados físicos de um sistema formado por partículas indistinguíveis. A ocupação de estados completamente simétricos ou completamente antissimétricos está intimamente ligada com o momento angular intrínseco (spin) das partículas em estudo. Em particular, se o spin das partículas é inteiro ou semi-inteiro.

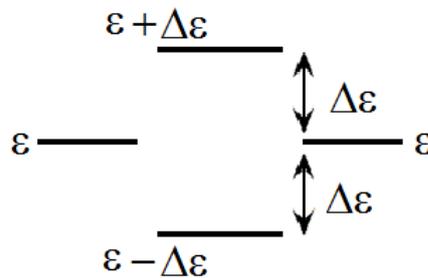
1.1.1 Férmions

Partículas com spin semi-inteiro são aquelas cujos autovalores do momento angular intrínseco são $1/2, 3/2, 5/2...$. Em um sistema formado por N partículas com esta característica, o postulado de simetrização requer que a função de onda que descreve o estado físico do sistema seja completamente antissimétrica quanto à permutação do estado de quaisquer partículas. Uma das consequências é que partículas indistinguíveis com spin semi-inteiro não podem ocupar o mesmo estado quântico. Isso é conhecido como o princípio da exclusão de Pauli. Partículas que satisfazem a condição de antissimetria obedecem à estatística de Fermi-Dirac e são chamadas de férmions. Exemplos de férmions são os elétrons, prótons, nêutrons e todas as partículas formadas por eles que apresentem spin semi-inteiro, tais como os átomos de ${}^3\text{He}$ [3].

Um fenômeno derivado diretamente da natureza fermiônica dos elétrons é a formação de bandas de energia em sólidos. Um átomo isolado tem seus elétrons distribuídos em níveis de energia discretos e bem definidos. Ao aproximarmos dois átomos idênticos, esses níveis de energia são perturbados devido à superposição das funções de onda dos elétrons em cada átomo. Uma vez que, pelo princípio da exclusão de Pauli, dois férmions não podem ocupar o mesmo estado quântico, a degenerescência dos níveis de energia é quebrada, como mostra a figura 1.

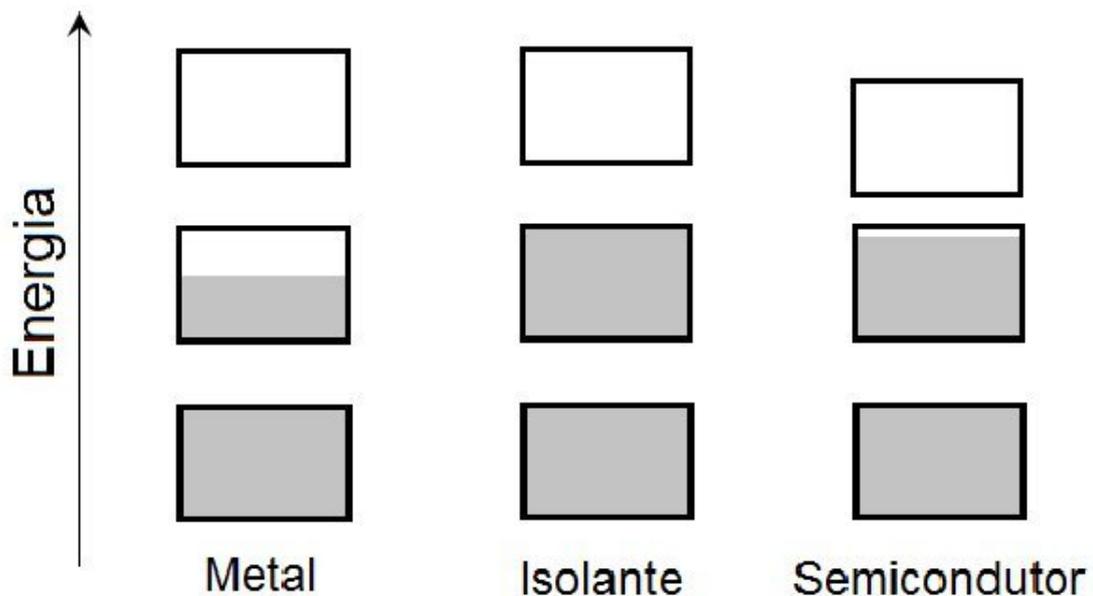
Em um meio sólido, onde a distância interatômica é pequena, a superposição das funções de onda dá origem a bandas de energias praticamente contínuas [1], como mostra a figura 2. As bandas são separadas por intervalos de energia que não apresentam orbitais eletrônicos correspondentes, sendo assim denominadas de lacunas de energias.

Figura 1: Quebra da degenerescência dos níveis de energia decorrente da superposição das funções de onda de átomos idênticos. $\Delta\varepsilon$ representa o deslocamento dos níveis de energia do sistema formado pelos dois átomos.



Fonte: Autor, 2012

Figura 2: Estruturas de banda observadas em sólidos.



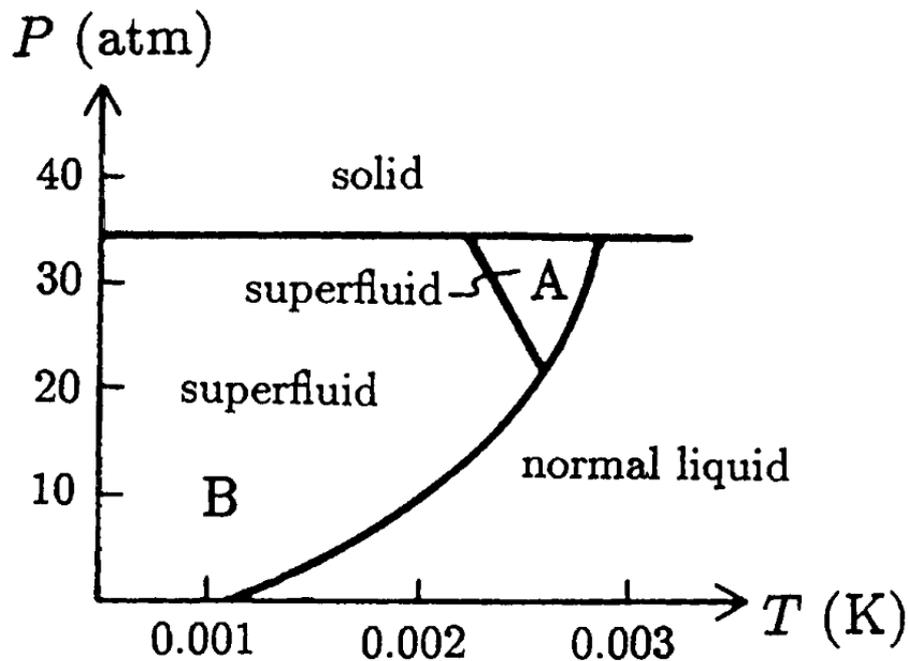
Fonte: Kittel, C., Introduction to the solid state, John Wiley & Sons, 2005

A estrutura de bandas de energia é o que determina as propriedades elétricas de um sólido cristalino. Dependendo de como as bandas de energia são ocupadas, um material pode ser considerado como isolante, metal ou semicondutor. Se os elétrons de valência preenchem completamente uma ou mais bandas, com todas as outras bandas completamente vazias, o material é dito isolante. Por outro lado, se os elétrons de valência não preenchem completamente uma banda, o material é chamado de metal. Nesta situação, um campo elétrico pode promover um elétron da banda de valência (semi-preenchida) para a banda de condução (vazia), dando assim origem a uma corrente elétrica. Quando a lacuna de energia entre uma banda preenchida e uma banda vazia é pequena, os elétrons da banda

cheia de um material considerado isolante a uma certa temperatura podem ser excitados termicamente. Alguns elétrons são então elevados para a banda de maior energia. Esse tipo de material é conhecido como semicondutor [1, 7, 6].

Outro fenômeno interessante da mecânica quântica é o fato de partículas poderem se agrupar para dar origem a outras partículas com características completamente diferentes. O átomo de hélio é um exemplo importante. Diferentes isótopos desse átomo obedecem a estatísticas diferentes. O isótopo ^3He , composto por dois prótons e um nêutron, é um férmion. Tanto prótons com nêutrons são férmions, de spin $1/2$. Tendo um número ímpar de partículas fermiônicas, o isótopo ^3He também é um férmion, pois tem spin resultante semi-inteiro [1, 8]. A descoberta deste isótopo raro ocorreu em 1933, com Oliphant [9] e seu diagrama de fases é mostrado na figura 3. Uma característica interessante do ^3He é que, mesmo sendo um férmion, pode apresentar superfluidez em baixas temperaturas, fenômeno geralmente atribuído a sistemas formados por partículas com momento angular intrínseco inteiro. Isso se deve à formação dos pares de Cooper, quando um par de férmions com momento linear e spins opostos apresentam uma interação efetiva atrativa, de forma que o par formado tenha um spin resultante nulo [10, 11, 19, 20]. Em alguns materiais cristalinos, a interação efetiva entre os elétrons que dá origem aos pares de Cooper é mediada pelas vibrações dos íons da rede cristalina, resultando na supercondutividade [21, 17]. Em contraste com o ^3He , o isótopo ^4He tem spin inteiro, e pode apresentar superfluidez e outros fenômenos sem a formação de pares de Cooper [1].

Figura 3: Diagrama de fases do ^3He



Fonte: L. E. Reichl. A Modern Course in Statistical Physics. John Wiley & Sons, 1998

O gás ideal de Fermi é um modelo que descreve um sistema composto por partículas

não interagentes que obedecem a estatística de Fermi-Dirac. Apesar de não considerar a interação entre os férmions, o gás ideal de Fermi tem se mostrado um modelo muito útil na descrição de sistemas físicos. Exemplos do seu êxito podem ser reconhecidos ao estudar o comportamento dos elétrons em estrelas anãs brancas e nêutrons em estrelas de nêutrons [23], bem como descrever o comportamento de elétrons se movendo na rede cristalina de metais e semicondutores através do conceito de ondas de Bloch [6]. Na descrição de sistemas onde a interação entre os férmions é relevante, o modelo deve ser complementado, utilizando a teoria de perturbação [24].

1.1.2 Bósons

No caso de um sistema formado por N partículas com spin inteiro, o postulado de simetrização estabelece que a função de onda que descreve o estado do sistema deve ser completamente simétrica sob qualquer permutação no estado das partículas. Em decorrência disso, partículas indistinguíveis com spin inteiro podem ocupar o mesmo estado de energia, sendo chamadas de bósons. De fato, sob determinadas condições uma fração significativa das partículas de um sistema pode ocupar o mesmo estado quântico, num fenômeno conhecido como condensação de Bose-Einstein [3, 25, 26]. Exemplos de bósons são os fótons, os glúons, e algumas excitações elementares, tais como os mágnons. No Modelo Padrão para a descrição das interações fundamentais da natureza, os bósons são responsáveis por mediar as interações: interação eletromagnética (fótons), interação nuclear forte (glúons), interação nuclear fraca (bósons W e Z) e interação gravitacional (bóson de Higgs) [27, 28]. O bóson de Higgs é uma partícula elementar prevista pelo modelo padrão, cuja existência poderia explicar a quebra de simetria espontânea da força eletrofraca [29, 30]. Partículas como o bóson de Higgs só podem ser detectados com energias acima de 1,4 TeV. Atualmente, essas energias podem ser geradas pelo LHC, ou Grande Colisor de Hádrons, por meio do qual espera-se detectar o bóson de Higgs.

Fótons e excitações elementares

Uma propriedade muito comum em todos os objetos é a capacidade de emitir radiação eletromagnética quando aquecidos. Esse fenômeno é conhecido como radiação térmica, assim chamado devido à relação entre a temperatura do objeto e a distribuição de frequências da radiação emitida. A determinação de como a distribuição de energia eletromagnética irradiada depende da temperatura da fonte foi um dos grandes problemas abordados pela comunidade científica no fim do século XIX. Dentro deste contexto, surgiu a ideia da radiação de corpo negro, descrito como um objeto irradiador ideal, que não reflete nenhum tipo de radiação que incida sobre ele, ou absorve toda a radiação incidente.

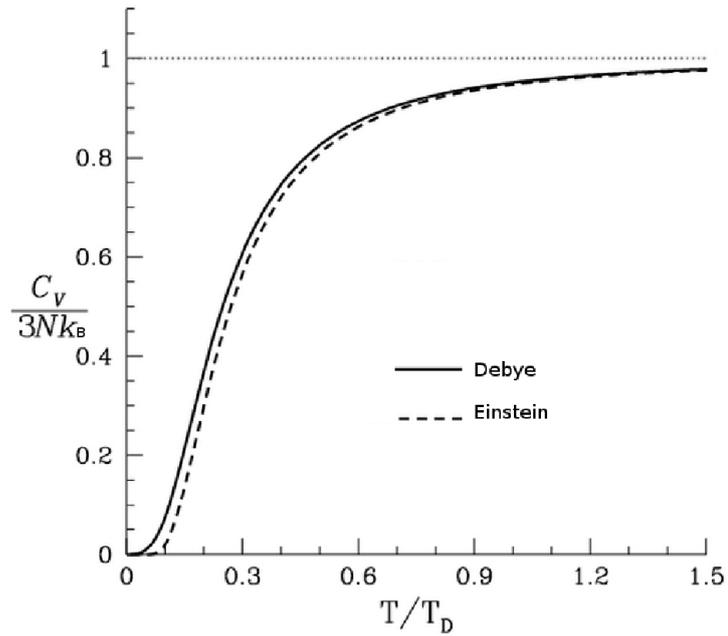
As primeiras investigações experimentais sobre a radiação de corpo negro revelaram que a função de distribuição espectral de um corpo negro apresentava um enorme dis-

crepância com as previsões teóricas da Física Clássica realizadas por Rayleigh e Jeans [1, 31]. Uma vez que a discrepância era mais acentuada na região do ultravioleta de espectro, este fato ficou conhecido como catástrofe do ultravioleta e marcou uma mudança na abordagem usada para descrever os fenômenos associados à emissão de radiação térmica. Os primeiros trabalhos que descreveram de forma satisfatória a emissão de radiação por um corpo negro foram realizados por Max Planck [1, 3, 31]. Assim como na abordagem clássica, ele considerou que os osciladores carregados (elétrons) existentes nas paredes sólidas de uma cavidade emitiam radiação. Contudo, Planck supôs que a energia média por modo de vibração dependia do comprimento de onda da radiação emitida, violando assim o teorema da equipartição da energia. Para tanto, Planck considerou que a energia dos osciladores era uma variável discreta, sendo proporcional à frequência dos osciladores. A compreensão de que energia dos osciladores na cavidade do corpo negro é discreta, assim como a da radiação emitida, só foi bem estabelecida a partir do trabalho de Einstein que explicou o efeito fotoelétrico. Em particular, Einstein estabeleceu que a quantização da energia é uma característica intrínseca da radiação eletromagnética. Mais especificamente, a radiação eletromagnética é composta de entidades discretas, indistinguíveis e sem massa chamadas de fótons, cuja energia é proporcional a frequência da radiação. Desta forma, numa radiação pode haver vários fótons no mesmo estado de energia, conseqüentemente, fótons são bósons. É importante salientar que fótons são bósons que não conservam seu número, podendo ser absorvidos ou gerados por um meio material.

Em um trabalho posterior, Einstein reconheceu que a quantização dos osciladores, observada originalmente em um corpo negro, influenciaria nas propriedades termodinâmicas dos sólidos. O modelo de Einstein, também chamado de sólido de Einstein, considera as moléculas como um conjunto de osciladores harmônicos independentes, mas que são fortemente ligados aos sítios da rede cristalina ao qual pertencem. Einstein considerou que cada uma dessas ligações são como molas, todas com a mesma constante elástica. Medidas feitas em sólidos reais mostram que o calor específico em altas temperaturas está de acordo com o modelo de Einstein, tendendo para zero à medida que a temperatura se aproxima do zero absoluto. Contudo, o modelo de Einstein prevê uma queda exponencial para o calor específico no limite de baixas temperaturas, o que não é observado experimentalmente [3, 1, 6], como exibido na figura 4 [18].

Esse modelo foi ajustado em 1912 por Debye, que considerou o sólido como sendo um sistema de osciladores harmônicos acoplados. O modelo de Debye apresentou um sistema que permitia a propagação de ondas transversais e longitudinais [1]. Essas ondas são conhecidas como fônons e são um exemplo de excitações elementares ou quasipartículas, e que obedecem a estatística de Bose-Einstein. Outros exemplos de excitações elementares com caráter bosônico são os plasmons, que são oscilações na densidade de elétrons em um plasma, e os mágnons, que são oscilações na densidade de spin eletrônico, ou ondas de

Figura 4: O calor específico no modelo de Einstein é exponencial para baixas temperaturas, diferente do modelo de Debye.

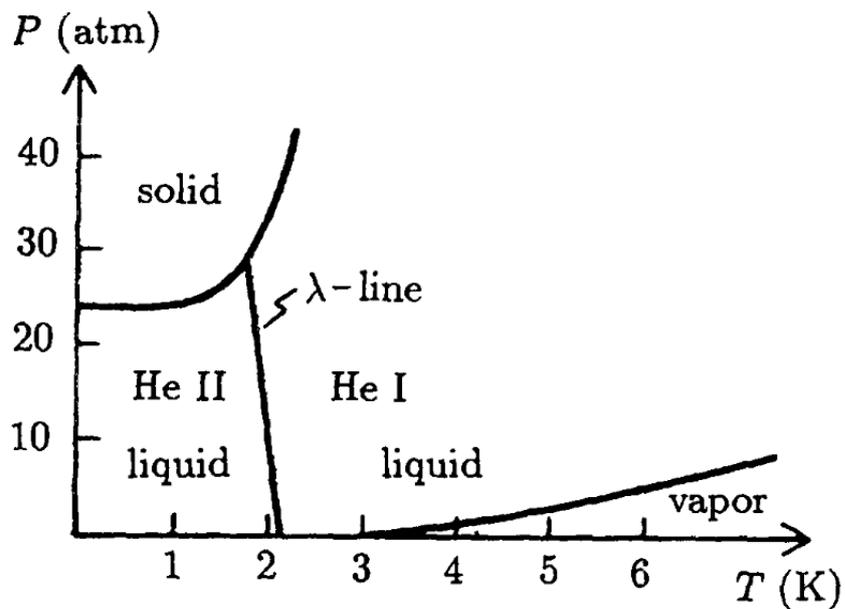


Fonte: Schroeder, D. V., Thermal physics. Addison Wesley Longman, 1999.

spin [32].

Superfluidez - ^4He

Figura 5: Diagrama de fases do ^4He .



Fonte: L. E. Reichl. A Modern Course in Statistical Physics. John Wiley & Sons, 1998.

Como foi dito anteriormente, existem dois isótopos estáveis do átomo de hélio: hélio 4 - com dois nêutrons no núcleo e spin nulo (${}^4\text{He}$); e o hélio 3 - com apenas um nêutron no núcleo e spin semi-inteiro (${}^3\text{He}$). A existência de átomos de ${}^4\text{He}$, o mais comum na natureza, foi demonstrada em 1871 através das suas linhas características do espectro solar [1, 12, 33, 34]. Mas só em 1895, uma amostra considerável de ${}^4\text{He}$ foi obtida por Ramsay, por meio do aquecimento do urânio [1, 12]. O primeiro a liquefazer o ${}^4\text{He}$ foi Kamerlingh Onnes em 1908. O ${}^4\text{He}$ apresenta o diagrama de fases mostrado na figura 5. Uma vez que o ${}^4\text{He}$ é um bóson, uma fração finita de seus átomos pode ocupar um mesmo estado quântico quando liquefeito. A transição do hélio-4 líquido para estado superfluido é similar a condensação de Bose-Einstein observada em um gás ideal de bósons. Esta transição já havia sido prevista por London e só foi observada experimentalmente uma década depois [34, 35]. O estado líquido do hélio surge apenas em baixas temperaturas, devido à fraca interação de Van der Waals entre os átomos de hélio. De fato, o ${}^4\text{He}$ se liquefaz a 4,2K em pressão atmosférica, enquanto ${}^3\text{He}$ se liquefaz a 3,2K [9, 12].

1.2 Cristais e Quasicristais

Na seção anterior, foi apresentado como o postulado de simetrização é fundamental na descrição das propriedades físicas de partículas e, conseqüentemente, da matéria condensada. Simetrias representam uma propriedade fundamental na natureza, de forma que o seu reconhecimento possibilita a solução de inúmeros problemas em toda física. As equações de Maxwell são um bom exemplo de como as simetrias têm um papel central na descrição dos fenômenos naturais. Soluções das equações de Maxwell, como as ondas eletromagnéticas, apresentam propriedades de simetria [36, 37], além de leis de conservação [38, 39]. A natureza está cheia de exemplos de simetrias, tais como a simetria bilateral do corpo humano, a simetria pentagonal em algumas flores, a simetria esférica dos astros, entre muitas outras. Os objetos naturais com as mais evidentes propriedades de simetria são, sem dúvida, os cristais [39]. Nas próximas seções descreveremos algumas propriedades de cristais e quasicristais, que serão úteis para compreensão do nosso trabalho.

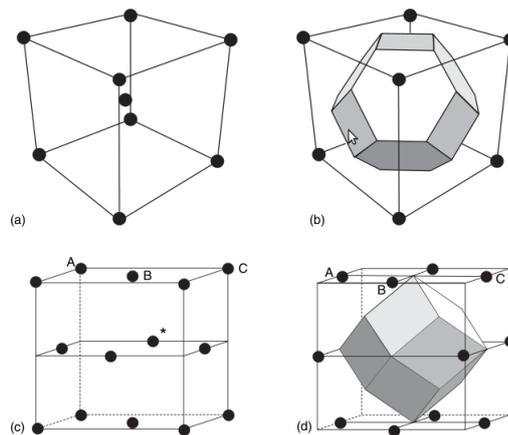
1.2.1 Sólidos Cristalinos

Na natureza, a maioria dos sólidos são cristalinos e caracterizam-se pelo fato de que as moléculas, átomos ou íons que os compõem se organizam em uma estrutura periódica tridimensional, denominada de rede cristalina. A configuração em que a rede cristalina se apresenta é determinante para as propriedades eletrônicas e termodinâmicas destes sistemas. De fato, desde a estrutura de bandas de energia, que determina se um material é condutor ou isolante, até os modos vibracionais permitidos na rede dependem da geometria e da composição da rede [6].

De maneira formal, a rede cristalina é descrita como uma rede de Bravais [6], onde cada elemento da rede (átomos ou moléculas, colocados nos vértices) tem sua posição definida por um vetor cujas componentes são múltiplos inteiros de vetores base da rede. Desta maneira, diferentes conjuntos de vetores formam redes com geometrias distintas. Dentre os tipos de geometria mais comuns destacam-se a rede cúbica, a rede hexagonal, a rede de corpo centrado e diamante.

Por conta da simetria apresentada pela rede cristalina, seu volume pode ser dividido em células idênticas que contenham apenas um sítio da rede. Estas células são conhecidas como células primitivas. A escolha mais comum de célula primitiva é a de Wigner-Seitz. Uma célula primitiva de Wigner-Seitz é construída a partir de planos colocados à meia distância entre dois sítios, como mostra a figura 6 [6].

Figura 6: (a) Célula unitária da rede cúbica de corpo centrado e (b) a respectiva célula primitiva de Wigner-Seitz. (c) Célula unitária da rede cúbica de faces centradas e (d) a respectiva célula primitiva de Wigner-Seitz.



Fonte: Ascroft, N. W. and Mermin, N D., Solid state physics. Brooks/Cole, 1976

O conjunto de todos os vetores, no espaço dos momentos, que dão origem às ondas planas com a periodicidade da rede de Bravais é conhecido como rede recíproca. A rede recíproca tem papel fundamental na determinação da estrutura de bandas de energia de um sólido cristalino. A célula primitiva de Wigner-Seitz da rede recíproca é chamada de primeira zona de Brillouin. A importância da primeira zona de Brillouin é resultado da descrição de ondas de Bloch em potenciais periódicos e da teoria de níveis eletrônicos em potenciais periódicos [6].

1.2.2 Sistemas Amorfo

A simetria translacional característica dos cristais introduz uma considerável simplificação nos tratamentos teóricos dos seus estados eletrônicos e vibracionais. Porém, a simetria dos cristais descreve apenas certos aspectos da natureza da estrutura dos sólidos, já que

contempla somente características associadas ao tipo de ordem de longo alcance apresentadas por estes sistemas. Em materiais onde nenhum tipo de periodicidade é encontrado, a ordem de curto alcance é o parâmetro mais importante na descrição de suas propriedades físicas [40]. Sólidos que não apresentam ordenamento translacional de longo alcance são chamados de amorfos.

Um material amorfo muito comum é o vidro, que apesar de não apresentar uma rede periódica, possui um comportamento mecânico similar ao dos sólidos cristalinos. O processo mais comum para a fabricação de vidros é resfriar um líquido viscoso rápido o bastante para evitar que a rede cristalina se forme [41]. Sólidos amorfos têm desempenhado um papel importante no desenvolvimento de dispositivos e nas telecomunicações. Neste contexto, as fibras ótica têm papel de destaque, uma vez que são produzidas a partir de materiais amorfos extremamente puros, mas que podem ter suas características ajustadas por meio do processo de dopagem [13]. Do ponto de vista mais cotidiano, plásticos, vidros metálicos e algumas ligas poliméricas são exemplos de sólidos amorfos amplamente utilizados devido ao seu magnetismo fraco e alta resistência à corrosão [42, 43].

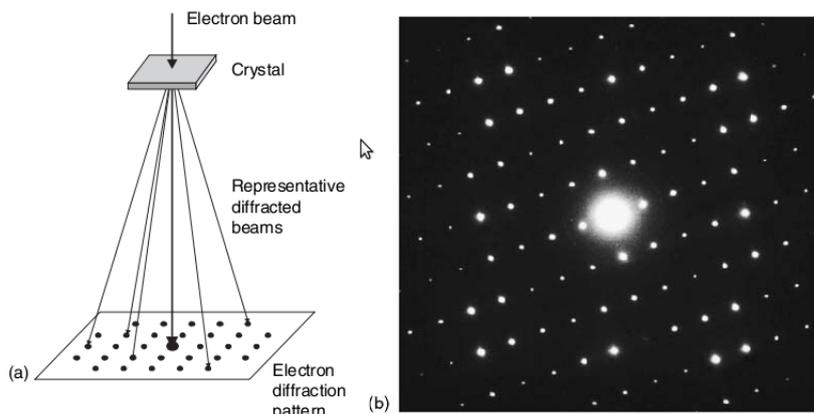
1.2.3 Quasicristais

O procedimento experimental mais utilizado para determinar as estruturas microscópicas de materiais sólidos é o estudo da difração sofrida por feixes de elétrons, de nêutrons ou de raios-X (figura 7). Esse método consiste em analisar o padrão de interferência gerado durante a difração, uma vez que este é característico da estrutura do material, de acordo com o espalhamento de Bragg. Por exemplo, um cristal perfeito apresenta um padrão de interferência característico, que é resultado da ordem translacional de longo alcance presente em sua estrutura. Teoricamente, um cristal é construído a partir de sua célula primitiva, transladando-a de modo consistente com os sete sistemas cristalinos e as quatorze redes de Bravais, de forma que nenhuma outra transformação pode ser feita, seja ela uma rotação ou reflexão. Essas regras implicam, segundo a cristalografia clássica, que nenhum cristal pode ter simetria de rotação de grau cinco ou superior a seis [44].

Em 1984, Dan Shechtman e colaboradores apresentaram padrões de interferência de uma liga metálica que exibiam simetria de rotação de grau dez [45], como mostra a figura 8. Na época, seus resultados levaram a muitas controversias, pois se acreditava ser impossível a existência de tais estruturas. Nas décadas seguintes, foram identificadas outras estruturas com simetrias de rotação de grau cinco, oito e doze (figuras 8 e 9), que seriam eventualmente proibidas pelas regras da cristalografia clássica [44]. Essas estruturas receberam o nome de cristais quasi-periódicos ou quasicristais. Em 2011, Dan Shechtman recebeu o prêmio Nobel pelos seus esforços na pesquisa dos quasicristais.

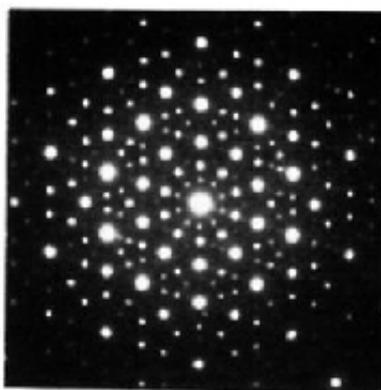
Várias ligas metálicas com estrutura quasicristalina são compostas por aglomerados icosaedrais orientados na mesma direção (figura 10). Um quasicristal é uma estrutura

Figura 7: (a) Feixe de elétrons sendo difratado por uma amostra de cristal. (b) Padrão de difração de elétrons de um cristal.



Fonte: Tilley, R. J. D., Crystals and Crystal Structures. John Wiley & Sons, 2006

Figura 8: Padrão de difração com simetria de rotação de grau dez observado por Dan Shechtman em 1984.

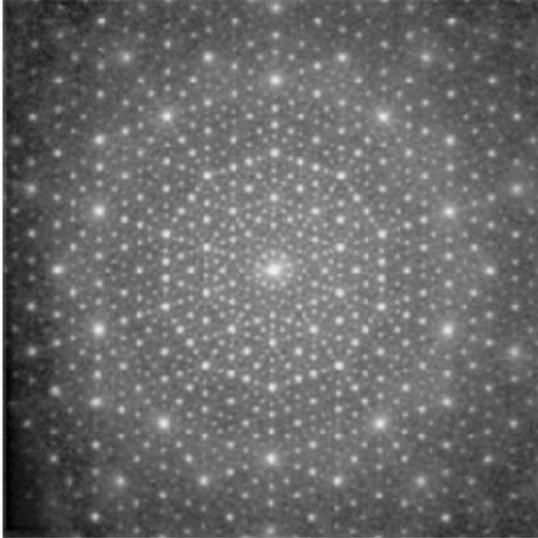


Fonte: Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J. W., Physical Review Letters, n.20, 1951, vol.53, 1984

que apresenta um ordenamento posicional e translacional de longo alcance. Contudo não há uma periodicidade na ordem translacional e a estrutura não apresenta um ponto de simetria rotacional [46, 47, 48]. Uma boa analogia dessa estrutura é tentar preencher um plano com pentágonos. É fácil preenchê-lo com triângulos, quadrados ou hexágonos, mas não é possível com um pentágono. O mesmo ocorre se tentarmos preencher um espaço tridimensional com icosaedros (poliedro com vinte faces) [44].

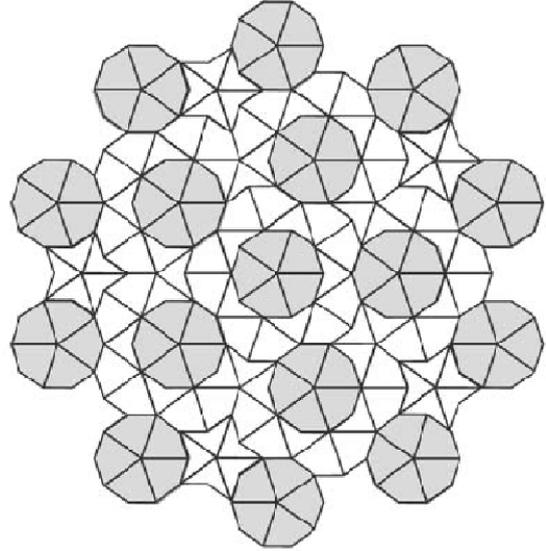
Uma característica comum em muitas ligas metálicas quasicristalinas é a presença de pseudo-lacunas na densidade de estados, próximo ao nível de Fermi [49]. Tais pseudo-lacunas dependem da ordem de curto alcance observada na estrutura dos quasicristais e são determinantes para a magnitude da condutividade elétrica destes sistemas [49]. A ordem de curto alcance desempenha um papel fundamental nas propriedades magnéticas de ligas metálicas quasicristalinas magnéticas [46, 49, 50].

Figura 9: Padrão de difração de elétrons de um liga metálica quasicristalina de alumínio, níquel e cobalto.



Fonte: Tilley, R. J. D., *Crystals and Crystal Structures*. John Wiley & Sons, 2006

Figura 10: Modelo de uma estrutura formada por decágonos orientados na mesma direção, mas sem ordem posicional periódica.



Fonte: Tilley, R. J. D., *Crystals and Crystal Structures*. John Wiley & Sons, 2006

Os efeitos do ordenamento quasiperiódico de longo alcance sobre as propriedades físicas de quasicristais só são observados em baixas temperaturas [44, 49]. Alguns modelos para o transporte eletrônico em quasicristais foram propostos [48]. Eles se baseiam em um modelo de estrutura hierárquica para a dependência da condutividade eletrônica com a temperatura de ligas icosaedrais [51]. Há também uma forte relação entre a condução térmica e a estrutura hierárquica dos quasicristais [51]. Em baixas temperaturas, os modos vibracionais da estrutura quasiperiódica podem apresentar uma lei de dispersão que tem uma dependência não-trivial com a temperatura [52]. Essas características abrem a possibilidade de aplicação dos quasicristais em dispositivos tecnológicos, que variam desde materiais semicondutores até isolantes térmicos [44, 48].

1.3 Redes complexas e Estruturas Aperiódicas

Como vimos nas últimas seções, grande parte do nosso conhecimento sobre as propriedades físico-químicas de sistemas sólidos está atrelada ao tipo de ordenamento e periodicidade observado nestes sistemas. Porém, avanços em alguns campos de pesquisa têm levado a uma mudança de paradigma durante as últimas décadas, trazendo o conceito de ordem sem periodicidade, necessário para descrever uma grande variedade de sistemas complexos.

Estruturas construídas a partir de diferentes blocos apresentam, muitas vezes, uma

ordem aperiódica. Embora os quasicristais sejam um bom exemplo disso, estruturas aperiódicas são muito comuns na natureza [53, 40]. Erwin Schrödinger desenvolveu um modelo onde a molécula de DNA é considerada como uma cadeia aperiódica das bases nitrogenadas adenina, guanina, citosina e timina [54]. A partir de então, diferentes cadeias baseadas em sequências aperiódicas têm sido usadas na descrição das propriedades físicas do DNA e outros sistemas biológicos [53, 55, 56]. Entre as sequências aperiódicas mais utilizadas estão o conjunto de Cantor [57, 58], a série de Fibonacci [50] e a sequência de Rudin-Shapiro [55, 56]. As sequências aperiódicas têm sido ainda utilizadas na fabricação de estruturas multicamadas com propriedades ópticas e térmicas de interesse tecnológico [53].

1.3.1 Grafos

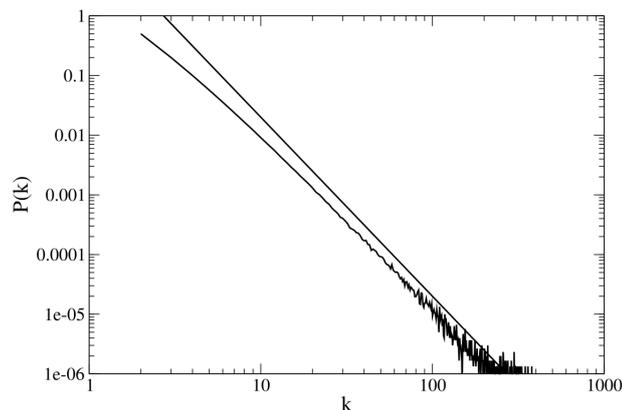
Um outro tipo de estrutura aperiódica usada no estudo de sistemas complexos são os grafos. Grafos são um conjunto de nós conectados por ligações, que formam uma rede complexa quando apresentam uma topologia não-trivial [59, 60]. Neste caso, as redes complexas formadas por grafos são sistemas aperiódicos com uma topologia complicada. Devido a sua vasta ocorrência em diversos sistemas naturais e artificiais, as redes complexas tem atraído grande interesse tanto pelo cunho acadêmico quanto pelo ponto de vista tecnológico [59, 60, 61]. Entre os principais exemplos de rede complexa estão as sequência de reações bioquímicas em organismos vivos [61, 62], redes sociais [61, 63], internet [61, 64], redes neurológicas [61, 64] e redes de colaboração científica [61, 65]. Na natureza, as redes complexas se apresentam basicamente como um conjunto de elementos que interagem de alguma forma. Neste caso, os elementos são os nós e as interações correspondem às ligações do grafo. Em diversos sistemas, além da interação entre os elementos ser a principal responsável por diferentes fenômenos, como magnetismo, supercondutividade e a condensação de Bose-Einstein, a topologia do sistema pode ser determinante no comportamento desses fenômenos, podendo alterar parâmetros como a temperatura de transição, propriedades de transporte ou até mesmo a ocorrência ou não de um fenômeno, como transições de fase [66].

Os primeiros a estudar os grafos aleatórios foram Paul Erdos e Alfréd Rényi, que criaram uma rede formada por um conjunto de N nós conectados aleatoriamente, com cada par de nós tendo uma probabilidade de conexão p . O grafo resultante apresentava cerca de $pN(N - 1)/2$ ligações distribuídas aleatoriamente, que por décadas foi o modelo base para descrever as redes complexas.

Algumas redes apresentam propriedades notáveis como invariância de escala e efeito de mundo pequeno. Este último, descreve o fato de que mesmo em uma rede muito grande, quaisquer dois pontos dela estão conectados por um curto caminho, com poucos nós e ligações entre eles [61, 66]. A manifestação mais conhecida dessa propriedade é o

conceito de "seis graus de separação", desenvolvido pelo psicólogo social Stanley Milgram em 1967 [67]. Milgram observou que um número médio de seis ligações é necessário para conectar dois indivíduos pertencentes a redes sociais dos EUA. Ainda dentro do contexto, Erdos e Rényi demonstraram que a distância média entre dois nós em um grafo aleatório escala com o logaritmo do número de nós [61]. A distância média entre nós é obtida a partir do grau de distribuição do grafo, que mede o número médio de conexões de um nó, refletindo assim a probabilidade de um nó fazer uma conexão. Outro modelo usado na descrição de redes complexas é o modelo de Barabási-Albert, usado para construir rede livres de escala através de ligações preferenciais (11). Neste caso, alguns sítios têm uma probabilidade maior de realizar conexões com outros sítios da rede [61]. Nesse modelo o grau de distribuição de conexões segue uma lei de potência do tipo $P(k) \sim ck^{-\gamma}$, onde $P(k)$ é a fração de nós com k conexões, c é uma constante de normalização e $\gamma > 0$. Essa característica implica que redes complexas com grande número de conexões são livres de escala [61, 59].

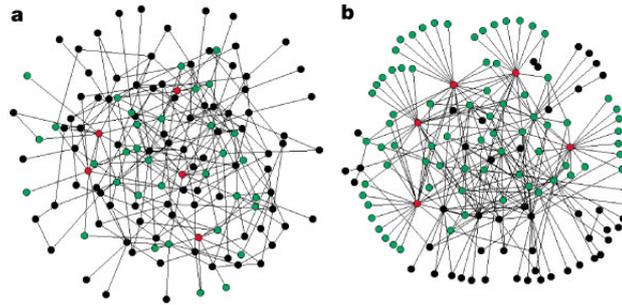
Figura 11: O número de conexões de uma rede livre de escala segue um lei de potência.



Fonte: Caldarelli, G. e Vespignani, A., Large scale structure and dynamics of complex networks. World Scientific, 2007

A maioria das redes complexas naturais apresentam estruturas cujas conexões são distribuídas de modo aleatório. Por outro lado, algumas redes complexas podem ser construídas segundo alguma regra, essas redes são chamadas de redes determinísticas. Recentemente, alguns modelos de redes complexas determinísticas têm conseguido reproduzir características e fenômenos semelhantes as que ocorrem nas redes complexas aleatórias. Essas redes complexas determinísticas apresentam, por exemplo, invariância de escala e efeito de mundo pequeno [61, 59, 66]. Outra característica é a presença de ordem hierárquica em algumas dessas redes (figura 12). Essas redes complexas hierárquicas apresentam uma ordem na distribuição de ligações [69]. Redes metabólicas [70], interações proteicas [71], redes de computadores [69, 61] e até redes sociais [61, 67, 69] apresentam características de redes hierárquicas.

Figura 12: (a) Rede aleatória - os sítios têm a mesma conectividade em média. (b) Rede livre de escala - alguns sítios têm uma conectividade maior que os demais.



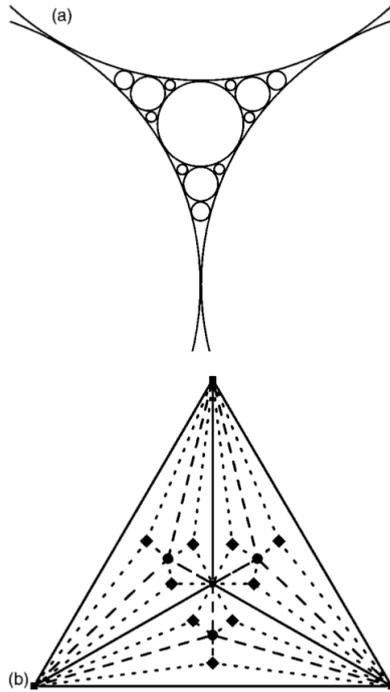
Fonte: Albert, Reká e Barabási, A. L., Nature, 378, vol.406, 2000

Uma rede determinística hierárquica de grande interesse é a rede de Apolônio, onde os nós das primeiras gerações possuem mais conexões que as gerações posteriores. Além de apresentarem ordem hierárquica, invariância de escala e efeito de mundo pequeno, as redes complexas determinísticas também possuem outras propriedades como preenchimento do espaço e a correspondência de grafos [72]. A construção de uma rede de Apolônio é descrita da seguinte forma. Em um plano, considere três discos de diâmetros iguais que se tocam tangencialmente e simultaneamente. O espaço entre os três discos iniciais é então preenchido por um quarto disco de diâmetro menor, que tangencia os três discos originais. Cada espaço restante é então recursivamente preenchido por outro disco, cujo diâmetro diminui à medida que as lacunas são preenchidas, como mostra a figura 13 (a). A rede de Apolônio é formada conectando os centros dos discos que se tocam, com uma linha reta que passa pelo ponto de encontro dos discos (figura ?? (b)) [73].

Recentemente, vários trabalhos têm sido dedicados ao estudo das propriedades termodinâmicas de diferentes sistemas numa rede de Apolônio, tais como sistemas magnéticos (modelo de Ising) [73, 74] e gases quânticos não interagentes [75, 76]. No caso do modelo de Ising em uma rede de Apolônio, foi observada a existência de um ordenamento magnético de longo alcance, tanto para um acoplamento entre spins que favorece o ordenamento ferromagnético, como para um acoplamento que favorece o ordenamento antiferromagnético [73]. No caso ferromagnético, foi observado que a temperatura de transição diverge com o tamanho do sistema, como mostra a figura 14.

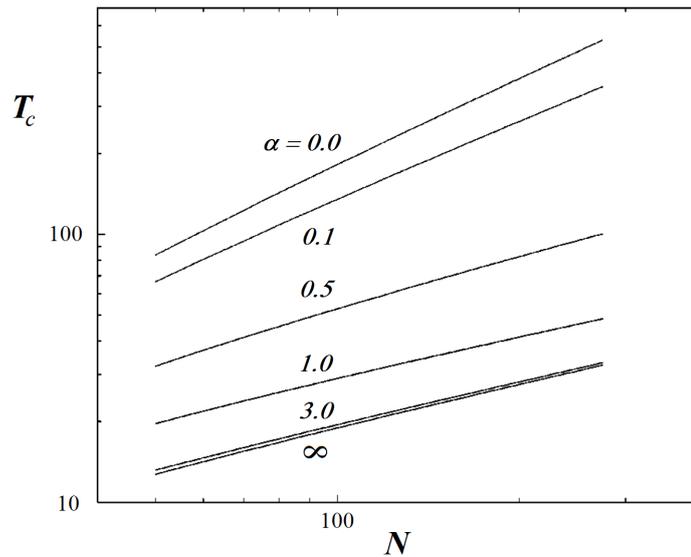
O estudo de gases quânticos ideais na rede Apolônio revelou que as propriedades termodinâmicas destes sistemas refletem diretamente a característica multifractal do espectro de energia deste tipo de rede hierárquica [75, 76]. Usando o método *tight-binding* para calcular a densidade de estados de um gás de férmions distribuídos na rede de Apolônio, foi observado que a natureza livre de escala da rede dá origem a um espectro de energias multifractal que apresenta degenerescência, lacunas e minibandas em diferentes escalas [75]. Como consequência, o comportamento termodinâmico do sistema revela uma forte assina-

Figura 13: (a) Formação da rede de Apolônio através do preenchimento do espaço com discos. (b) Rede de Apolônio.



Fonte: Andrade, R. F.S. and Herrmann, H. J., Physical Review E, 056131, vol.71, 2005

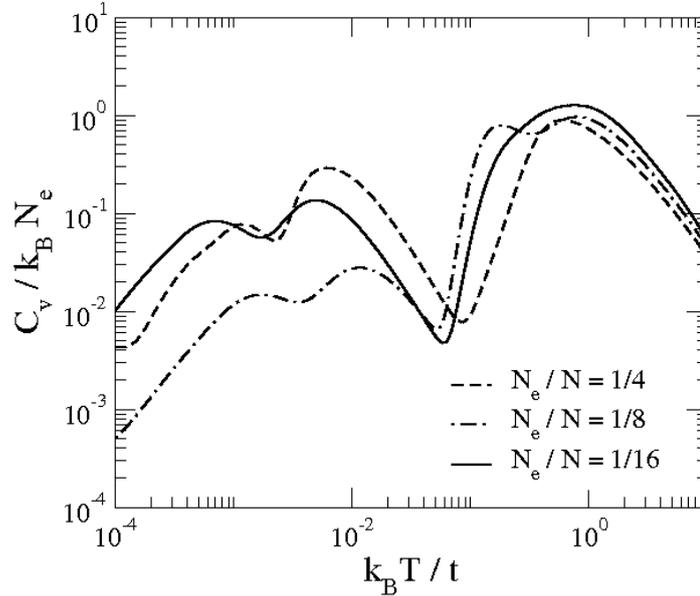
Figura 14: Temperatura de transição em função do número de sítios de uma rede de Apolônio de spins com interação ferromagnética. α é um parâmetro que regula o decaimento da interação com a distância entre sítios. Note que a temperatura de transição diverge com o número de sítios.



Fonte: Andrade, R. F.S. and Herrmann, H. J., Physical Review E, 056131, vol.71, 2005

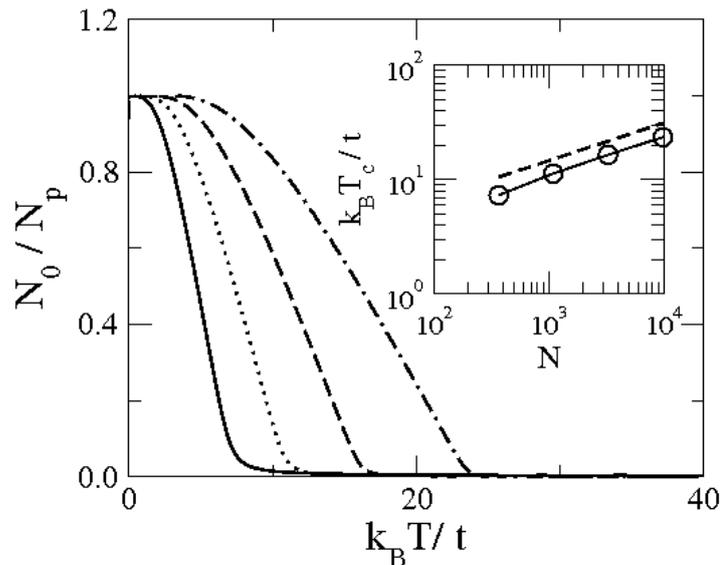
tura da estrutura fractal do espectro de energia, tais como as oscilações log-periódicas do calor específico, como mostra a figura 15. No caso de bósons não-interagentes distribuídos

Figura 15: Calor específico por elétron como função da temperatura em uma rede de Apolônio com $n = 8$ gerações e diferentes preenchimentos de banda $N_e/N = 1/4, 1/8$ e $1/16$. Note o surgimento de oscilações log-periódicas no limite em que $N_e/N \rightarrow 0$.



Fonte: de Oliveira, I. N., de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., J. S. Andrade, Jr e Albuquerque, E. L., Physical Review E, 016104, vol.79, 2009

Figura 16: Fração de partículas N_0/N_p no estado fundamental como função da temperatura para redes de Apolônio com diferentes números de gerações: $g = 6$ (linha sólida), $g = 7$ (linha pontilhada), $g = 8$ (linha tracejada) e $g = 9$ (linha pontilhada-tracejada). Aqui o número de partículas é $N_p/N = 1/2$. Em detalhe, é mostrada a dependência da temperatura de transição, T_c , com o número de sítios da rede, N . A linha tracejada mostra que T_c diverge com $N^{1/3}$.



Fonte: de Oliveira, I. N., de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., J. S. Andrade, Jr e Albuquerque, E. L., Physical Review B, 030104, vol.81, 2010

na rede de Apolônio, foi observado que a topologia da rede induz a uma condensação de Bose-Einstein [76]. Contudo, foi notado que a temperatura de transição cresce com o tamanho da rede, como mostra a figura 16, de maneira similar ao observado para o modelo de Ising nesta mesma rede [73]. Além disso, foi reportado que o calor específico apresenta uma discontinuidade na transição, com oscilações log-periódicas decorrentes da fragmentação da densidade de estados [76].

O objetivo do nosso trabalho é reestudar o comportamento termodinâmico de gases quânticos ideais em uma rede de Apolônio, introduzindo um reescalonamento na energia de hopping. A meta é determinar se este reescalonamento afeta as propriedades termodinâmicas tanto no caso de uma gás de elétrons não interagentes, como no caso de bósons não interagentes distribuídos numa rede livre de escala. Em particular, esperamos remover a divergência da temperatura de transição da condensação de Bose-Einstein.

Gases quânticos

2.1 Introdução

Em sistemas quânticos de muitos corpos, partículas da mesma espécie são consideradas indistinguíveis. A maioria dos sistemas físicos de interesse envolve a interação de um grande número de partículas, tais como elétrons em um sólido e moléculas em um gás. Dentro do contexto da Mecânica Quântica, mesmo partículas não interagentes podem exercer influência uma sobre outras, uma vez que a múltipla ocupação de um estado quântico depende da natureza das partículas. Como foi descrito no capítulo anterior, a depender da simetria da função de onda de um sistema de partículas, podemos classificar as partículas como férmions ou bósons. Neste capítulo será feita uma abordagem formal das propriedades termodinâmicas dos gases quânticos, assim como dos efeitos associados à topologia da rede onde as partículas são distribuídas.

2.2 Simetria - Férmions e Bósons

Partículas com as mesmas propriedades físicas, tais como massa, carga e spin, são consideradas como indistinguíveis, já que não é possível identificá-las a partir de suas trajetórias. Nesta seção serão apresentados os principais conceitos associados à indistinguibilidade das partículas, decorrentes do postulado de simetrização da Mecânica Quântica.

Considere um sistema contendo N partículas idênticas e não interagentes, confinadas em um volume V . Todas as partículas possuem coordenadas distintas, com r_i as coordenadas de posição e spin da i -ésima partícula. Assim, para um determinado estado, a função de onda do sistema é descrita em termos dessas coordenadas.

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (2.1)$$

O postulado da simetrização da Mecânica Quântica requer que a função de onda do sistema obedeça certas condições de simetria quanto a troca das coordenadas de quaisquer duas partículas. Para tanto, considere a probabilidade de encontrar cada i -ésima partícula em

um volume τ_i , definida por

$$|\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \dots \tau_N \quad (2.2)$$

Ao permutar as coordenadas de duas das partículas do sistema, a nova configuração não representa um novo estado devido à indistinguibilidade. Desta maneira, a densidade de probabilidade deve satisfazer a seguinte condição

$$|\Psi(r_1, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N)|^2 = |\Psi(r_1, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)|^2 \quad (2.3)$$

Isto nos diz que $|\Psi|^2$ não muda sob troca de dois conjuntos de variáveis de posição e spin na função de onda que representa o sistema. Podemos entender a simetria de troca de $|\Psi|^2$ de duas maneiras. Essas alternativas correspondem a propriedades de simetria mutuamente excludentes da própria função de onda. A troca de duas partículas satisfaz tanto a condição simétrica

$$\Psi(r_1, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = +\Psi(r_1, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N) \quad (2.4)$$

como a condição antissimétrica

$$\Psi(r_1, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = -\Psi(r_1, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N). \quad (2.5)$$

Uma maneira de melhor compreender as consequências dessas condições de simetria de troca é reescrever a função de onda do sistema como uma combinação linear das funções de onda das partículas constituintes. Considere que uma partícula do sistema possui a função de onda $\psi_k(r_i)$, onde k é o estado de energia de uma partícula. A função de onda $\Psi_{\alpha\beta\dots\xi}(r_1, r_2, \dots, r_N)$ do sistema com partículas nos estados $k = \alpha, \beta, \dots, \xi$ pode ser escrita na forma matricial

$$\Psi_{\alpha\beta\dots\xi}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(r_1) & \psi_\beta(r_1) & \cdots & \psi_\xi(r_1) \\ \psi_\alpha(r_2) & \psi_\beta(r_2) & \cdots & \psi_\xi(r_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_\alpha(r_N) & \psi_\beta(r_N) & \cdots & \psi_\xi(r_N) \end{vmatrix} \quad (2.6)$$

A função de onda da equação acima está escrita na forma do determinante de Slatter, adequado para o estudo de sistemas fermiônicos. Para um sistema contendo apenas dois férmions, a função de onda é dada portanto por

$$\Psi_{\alpha\beta}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(r_1) & \psi_\beta(r_1) \\ \psi_\alpha(r_2) & \psi_\beta(r_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(r_1)\psi_\beta(r_2) - \psi_\beta(r_1)\psi_\alpha(r_2)] \quad (2.7)$$

Ao trocar a ordem das partículas, obtém-se que $\Psi_{\alpha\beta}(r_2, r_1) = -\Psi_{\alpha\beta}(r_1, r_2)$. Desta forma, o sistema apresenta condição de troca antissimétrica. Uma implicação notável dessa simetria é o fato de que dois férmions não podem ocupar o mesmo estado quântico. Podemos perceber que se as duas partículas do sistema estiverem no mesmo estado quântico, a função de onda do sistema é nula

$$\Psi_{\alpha\alpha}^A(r_1, r_2) = 0 \quad (2.8)$$

Como veremos mais adiante, o resultado da equação 2.8 será determinante na descrição das propriedades físicas de partículas com spin semi-inteiro. Em particular, veremos que um sistema de partículas de spin semi-inteiro obedecerá a distribuição estatística de Fermi-Dirac.

Em um sistema de duas partículas em que a função de onda é completamente simétrica quanto a troca das variáveis de posição e spin das duas partículas, $\Psi_{\alpha\beta}(r_2, r_1) = +\Psi_{\alpha\beta}(r_1, r_2)$, temos que:

$$\Psi_{\alpha\alpha}^S(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(r_1)\psi_\beta(r_2) + \psi_\beta(r_1)\psi_\alpha(r_2)] \quad (2.9)$$

As partículas que satisfazem a equação 2.10 são chamadas de bósons e apresentam spin inteiro. Diferente do que ocorre com os férmions, note que dois bósons podem ocupar o mesmo estado, de forma que a função de onda em 2.10 é não nula. Como veremos, bósons obedecem a função de distribuição de Bose-Einstein.

2.2.1 Mecânica estatísticas de baixa temperatura

Na natureza, todas as partículas são classificadas como sendo férmions ou bósons. Porém, há circunstâncias onde os efeitos quânticos da indistinguibilidade das partículas são irrelevantes. Tais efeitos só ocorrem quando há a superposição da função de onda das duas partículas. Para isso, é preciso que elas estejam próximas, tal que a distância entre elas seja da ordem do comprimento de onda térmico de de Broglie [1].

O comprimento de onda térmico de de Broglie, ou simplesmente, comprimento de onda térmico, é uma quantidade que é inversamente proporcional ao momento das partículas de um gás. Podemos defini-lo como

$$\lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T} \right)^{1/2} \quad (2.10)$$

onde h é a constante de Planck, m a massa das partículas, k_B é a constante de Boltzmann, e T a temperatura.

Em um gás ideal, a distância média entre as partículas é $d = \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3}$. Uma vez que as partículas precisam estar próximas para que os efeitos quânticos se tornem relevantes, deve

haver uma concentração de partículas mínima para que isso ocorra. E como percebemos, λ é inversamente proporcional à temperatura. Então, na situação onde $d \gg \lambda$, temos o caso limite onde os efeitos quânticos não mais são percebidos. Nessa situação limite, tanto os gases que obedecem à estatística de Fermi-Dirac como os gases que obedecem à estatística de Bose-Einstein se comportam de maneira semelhante. Esse comportamento é característico de sistemas de partículas distinguíveis. Tais sistemas são chamados de clássicos, e obedecem a estatística de Maxwell-Boltzmann [3]. Na situação onde $d \ll \lambda$, as partículas estão próximas o bastante para que suas funções de onda se superponham, com o aparecimento dos efeitos quânticos. Assim, quando $d \ll \lambda$, há uma clara distinção entre o comportamento de férmions e bósons.

2.3 Gás ideal de Fermi

2.3.1 Introdução

O gás ideal de Fermi é um modelo usado para descrever sistemas de partículas não interagentes e que obedecem à estatística de Fermi-Dirac. Essa estatística determina a distribuição de energias dos férmions de um sistema em equilíbrio térmico. A distribuição é caracterizada pela densidade, temperatura e estados acessíveis ao sistema.

A característica mais relevante do gás ideal de Fermi é o princípio da exclusão de Pauli, formulado pelo físico austriaco Wolfgang Ernst Pauli em 1925. A exclusão de Pauli impede que quaisquer dois férmions idênticos ocupem o mesmo estado quântico. Isso implica que, mesmo a temperatura zero, a energia do gás é maior que a do estado fundamental. Por esta razão, a pressão do gás é maior que zero, mesmo a temperatura zero. O que não ocorre em um gás clássico, onde a pressão vai à zero com a temperatura. Essa é a chamada pressão de degenerescência, sendo responsável pela estabilidade de estrelas de nêutrons e anãs brancas, impedindo que a gravidade as faça colapsar [23].

O modelo de gás ideal de Fermi pode ser usado para estudar férmions em meios periódicos, como elétrons se movendo em uma rede cristalina de um metal ou semicondutor. Nestes casos, o método mais tradicional é o de ondas de Bloch. Como não há interação entre as partículas, o problema do gás ideal se reduz ao estudo de uma única partícula independente.

2.3.2 Fenômenos Quânticos com Férmions

Independente da natureza das partículas de um sistema, os efeitos quânticos só ficam evidentes em certas condições. A manifestação da natureza quântica da matéria pode ser notada quando a condição $N\lambda^3/V \ll 1$ é satisfeita. Uma das maneiras de satisfazer essa condição é resfriar o sistema em estudo até temperaturas próximas ao zero absoluto. Um

bom exemplo disso é observação da fase superfluida do He-3 [78], que ocorre a temperatura de 2.7×10^{-3} e a pressão de 34 atm. Mas recentemente, outros métodos de resfriamento, que alcançam temperaturas de alguns miléssimos de Kelvin, são aplicados na pesquisa de líquidos de Fermi, como são chamados os líquidos formados por férmions. O método de armadilha magnética tem sido usado para resfriar isótopos de lítio e de potássio a frações da temperatura de Fermi, a partir da qual o sistema entra em regime de gás degenerado [79]. Técnicas como essa permitiram a descoberta de mais de uma fase superfluida no He-3, que se distinguem pela organização dos pares de Cooper que são formados da interação entre as partículas [80]. É importante salientar que a fase superfluida se caracteriza pela ausência de viscosidade [81] e por uma condutividade térmica grande [82].

Outro fenômeno associado à redução da temperatura de um sistema fermiônico é a supercondutividade. Na maioria dos condutores, a resistividade elétrica diminui com a temperatura, atingindo um valor residual em temperaturas próximas a $0K$, devido à presença de impurezas e/ou defeitos na estrutura cristalina. Porém, a resistividade elétrica de alguns materiais cai abruptamente para zero à medida que a temperatura diminui. Por esta razão, estes materiais são chamados de supercondutores. O estado superconductor é observado em algumas ligas metálicas e cerâmicas e suas propriedades supercondutivas têm motivado inúmeras aplicações tecnológicas [83, 84, 85, 86].

2.3.3 Descrição Estatística de Férmions

Como foi descrito na seção anterior, é possível observar fenômenos macroscópicos associados à natureza quântica de sistemas fermiônicos. Dentro deste contexto, faz-se necessário usar uma abordagem estatística para descrever tais sistemas e suas propriedades termodinâmicas. Em particular, é preciso encontrar a distribuição de probabilidade para os estados de energia que maximiza a entropia do sistema [3].

Considere um sistema aberto, o qual pode trocar partículas e energia com um reservatório. O sistema está a uma temperatura T e possui um volume V . Como é possível haver troca de partículas entre o sistema e o reservatório, vamos estabelecer uma variável independente μ que regula o equilíbrio de partículas no sistema. Neste caso, vamos definir a função de *Grand-partição* como

$$\mathcal{L}(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} [z^N Q_N(V, T)] \quad , \quad (2.11)$$

onde $z = e^{\mu/k_B T}$, chamada de fugacidade. Aqui $Q_N(V, T)$ é a função de partição de um sistema fechado contendo N partículas:

$$Q_N(V, T) = \sum_{\{n_\varepsilon\}} (e^{-\beta \sum_\varepsilon n_\varepsilon \varepsilon}) \quad , \quad (2.12)$$

com $\beta = 1/k_B T$. n_ε é o número de partículas com energia ε e k_B é a constante de Boltzmann. Vale salientar que em um sistema fechado, n_ε tem que satisfazer a condição

$$N = \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon}. \quad (2.13)$$

Desta forma, podemos reescrever a função de *Grand*-partição como:

$$\mathcal{L}(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \left[\sum'_{\{n_{\varepsilon}\}} \prod_{\varepsilon} (z e^{-\beta \varepsilon})^{n_{\varepsilon}} \right]. \quad (2.14)$$

Aqui, os somatórios são feitos sobre todos os possíveis n_{ε} , condicionados a cada valor de N . No caso de férmions, o princípio de exclusão de Pauli restringe n_{ε} aos valores 0 ou 1. Por tanto,

$$\mathcal{L}(z, V, T) = \prod_{\varepsilon} (1 + z e^{-\beta \varepsilon}) \quad . \quad (2.15)$$

Para fazer a conexão entre a estatística e a termodinâmica do sistema *Grand*-canônico, introduzimos o q -potencial, definido da seguinte forma [24]:

$$q(z, V, T) \equiv \frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \mathcal{L}(z, V, T) \quad . \quad (2.16)$$

Ou ainda,

$$q(z, V, T) \equiv \frac{PV}{k_B T} = \sum_{\varepsilon} \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon}) \quad . \quad (2.17)$$

Como veremos a seguir, a partir do q -potencial poderemos descrever as propriedades termodinâmicas de um gás de ideal de Fermi. Embora este formalismo tenha sido empregado para um gás de férmions não-interagentes, é possível extendê-lo para um gás ideal de Bose ou para um gás ideal clássico. Em particular

$$q(z, V, T) \equiv \frac{PV}{k_B T} = \frac{1}{a} \sum_{\varepsilon} \ln(1 + a z e^{-\beta \varepsilon}) \quad (2.18)$$

onde $a = +1$ para o caso de um gás de Fermi, $a = -1$ para o caso de gás ideal de Bose e $a = 0$ para o ideal clássico.

2.2.3.1 Número de ocupação

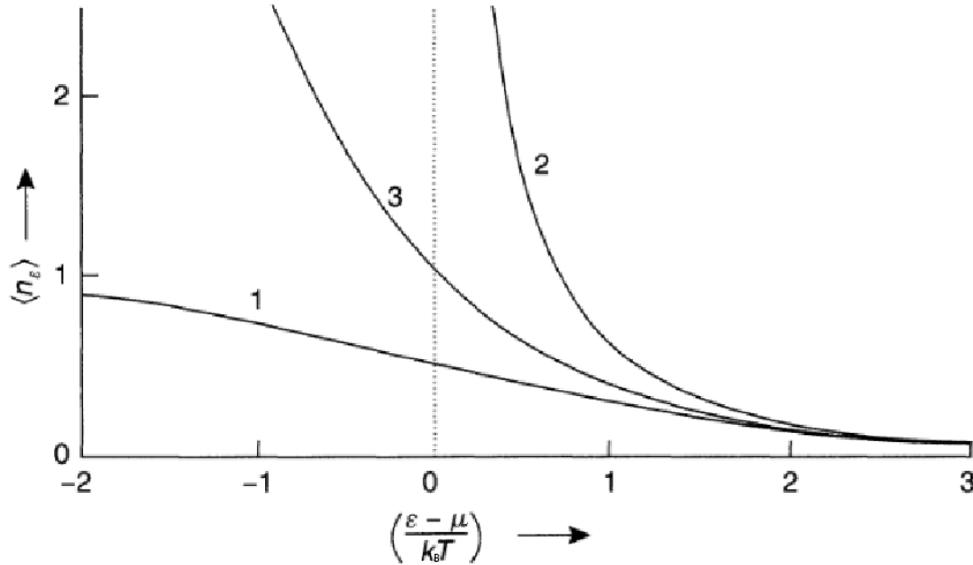
Sabemos de antemão que a diferença entre um gás de bósons e um gás de férmions está no número de partículas que podem ocupar um mesmo estado. Podemos calcular o número de ocupação média, ou seja, o número médio de partículas que ocupam um

determinado estado energia:

$$\langle n_\varepsilon \rangle \equiv -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial q}{\partial \varepsilon} \right)_{z,T} = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} + a} \quad (2.19)$$

Na figura 17, vemos que o gráfico de $\langle n_\varepsilon \rangle$ pela grandeza adimensional $x = (\varepsilon - \mu)/kT$ depende da natureza das partículas que formam o gás. Para um gás de férmions ($a = 1$), o número de ocupação n_ε admite os valores 0 ou 1. Se $\varepsilon < \mu$, o número de ocupação adquire seu valor máximo. Para um gás de bósons ($a = -1$), o potencial químico tem que ser menor que qualquer valor de ε , caso contrário teremos uma singularidade, como podemos perceber na equação 2.19. Quando temos que μ igual ao menor valor de ε , o número de ocupação desse nível de energia se torna infinito. Tal fenômeno é conhecido como condensação de Bose-Einstein. No caso clássico ($a = 0$), temos um crescimento exponencial à medida que a temperatura vai à zero, comportamento típico de um gás ideal clássico.

Figura 17: Número de ocupação média dos estados de energia para um sistema de partículas não interagentes: Curva 1 para férmions, curva 2 para bósons e curva 3 para um gás ideal clássico.



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996

Há uma grande diferença entre os três casos para valores pequenos de $(\varepsilon - \mu)/k_B T$. Porém, a medida que esse valor cresce, notamos claramente uma convergência no valor do número médio de ocupação. Para altas temperaturas, os gases quânticos se comportam como clássicos. Nesse contexto, a diferença entre a estatística quântica e a clássica deixa de ser relevante para valores de ε onde

$$\exp\{(\varepsilon - \mu)/k_B T\} \gg 1 \quad (2.20)$$

O que reduz os valores do número médio de ocupação para

$$\langle n_\varepsilon \rangle \ll 1 \quad . \quad (2.21)$$

Isto implica que há uma probabilidade insignificante de encontrar uma partícula em qualquer um dos estados acessíveis. A condição (2.20) também indica que μ deve ser negativo e de grande magnitude. Isto significa que a fugacidade é muito menor que 1.

2.2.3.2 Comportamento termodinâmico do gás ideal de Fermi

Como já notamos, quando a temperatura tende para zero, dependendo do tipo de partícula, os comportamentos dos gases ideais podem ser claramente distintos. Para o caso de um gás ideal de Fermi, as propriedades termodinâmicas podem ser obtidas a partir do logaritmo da função de *Grand-partição* 2.14

$$\frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \mathcal{L} = \sum_\varepsilon \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon}) \quad (2.22)$$

É importante ter em mente que o potencial químico corresponde à energia necessária para adicionar outra partícula ao sistema a volume constante. Porém, o princípio da exclusão de Pauli requer um estado de maior energia para cada partícula adicionada. Por essa razão, o número de partículas tem grande influência na termodinâmica de um gás de Fermi. Aqui μ pode assumir qualquer valor desde que $0 \leq z \leq \infty$. A fugacidade, $z = \exp(\mu/k_B T)$, pode ser determinada a partir do número de partículas do sistema

$$N(T, V, z) \equiv \sum_\varepsilon \langle n_\varepsilon \rangle = \sum_\varepsilon \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} + 1} \quad (2.23)$$

Para volumes grandes, os estados de energia são arbitrariamente próximos, o que nos permite reescrever os somatórios nas expressões anteriores como integrais:

$$\sum_\varepsilon \rightarrow \int D(\varepsilon) d\varepsilon \quad , \quad (2.24)$$

onde $D(\varepsilon)$ pode ser obtido através da soma sobre os vetores de onda κ no espaço de fase

$$\sum_\varepsilon \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \kappa = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad . \quad (2.25)$$

Aqui foi usada a relação $\varepsilon = \hbar^2 k_B^2 / (2m)$. Assim obtemos que a densidade de estado é

$$D(\varepsilon) = \gamma \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad (2.26)$$

Devido às propriedades de spin das partículas, é inserido um fator de degenerescência

$\gamma = 2s + 1$, onde s é spin. No caso mais comum de partícula fermiônica, o elétron, que tem spin $1/2$, a densidade de estados para um determinado nível de energia poderia ter valores 0, 1 ou 2. Ou seja, poderia haver mais de um elétron por nível de energia, mas desde que tenham orientação de spin diferentes, o que não consiste em uma violação de princípio de Pauli.

Fazendo as devidas substituições e uma integração por partes, reescrevemos as equações 2.22 e 2.23 nas formas

$$\frac{PV}{k_B T} = \gamma \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} \beta \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1} \quad (2.27)$$

$$N(T, V, z) = \gamma \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1}. \quad (2.28)$$

As integrais em ambas as equações podem ser escritas em uma forma geral, substituindo $x = \beta\varepsilon$. Definimos

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{z^{-1} e^x + 1}, \quad (2.29)$$

onde a função Gamma é definida como [5]

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^{z-1}. \quad (2.30)$$

Reescrevendo as equações 2.27 e 2.28 em termos da função $f_\nu(z)$,

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{\gamma}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \quad (2.31)$$

$$\frac{N}{V} = \frac{\gamma}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (2.32)$$

das quais podemos obter a equação de estado do gás de Fermi.

Para entender as equações acima, o primeiro passo é determinar o comportamento da função $f_\nu(z)$. Para valores de $z < 1$, podemos mostrar que a função $f_\nu(z)$ pode ser escrita como a série

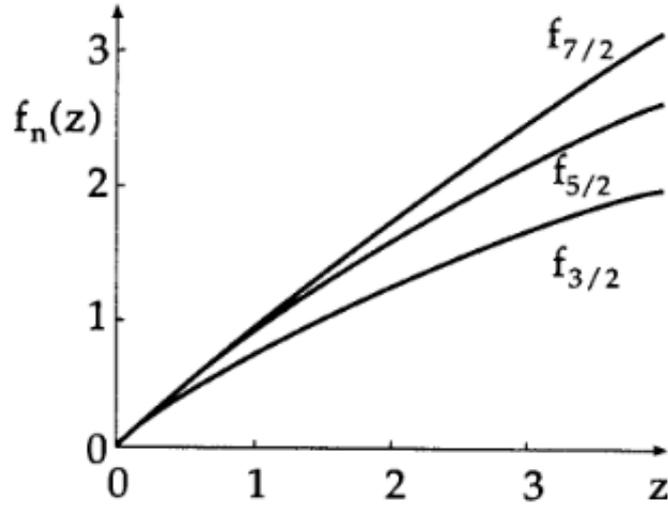
$$f_\nu(z) = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{z^j}{j^\nu} \quad (2.33)$$

Conhecendo o comportamento da função $f_\nu(z)$, descrito na figura 18, podemos calcular a energia interna do gás de Fermi. Podemos obter a relação entre as funções $f_\nu(z)$ e $f_{\nu-1}(z)$ a partir de 2.33,

$$z \frac{\partial}{\partial z} [f_\nu(z)] = f_{\nu-1}(z) \quad , \quad (2.34)$$

então,

Figura 18: função $f_\nu(z)$ diferentes valores de ν .



Fonte: Greinar, W., Neise, L., e Stöcker, H., Thermodynamics and Statistical Mechanics, second edition. Springer, 1997

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{L}|_{z,V} = \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}. \quad (2.35)$$

O que satisfaz a relação

$$P = \frac{2}{3}(U/V) \quad (2.36)$$

Derivando a energia interna em relação à T e usando a relação 2.34, podemos determinar o calor específico a volume constante, C_V .

$$\frac{C_V}{N k_B} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)} \quad (2.37)$$

A energia livre de Helmholtz, A , pode ser escrita facilmente usando $\mu = k_B T \ln z$

$$A \equiv N\mu - PV = N k_B T \left\{ \ln z - \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \right\} \quad (2.38)$$

e por fim a entropia

$$S \equiv \frac{U - A}{T} = N k_B \left\{ \frac{5}{2} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \ln z \right\} \quad (2.39)$$

No limite clássico, com $N\lambda^3/\gamma V \ll 1$, podemos ver que $f_\nu(z) \rightarrow 0$, assim como $z \rightarrow 0$. Ou seja, se a densidade do gás for muito baixa e a temperatura for suficientemente alta, $f_\nu(z) \simeq z$. Nessa situação o gás é altamente não degenerado. Assim, as expressões para as propriedades termodinâmicas do gás de Fermi de tornam

$$U = \frac{3}{2}Nk_B T, \quad P = Nk_B T/V, \quad C_V = \frac{3}{2}Nk_B, \quad (2.40)$$

$$A = Nk_B T \left\{ \ln \left(\frac{n\lambda^3}{\gamma} \right) - 1 \right\} \quad e \quad S = Nk_B \left\{ \frac{5}{2} - \ln \left(\frac{n\lambda^3}{\gamma} \right) \right\}. \quad (2.41)$$

Aqui consideramos a densidade de partículas do sistema $n = N/V$. Nessa aproximação, só usamos o primeiro termo da série em 2.33. Mas se z não for muito menor que 1, deveremos fazer uso de outros termos da série. Invertendo a série para obter uma expansão em série de potências em $(n\lambda^3/\gamma)$ na expressão 2.32 e substituindo em 2.31, a equação de estado pode ser obtida da expansão de Virial

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} a_l \left(\frac{\lambda^3 n}{\gamma} \right)^{l-1}, \quad (2.42)$$

onde a_l são os coeficientes de Virial:

$$\begin{aligned} a_1 &= 1 \\ a_2 &= -\frac{1}{4\sqrt{2}} \\ a_3 &= -\left(\frac{2}{9\sqrt{3}} - \frac{1}{8} \right) \\ a_4 &= -\left(\frac{3}{32} + \frac{5}{32\sqrt{2}} - \frac{1}{2\sqrt{6}} \right) \end{aligned} \quad (2.43)$$

A série 2.42 só pode ser usada se a densidade n e a temperatura T forem tais que $(n\lambda^3/\gamma) \ll 1$. Na situação onde $(n\lambda^3/\gamma)$ não é muito menor que 1, será necessário o uso de cálculo numérico. Porém, se o parâmetro $(n\lambda^3/\gamma) \gg 1$, as funções envolvidas podem ser expressas como uma expansão assintótica em potências de $(\ln z)^{-1}$.

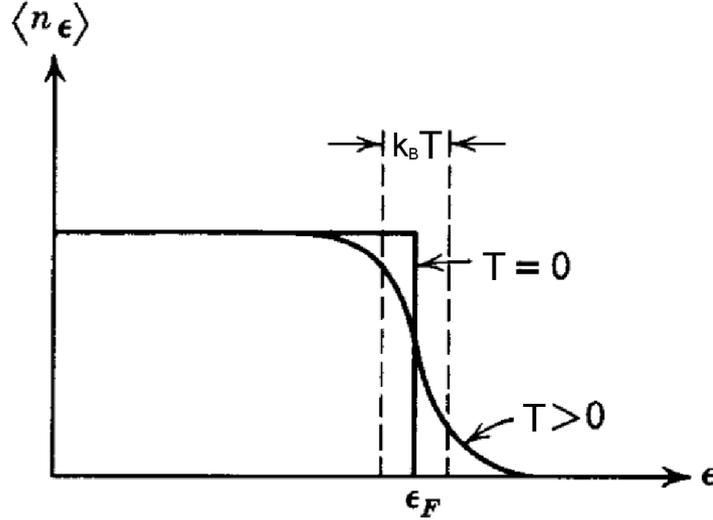
No caso limite $T \rightarrow 0$, que implica que $(n\lambda^3/\gamma) \rightarrow \infty$, o número de ocupação médio deve ser escrito como

$$\langle n_\varepsilon \rangle \equiv \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} = \begin{cases} 1 & \text{para } \varepsilon < \mu_0 \\ 0 & \text{para } \varepsilon > \mu_0 \end{cases} \quad (2.44)$$

onde μ_0 é o potencial químico do sistema em $T = 0$. Também podemos identificar μ como sendo a energia de Fermi ε_F , ou seja, a energia do nível mais alto ocupado em $T = 0$. A função $\langle n_\varepsilon \rangle$ pode ser aproximada, com grande precisão, a uma função degrau (figura 19).

Como podemos ver, a função $\langle n_\varepsilon \rangle$ adquire um valor unitário se $\varepsilon \leq \mu_0$, indo abruptamente à zero para $\varepsilon > \mu_0$. Isso significa que todos os estados com energia menor ou igual a μ_0 estão ocupados com apenas uma partícula, concordando com o princípio de Pauli, enquanto todos os estados com energia maior que μ_0 estão vazios em $T = 0$. Além disso, podemos calcular o número de partículas N e a energia do sistema $U = E_0$ em $T = 0$:

Figura 19: Distribuição de Fermi para $T = 0$, onde todas as partículas têm energia menor ou igual à μ_0 . Para T não muito maior que zero, as partículas que ocupam níveis no intervalo da ordem de $k_B T$, abaixo da energia de Fermi, são excitadas para um intervalo de energia da ordem de $k_B T$, acima da energia de Fermi



Fonte: Huang, K., Statistical Mechanics, second edition. John Wiley & Sons, 1987

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon \quad (2.45)$$

$$= \gamma V \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{4}{3} \epsilon_F^{3/2} \quad (2.46)$$

e

$$E_0 = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) \epsilon d\epsilon \quad (2.47)$$

$$= \gamma V \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{4}{5} \epsilon_F^{5/2} \quad (2.48)$$

Com isso podemos determinar a pressão do gás ideal de Fermi em $T = 0$:

$$P_0 = \frac{2}{3} (E_0/V) = \frac{2}{5} n \epsilon_F \quad (2.49)$$

Escrevendo ϵ_F em termos da densidade n , podemos reescrever a pressão em $T = 0$ como

$$P_0 = \left(\frac{6\pi^2}{\gamma} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{5m} n^{5/3} \propto n^{5/3} \quad (2.50)$$

Esse resultado mostra claramente um efeito quântico que surge devido ao princípio de Pauli. Mesmo na temperatura de zero absoluto, o gás ainda exerce uma pressão consi-

derável. Ou seja, mesmo em $T = 0$, as partículas possuem momento correspondente aos níveis com energia menor ou igual à energia de Fermi.

O aumento da temperatura do sistema só terá algum efeito significativo na distribuição de partículas do gás para os valores de ε tais que a quantidade $(\varepsilon - \mu)/k_B T$ seja da ordem de 1. Com isso conclui-se que a energia de excitação do sistema ocorre em uma estreita faixa em torno de $\varepsilon = \mu_0$ e tem largura da ordem de $k_B T$. A fração das partículas excitadas termicamente é da ordem de $k_B T/\varepsilon_F$. No entanto, as demais partículas permanecem nos estados não excitados, mesmo com o aumento da temperatura. Esse efeito é o responsável pelas diferenças entre o comportamento físico de sistemas de Fermi e sistemas clássicos.

Para o cálculo do calor específico e da entropia, é necessário que consideremos a situação onde T é baixa, porém finita. Nesse caso, onde $z \gg 1$, a função $f_\nu(z)$ deve ser escrita como expansão assintótica. Como primeira aproximação temos,

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\pi^{1/2}}(\ln z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8}(\ln z)^{-2} + \dots \right] , \quad (2.51)$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\pi^{1/2}}(\ln z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8}(\ln z)^{-2} + \dots \right] , \quad (2.52)$$

$$f_{1/2}(z) = \frac{2}{\pi^{1/2}}(\ln z)^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{24}(\ln z)^{-2} + \dots \right] , \quad (2.53)$$

para as funções $f_\nu(z)$ cujo ν tenha valores $\frac{5}{2}$, $\frac{3}{2}$ e $\frac{1}{2}$. Substituindo a expressão 2.52 na equação 2.32, temos

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi g}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (k_B T \ln z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8}(\ln z)^{-2} + \dots \right] . \quad (2.54)$$

Para valores muito pequenos de z , a aproximação em ordem zero resulta em

$$k_B T \ln z \equiv \mu \simeq \left(\frac{3N}{4\pi g V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} \quad (2.55)$$

Este resultado corresponde ao estado fundamental, com $\mu = \varepsilon_F$, como obtido na equação 2.46. Para a aproximação de primeira ordem

$$k_B T \ln z \equiv \mu \simeq \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right] \quad (2.56)$$

Com esse resultado em mente, usamos as equações 2.35, 2.51 e 2.52 para obter uma expressão para a energia interna em baixas temperaturas:

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (2.57)$$

A energia do gás de Fermi não se aproxima de zero com a temperatura. Ao invés disso, ela converge para um valor finito, que é a soma da energia de todos os estados ocupados. Além disso, podemos então, obter a pressão a partir da energia.

$$P = \frac{2U}{3V} = \frac{2}{5}n\varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (2.58)$$

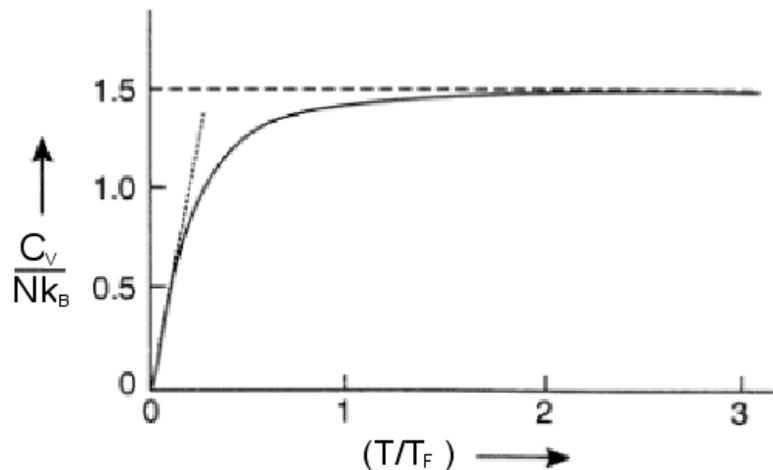
Notamos aqui que essa expressão está de acordo com a pressão obtida no limite em que $T \rightarrow 0$ (2.49).

Da mesma forma que a energia interna e a pressão de um gás ideal de Fermi foram obtidas, é possível calcular a dependência térmica do calor específico a volume constante, nas proximidades do zero absoluto:

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F} + \dots \quad (2.59)$$

Quando $k_B T \ll \varepsilon_F$ o calor específico tem uma dependência linear com a temperatura, com uma magnitude menor que o valor $(3/2)Nk_B$ dos sistemas clássicos. Isso se deve ao fato que abaixo da temperatura de Fermi, todos os estados abaixo da energia de Fermi estão ocupados. Desta maneira, apenas os elétrons que ocupam níveis próximos à superfície de Fermi podem ser excitados.

Figura 20: Calor específico de um gás ideal de Fermi.



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996

Obtida a pressão, podemos achar o energia livre de Helmholtz e então a entropia

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{\varepsilon_F} + \dots \quad (2.60)$$

Como a entropia vai à zero com a temperatura, esse resultado está de acordo com a

terceira lei da termodinâmica, com $S \rightarrow 0$ à medida que $T \rightarrow 0$.

2.3.4 Gás real de Fermi

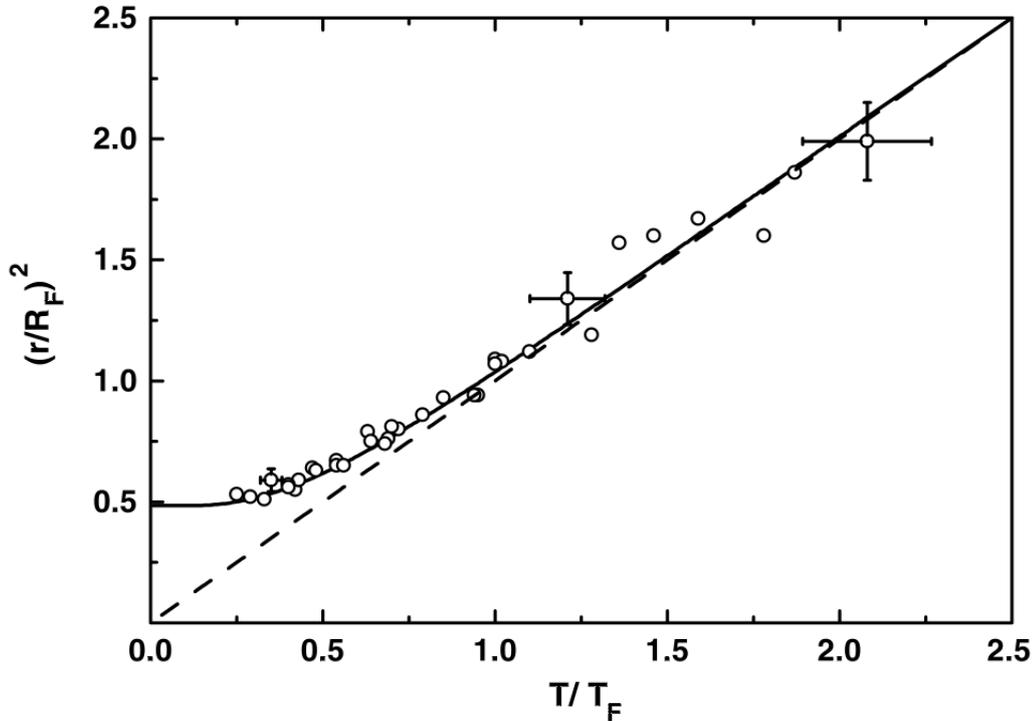
Um dos maiores desafios da física moderna é entender o comportamento de sistemas de muitas partículas fortemente interagentes. Na física de baixas temperaturas, onde os efeitos quânticos dominam, o comportamento do gás de Fermi diverge em certos aspectos do seu modelo ideal [20]. Um modelo usado para descrever sistemas fermiônicos interagentes é a teoria do líquido de Fermi, ou teoria de Landau. Esse modelo descreve as propriedades da maioria dos metais em baixas temperaturas. A teoria fenomenológica do líquido de Fermi foi introduzida pelo físico soviético Lev Davidovich Landau em 1956 [87], e mais tarde foi aperfeiçoada por Khalatnikov e Abrikosov [87], usando teoria de perturbação. O líquido de Fermi é um modelo utilizado para descrever um sistema de férmions interagentes. A teoria explica como algumas propriedades de um sistema de férmions interagentes, tais como calor específico, transição de fase e superfluidez, são bem distintas das de um gás ideal de Fermi, enquanto outras propriedades são similares, como degenerescência e condutividade. Exemplos importantes do sucesso da aplicação da teoria do líquido de Fermi são os elétrons nos metais [88] e no He-3 líquido [8].

Em 2001, Truscott e colaboradores, realizaram um experimento comprovando a existência da pressão de Fermi [89]. O experimento consistia em aprisionar um gás de isótopos de lítio, ${}^6\text{Li}$, e baixar a temperatura. Como mostra a figura 21, o raio da nuvem diminui à medida que a temperatura é reduzida, devido à redução da pressão, semelhante ao gás clássico. Porém, próximo da temperatura de Fermi, essa redução começa a desviar do comportamento clássico e segue assintoticamente para um valor finito. No gás clássico, o raio da nuvem vai à zero com a temperatura, como mostra a linha tracejada na figura 21. Mas no gás real de Fermi, isso não ocorre, devido a pressão de degenerescência, ou pressão de Fermi.

2.3.5 Efeito da topologia nas propriedades do gás

Em física do estado sólido, um dos pontos mais estudados é o comportamento de elétrons na presença de potenciais periódicos. Esse tipo de potencial é de grande interesse prático, pois está presente na estrutura cristalina da maioria dos sólidos. Além disso, a periodicidade da rede cristalina permite que uma grande variedade de métodos seja utilizada para descrever estes sistemas. De modo geral, podemos entender um cristal como sendo uma distribuição de íons em uma rede periódica, que por sua vez apresentam um potencial eletrostático periódico. Essa topologia regular afeta o comportamento dos elétrons. De acordo com o teorema de Bloch, na presença de um potencial periódico, a

Figura 21: Raio da núvem de átomos de ${}^6\text{Li}$, aprisionados, normalizada pelo raio de Fermi, em função da temperatura, onde R_F é o raio da núvem na temperatura de Fermi. Os círculos abertos são os dados experimentais obtidos por Truscott e colaboradores. A linha contínua é o comportamento previsto para o gás ideal de Fermi e a linha tracejada é o comportamento do gás ideal Clássic.



Fonte: Truscott, A. G., Strecker, K. E., McAlexander, W. I., Partridge, G. B., Hulet, R. G., Science, 2570, vol.291, 2001

função de onda (solução da equação de Schrödinger) do elétron é escrita como

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x) \quad (2.61)$$

onde x é a posição do elétron, k o vetor de onda e $u(x)$ é uma função que tem a periodicidade da rede. O teorema de Bloch é de grande importância na descrição da teoria de bandas de energia eletrônica[7].

Nos últimos anos, sistemas com topologias menos triviais têm chamado a atenção dos pesquisadores. Já à algum tempo, o estudos de transporte eletrônico em cadeias periódicas, aperiódicas e desordenadas vem motivando muitas pesquisas, inclusive em polímeros. Os efeitos das diversas topologias encontradas nesses sistemas sobre o transporte de elétrons possibilitaram o desenvolvimento de novos materiais [14]. Pesquisas com cadeias poliméricas aleatórias apresentam estados localizados e que possuem um número maior de estados que as cadeias periódicas [15, 16]. Como já explicitamos no capítulo 1, as propriedades de sistemas aperiódicos são governadas pela ordem de curto alcance, por isso a presença de mais estados localizados em sistemas aperiódicos [40].

O interesse em estudar estruturas com topologias mais complexas tem crescido ainda mais depois da descoberta dos quasicristais, estruturas que apresentam ordem translacional de longo alcance, mas não de curto alcance [46, 47, 48]. Os quasicristais apresentam propriedades de transporte eletrônico, transporte de calor e características mecânicas que surgem devido às características topológicas tais como estrutura hierárquica, invariância de escala e propriedades fractais [45, 49, 51, 52, 90].

Na natureza, algumas das estruturas mais comuns são as redes complexas. Eles apresentam topologias ainda mais complicadas que a dos quasicristais. Uma rede complexa que tem apresentado muitas propriedades que são comuns em quasicristais é a rede de Apolônio. Essa rede apresenta uma topologia com propriedades de mundo pequeno e invariância de escala. Essas propriedades interferem drasticamente no comportamento da estrutura de níveis eletrônicos, influenciando diretamente em propriedades termodinâmicas, como a energia de Fermi e as transições de fase [75, 76].

2.4 Gás de Bósons

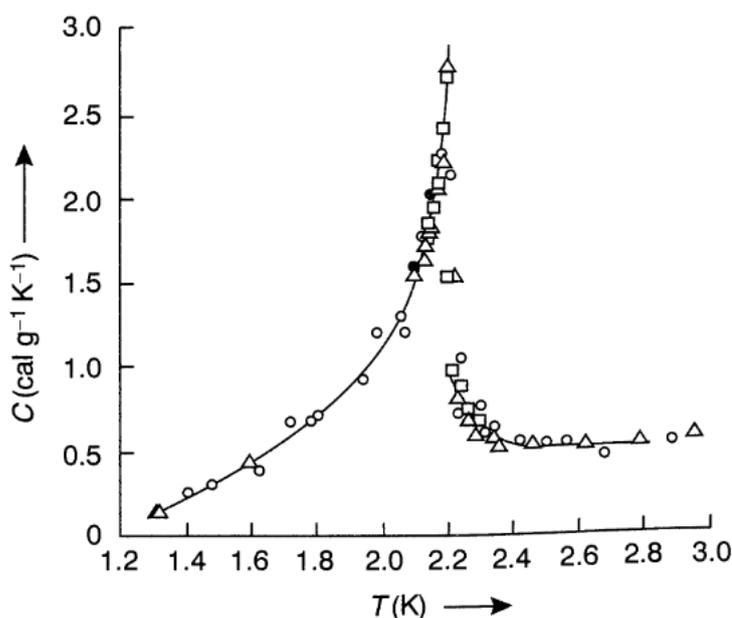
2.4.1 Introdução

Com o intuito de derivar o espectro de energia de fótons para o problema do corpo negro, Satyendranath Bose escreve, em 1924, um trabalho no qual usa um novo argumento estatístico. Incapaz de publicar o artigo, Bose o envia para Albert Einstein, que traduz para o alemão e o publica. Einstein, por sua vez, estendeu a ideia de Bose, que originalmente se restringia à estatística de fótons, para o caso de átomos não interagentes. O resultado foi a estatística de Bose-Einstein. A distribuição dos átomos em níveis de energia quantizados descrita por essa estatística apresentava propriedades bem peculiares. Muitas dessas propriedades, como superfluidez e supercondutividade, estão relacionadas ao fenômeno da condensação de Bose-Einstein. Esse fenômeno se caracteriza pela ocupação do estado fundamental por uma fração finita das partículas de um sistema bosônico. O condensado de Bose-Einstein é um fenômeno de natureza puramente quântica, assim como a supercondutividade e a superfluidez, mas que são evidentes em escala macroscópica. Os efeitos dessa distribuição são mais notados em baixas temperaturas. As primeiras evidências do comportamento bosônico surgiu com a liquefação do átomo de hélio e com os avanços na tecnologia de resfriamento, que permitiram que temperaturas cada vez mais baixas fossem alcançadas. Isso abriu a possibilidade para que Eric Cornell e Carl Wieman observassem pela primeira vez um condensado de Bose-Einstein em 1995 [25, 26].

2.4.2 Experimentos

No ano de 1938, F. London sugeriu que a transição de fase sofrida pelo Hélio-4, ao ser resfriado a cerca de $2,19K$, poderia ser uma manifestação da condensação de Bose-Einstein [91]. Como veremos a seguir, é possível usar a estatística de Bose-Einstein para estimar a temperatura de transição do hélio-4. Em particular, a temperatura obtida é de aproximadamente $3,13K$, muito próxima do valor observado por London. Outra medição importante referente à condensação de Bose-Einstein foi a do calor específico, realizada por Keesom, em 1927. Ele realizou medidas experimentais do calor específico do hélio-4 líquido, que levaram a descoberta das transições He I e He II. Na figura 2.7 é mostrada dependência do calor específico C_V com a temperatura, obtida obtida por Keesom [2]. A discontinuidade no calor específico revela a existência de duas fases distintas.

Figura 22: Calor específico do hélio-4 líquido obtido experimentalmente por Keesom em 1927.



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996.

Mais de meio século se passou desde as primeiras tentativas de se confirmar a existência do condensado de Bose-Einstein em fase gasosa. Em 1995, Eric Cornell e Carl Wieman finalmente conseguiram comprovar, criando o primeiro condensado em laboratório. Eles utilizaram técnicas que envolviam o uso de lasers e o aprisionamento magnético para resfriar um vapor diluído de rubídio-87 arrefecido a 170 nanokelvin [25, 26]. O condensado de Bose-Einstein é um fenômeno que ocorre em alguns sistemas compostos por bósons, onde fenômenos quânticos podem ser observados em escala macroscópica [1].

2.4.3 Termodinâmica

Assim como para um gás ideal de Fermi, o comportamento termodinâmico de um gás ideal de bósons pode ser obtido a partir do logaritmo da função de *Grand-partição*

$$\frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \mathcal{L} = - \sum_{\varepsilon} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) \quad (2.62)$$

e do número de partículas

$$N = \sum_{\varepsilon} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} \quad (2.63)$$

Da mesma forma como procedemos no caso do gás ideal de férmions, consideraremos que o volume é grande e que o espectro de energia é praticamente contínuo. Assim, podemos substituir o somatório em ε por uma integral, nos limites de zero até infinito. No entanto, faz-se necessária uma correção no cálculo da densidade de estados no limite em que o espectro de energia é contínuo. No limite do contínuo, a densidade de estados do nível $\varepsilon = 0$ é nula. Porém, isso não está correto, segundo a abordagem da mecânica quântica. O fato dos níveis de energia estarem muito próximos pode fazer com que essa correção pareça irrelevante, mas o nível $\varepsilon = 0$ tem um papel central nas propriedades de sistemas bosônicos em baixa temperatura.

Subtraindo o termo do estado fundamental $\varepsilon = 0$ da integral, temos que as expressões 2.62 e 2.63 são escritas respectivamente como

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \quad (2.64)$$

$$= \frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{z} e^{-\beta\varepsilon} - 1. \quad (2.65)$$

e

$$N = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} + \frac{z}{1 - z} \quad (2.66)$$

No limite clássico, onde $z \ll 1$, os termos acrescentados podem ser desprezados em ambas as expressões, pois cada um dos termos será da ordem de $1/N$. Mas se z se aproxima de 1, o termo $z/(1 - z)$, definido como o número de partículas N_0 no estado fundamental, se torna uma fração significativa de N . Mais especificamente, defini-se $N_0 = z/(1 - z)$, e portanto $z = N_0/(N_0 + 1)$. O termo $\ln(1 - z)$ em 2.65 é igual a $\ln(N_0 + 1)$, e multiplicando por V^{-1} , desaparece para $V \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$. Desprezar esse termo para $z \rightarrow 1$ está ligado ao fato de que a energia cinética das partículas no estado fundamental não contribui para a pressão total do gás.

Então, de forma similar ao tratamento dado ao gás ideal de Fermi, reescrevemos as

expressões 2.65 e 2.66 na forma

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{2\pi(2mk_B T)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty x^{1/2} \ln(1 - ze^{-x}) dx = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (2.67)$$

e

$$\frac{N}{V} = \frac{2\pi(2mk_B T)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{z^{-1}e^x - 1} + \frac{N_0}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{N_0}{V} \quad (2.68)$$

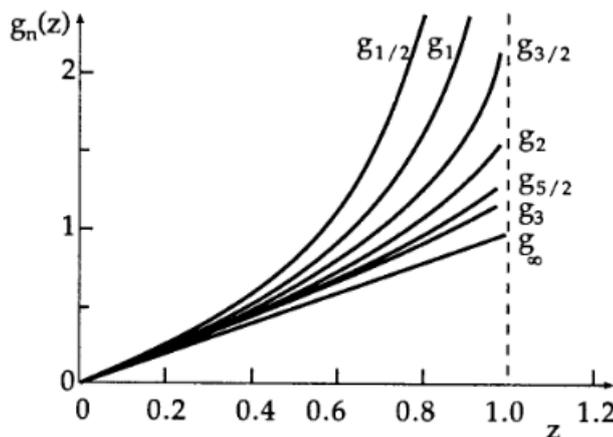
onde a função $g_\nu(z)$ é a função de Bose-Einstein, sendo definida da seguinte forma:

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{z^{-1}e^x - 1} = z + \frac{z^2}{2^\nu} + \frac{z^3}{3^\nu} + \dots \quad (2.69)$$

Assim como para a função $f_\nu(z)$, $x = \beta\varepsilon$ e a função $\Gamma(\nu)$ são definidos da mesma maneira. Com esses resultados, podemos obter a equação de estado do sistema apenas eliminando z .

A função $g_\nu(z)$ tende a zero no limite em que $z \rightarrow 0$. Por outro lado, no limite em que $z \rightarrow 1$, a convergência de $g_\nu(z)$ para um valor finito depende do valor de ν . Para $\nu \leq 1$, a função diverge em $z = 1$, mas converge para valores de $\nu > 1$. Mais especificamente, a função $g_\nu(z)$ assume a forma da função zeta de Riemann, $\zeta(n)$, quando $z = 1$ e $\nu > 1$. O comportamento da função $g_\nu(z)$ é mostrado na figura 23.

Figura 23: $g_\nu(z)$ em função de z , para valores diferentes de ν . Note que $g_\nu(z)$ diverge para $\nu \geq 1$ e $z = 1$.



Fonte: Greinar, W., Neise, L., e Stöcker, H., Thermodynamics and Statistical Mechanics, second edition. Springer, 1997.

A partir da função $g_\nu(z)$, é possível determinar algumas propriedades termodinâmicas do gás ideal de Bose. Vamos começar determinando a fugacidade em termos de N , V e T . Partindo da equação 2.68, temos

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z} = N_\varepsilon + N_0 \quad (2.70)$$

O termo N_ε representa o número de partículas com energia $\varepsilon > \varepsilon_0$, ou seja, partículas que ocupam os estados excitados. Como $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2)$, então $0 \leq g_{3/2}(z) \leq \zeta(3/2) = 2.621$ [2]. Se a temperatura não for muito baixa, temos que $V\lambda^{-3} \gg 1$ e conseqüentemente $z \rightarrow 0$. Como $N \gg 1$, o termo $z/(1-z)$ torna-se desprezível. Então, a equação 2.70 pode assumir a forma

$$N = \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) = V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \zeta(3/2) = N_\varepsilon^{Max} \quad (2.71)$$

Esse resultado determina o número de partículas N_ε^{Max} que ocupam o estado excitado com energia ε , em uma temperatura T . Vale salientar que $N_\varepsilon^{Max} \leq N$ e que o número de partículas no estado fundamental é desprezível.

Agora, vamos considerar a situação onde z não é muito próximo de zero. Nesse caso, o número de partículas N_0 no estado fundamental não pode ser ignorado. Portanto,

$$1 = \frac{N_\varepsilon}{N} + \frac{N_0}{N} \quad (2.72)$$

$$N_\varepsilon = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad ; \quad N_0 = \frac{z}{1-z} \quad (2.73)$$

Note que o caso em que $z \rightarrow 0$ ainda pode ser expresso pelo resultado da equação 2.72, com $N_0/N \rightarrow 0$. No limite termodinâmico, $V \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$, tal que $N/V = \text{constante}$. No limite em que $z \rightarrow 1$, N_0 tende a divergir, com a razão $N_0/N \rightarrow 1$. Ou seja, apenas uma fração infinitesimal das partículas ocupa estados excitados, enquanto todas as outras ocupam o estado fundamental. Essa situação corresponde ao fenômeno da condensação de Bose-Einstein.

2.4.4 Condensação de Bose-Einstein

De um certo modo, o fenômeno da condensação de Bose-Einstein pode ser comparado com a condensação de vapor, respeitando, é claro, a natureza de cada fenômeno. A transição vapor-líquido é um fenômeno clássico que está ligado à posição das partículas. Já a condensação de Bose-Einstein é um fenômeno puramente quântico, que realiza-se no espaço dos momentos. Ou seja, o momento linear de bósons não-interagentes começa a ter o mesmo valor durante a condensação.

A condição para que haja a condensação de Bose-Einstein é que, fixando $z = 1$, a seguinte desigualdade seja satisfeita:

$$N > N_\varepsilon^{Max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \quad (2.74)$$

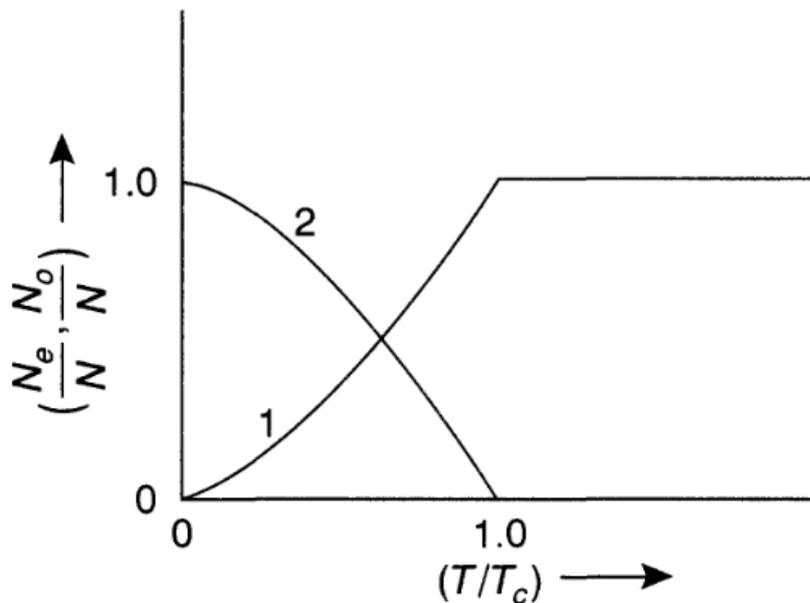
O número de ocupação dos estados excitados é inferior ao total de partículas do sistema.

Desta forma, as partículas restantes ocupam o estado fundamental. Fixando N e V , podemos calcular a temperatura na qual a equação 2.74 é satisfeita:

$$T < T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left\{ \frac{N}{V \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right\}^{2/3}, \quad (2.75)$$

onde T_c é uma temperatura característica, abaixo da qual, o sistema encontra-se em uma mistura das fases normal e condensada. Apenas em $T = 0$ todo sistema estará no estado de condensado de Bose-Einstein. Na figura 24, vemos o comportamento das frações

Figura 24: Frações da fase normal (curva 1) e da fase condensada (curva 2) em um gás ideal de Bose como função da temperatura.



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996.

do número de partículas no estado excitado e no estado fundamental. Para valores de $T > T_c$ temos que todo o sistema se encontra na fase normal, com a fração $N_e/N = 1$. Nessas condições, praticamente todas as partículas estão em estados excitados. Abaixo do ponto em que $T = T_c$, a fração de partículas condensadas no estado fundamental cresce continuamente.

Para temperaturas muito altas e baixas densidades, a energia térmica é grande o suficiente para excitar praticamente todas as partículas para níveis de energia maiores que ϵ_0 . Mas se a temperatura for muito baixa e a densidade elevada, os bósons tendem a se agrupar no estado de menor energia. Por esta razão, esse sistema não apresenta mais uma distribuição homogênea de partículas pelos estados de energia. De fato, apenas a fração N_ϵ^{Max}/N é distribuída de forma homogênea pelos estados excitados. Quando analisamos o número de ocupação, fica claro que a probabilidade de encontrar mais de

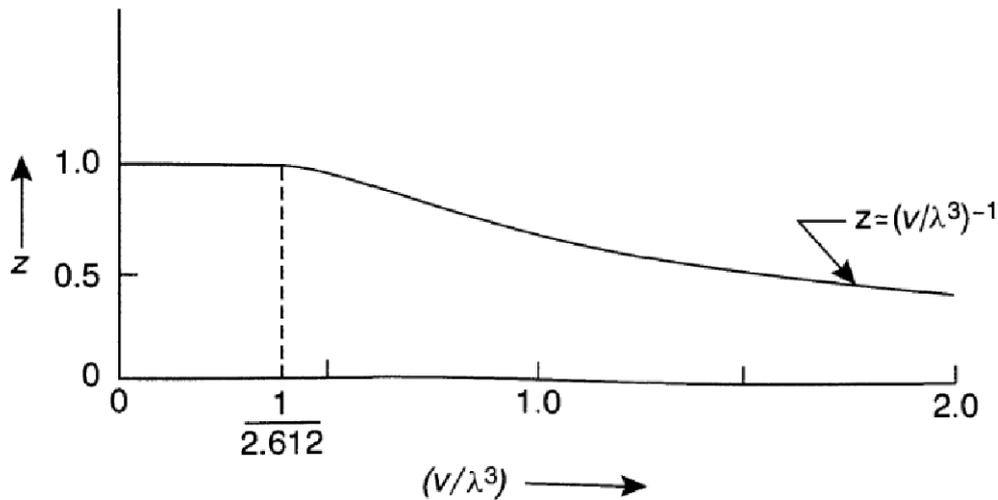
uma partícula em um mesmo estado é maior na estatística de Bose-Einstein do que no modelo clássico. Porém, isso não fica muito evidente quando a temperatura é maior que T_c , já que a energia térmica é suficiente para distribuir as partículas de forma homogênea nos estados excitados.

Considerando o volume por partícula ν , a variação da fugacidade pode ser obtida se a considerarmos em relação a (ν/λ^3) , sendo assim proporcional a $T^{3/2}$. De acordo com as equações 2.72 e 2.73, no intervalo $0 \leq (\nu/\lambda^3) \leq (2.612)^{-1}$, que corresponde ao intervalo de temperatura $0 \leq T \leq T_c$, temos que $z \simeq 1$. Já para $(\nu/\lambda^3) > (2.612)^{-1}$, $z < 1$, como mostra a figura 25 Usando a equação 2.71, podemos determinar z a partir da relação

$$g_{3/2}(z) = (\lambda^3/\nu) < 2.612. \quad (2.76)$$

Como $\nu/\lambda^3 \gg 1$ no limite de altas temperaturas, temos que $g_{3/2}(z) \ll 1$, e consequentemente $z \ll 1$, pois $g_{3/2}(z) \simeq z$. O que está de acordo com o caso clássico.

Figura 25: Fugacidade de um gás ideal de Bose em função de (ν/λ^3) .



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996.

Outro ponto importante a ser analisado nesse sistema é a variação da pressão com a temperatura, mantendo a densidade fixa. No caso $T < T_c$, onde $z = 1$, a pressão pode ser obtida a partir da equação 2.67, com $g_{5/2} \rightarrow \zeta(5/2)$

$$P(T) = \frac{k_B T}{\lambda^3} \zeta\left(\frac{5}{2}\right), \quad (2.77)$$

de onde podemos concluir que o gás tem compressibilidade infinita, uma vez que a pressão não depende da densidade. Isso implica que as partículas no estado fundamental não contribuem para a pressão total do gás. Podemos notar também que a pressão é proporcional

à $T^{5/2}$. No ponto de transição, T_c ,

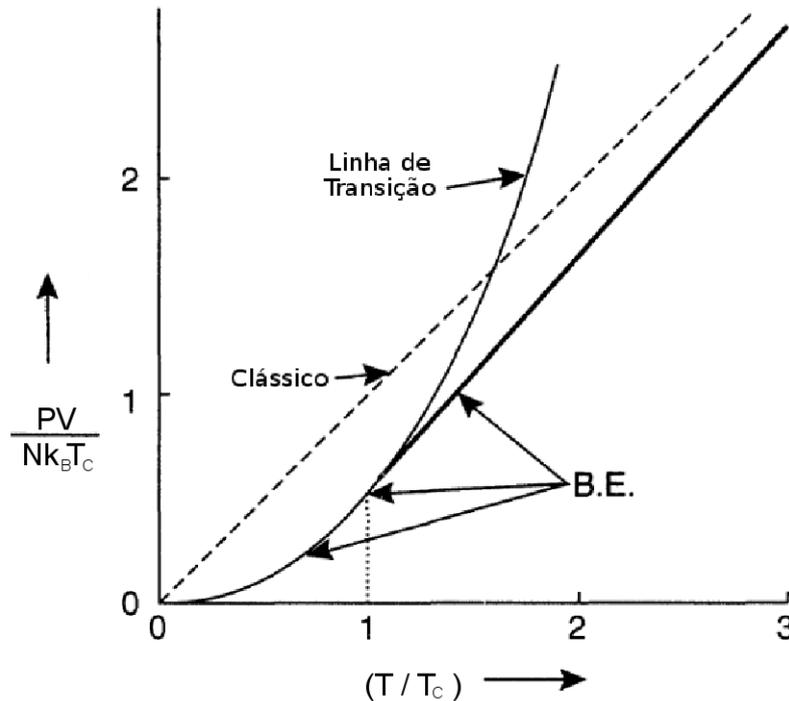
$$P(T_c) \simeq 0.5134 \left(\frac{N}{V} k_B T_c \right). \quad (2.78)$$

Fazendo uma comparação com o gás ideal clássico, o gás ideal de Bose exerce metade da pressão que o seu equivalente para um gás de Boltzmann. Já na situação onde $T > T_c$, a pressão é dada por

$$P = \frac{N}{V} k_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad (2.79)$$

Essa expressão para a pressão só é válida para temperaturas não muito acima de T_c . Obviamente, para temperaturas muito altas, onde $z \ll 1$, podemos fazer uso da expansão virial para determinar a pressão. Mas se $T \rightarrow \infty$, a pressão se aproxima do valor clássico, $Nk_B T/V$. Podemos ver todos esse fatores na figura 26. Primeiramente, a linha de transição só é válida no intervalo $0 \leq T \leq T_c$. Acima da temperatura crítica, a pressão não pode ser escrita de forma simples. Contudo, no limite em que $T \rightarrow \infty$, temos que a pressão se aproxima assintoticamente do limite clássico. É importante salientar que para $T \leq T_c$, a linha de transição não separa a fase normal da fase condensada. A região à direita da linha de transição é a fase normal, enquanto uma fase mista entre a fase normal e a fase condensada está sobre a própria linha. A região à esquerda da linha de transição é inacessível ao sistema [5].

Figura 26: Pressão em função da temperatura para um gás de bósons não interagentes.



Fonte: Pathria, R. K., Statistical Mechanics, second edition. Butterworth Heinemann, 1996.

Já conhecemos da equação 2.36 a relação entre a energia interna e a pressão de uma gás ideal. Conhecendo a pressão para o gás ideal de Bose, podemos, a partir dessa relação, determinar o calor específico do gás. Usando a derivada da energia em T para os valores de $T \leq T_c$, temos

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \frac{\nu}{\lambda^3} \quad , \quad (2.80)$$

onde $z = 1$, independente da temperatura. Em $T = T_c$ o calor específico apresenta um máximo, dado por

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \simeq 1.925 \quad (2.81)$$

Este valor é consideravelmente maior que o valor observado para um gás ideal clássico. Já para valores de $T > T_c$, podemos usar a propriedade

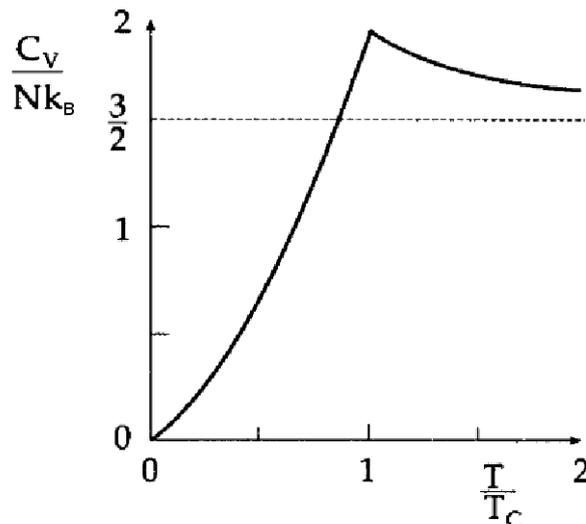
$$z \frac{\partial}{\partial T} g_\nu(z) = g_{\nu-1}(z) \quad , \quad (2.82)$$

para obter que

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \quad (2.83)$$

No limite onde $T \rightarrow T_c$, ou $z \rightarrow 1$, o segundo termo dessa expressão desaparece, pois a função $g_{1/2}(z)$ diverge em $z = 1$. O outro termo vai para o mesmo valor da equação 2.81, no ponto de transição. Podemos observar que há uma descontinuidade na derivada do

Figura 27: Calor específico de um gás ideal de Bose em função da temperatura.



Fonte: Greinar, W., Neise, L., e Stöcker, H., Thermodynamics and Statistical Mechanics, second edition. Springer, 1997.

calor específico, como é visto na figura 27. A magnitude dessa descontinuidade é dada

por

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial T}\right)_{T=T_c-0} - \left(\frac{\partial C_V}{\partial T}\right)_{T=T_c+0} \simeq 3.665 \frac{Nk_B}{T_c} \quad (2.84)$$

No caso de $T \gg T_c$, temos que a curva do calor específico de gás ideal de Bose, se aproxima assintoticamente do valor do limite clássico

$$\left(\frac{C_V}{Nk_B}\right)_{z \rightarrow 0} = \frac{3}{2}. \quad (2.85)$$

2.4.5 Gás real de Bose

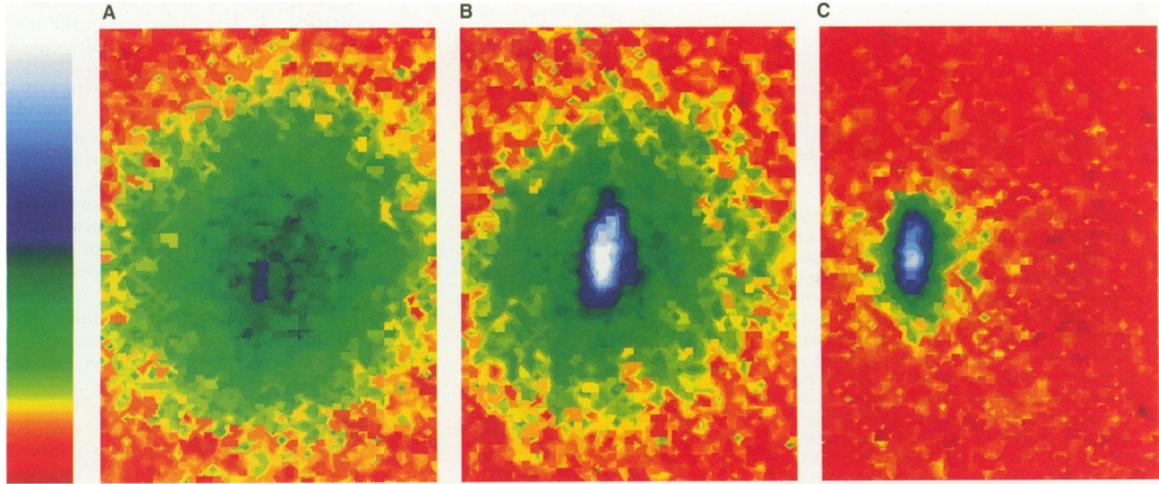
Não é recente o interesse em estudar o gás de bósons interagentes. Porém, desde a descoberta experimental da existência do condensado de Bose-Einstein, quando átomos de rubídio vaporizados e resfriados utilizando um método de armadilha magnética formaram um condensado de Bose-Einstein (figura 28) [26], as pesquisas nesse tema ganharam mais espaço [92, 93, 94]. O problema de sistemas de partículas interagentes, gás ou líquido, tem sido amplamente abordado utilizando um potencial de interação de dois corpos [77]. Devido à dificuldade de resolver problemas que envolvem a interação de muitos corpos, tem sido usada a teoria de perturbação de diversas formas diferentes [95, 96, 97, 98]. Alguns modelos não têm rigor matemático, mas são aceitos por apresentarem resultados que estão de acordo com a nossa compreensão intuitiva do problema [24].

Como vimos, na fase condensada, o gás ideal de bósons apresenta uma pressão constante com a variação do volume, indicando uma compressibilidade infinita. Essa anomalia se origina da ausência de interação entre as partículas. A existência de interação afeta drasticamente as propriedades do gás, mesmo em sistemas bem diluídos. Esse problema foi abordado inicialmente por Bogoliubov, utilizando uma nova técnica de perturbação. Esse método permitiu a introdução de uma equação cinética na teoria dos superfluidos, determinando o espectro de energias de um gás de bósons fracamente interagente [99].

2.4.6 Efeito da topologia nas propriedades do gás de Bose

No últimos anos, muitos estudos teóricos e experimentais vêm sendo realizados com bósons aprisionados em potenciais magnéticos ou óticos [100, 104]. O uso de redes óticas tem apresentado resultados surpreendentes. Redes com diversas topologias diferentes têm sido usadas para investigar as propriedades de bósons [101, 102], tal como condensação de Bose-Einstein induzida pela topologia [103, 105, 106]. Por não apresentar defeitos ou fônons, o uso de redes óticas tem sido uma ferramenta poderosa na investigação da condensação de Bose-Einstein de átomos ultrafrios aprisionados nessas redes [107].

Figura 28: Estágios da formação de um condensado de Bose-Einstein observado em laboratório por Cornell e colaboradores. A escala de cores indica a distribuição de velocidades das partículas. Quanto mais próximo do branco, menor a velocidade das partículas. Na figura (A), vemos a distribuição de velocidades no momento da formação do condensado. A medida que a temperatura abaixa, temos as distribuições de velocidades em (B), onde podemos ver o início da formação do condensado, e finalmente em (C) vemos a distribuição de velocidades de um condensado de Bose-Einstein.



Fonte: Anderson, M.H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E. e Cornell, E. A., Science, 198, vol.269, 1995.

Papel da densidade de estados para a condensação de Bose-Einstein

Com a recente descoberta dos quasicristais, tem havido uma motivação maior para o estudo do comportamento dos bósons em redes. Algumas dessas redes apresentam propriedades semelhantes às encontradas nos quasicristais, tais como invariância de escala e efeito de “mundo pequeno”. Uma dessas redes é a rede de Apolônio [72]. Esse tipo de rede apresenta um espectro de energia multifractal, que exerce enorme influência na termodinâmica do gás de bósons [76], como veremos na próxima seção.

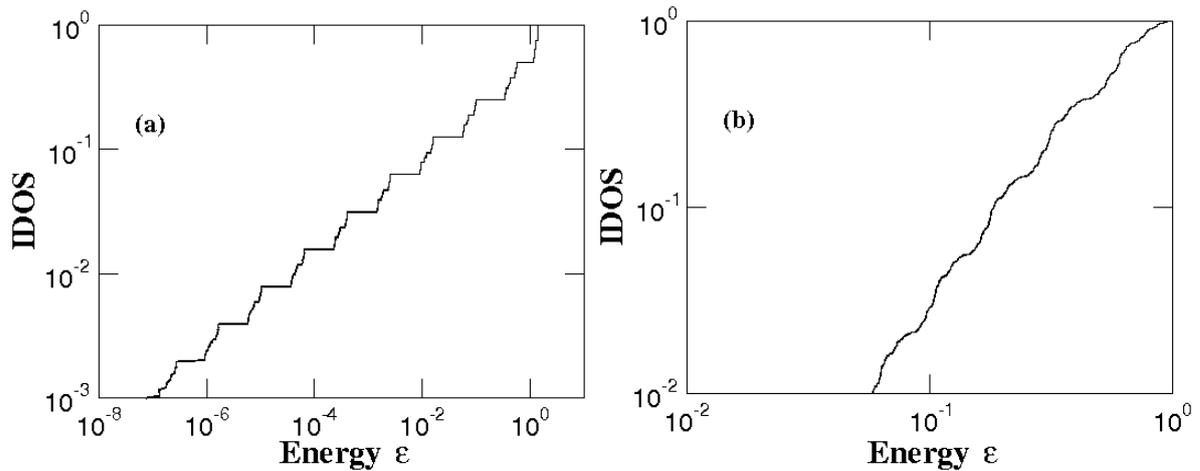
A densidade de estados está diretamente ligada à topologia do sistema, e em alguns sistemas complexos, como a rede de Apolônio, o espectro de energias é muito complicado. Porém, em algumas famílias de sistemas, a densidade de estados segue uma lei de potência do tipo [108, 109]

$$g(\varepsilon) \propto \varepsilon^{x-1} \quad (2.86)$$

onde o expoente x determina a ocorrência ou não da condensação de Bose-Einstein nesse sistema. Para $x > 1$, é esperada a ocorrência da condensação, além disso, se $x > 2$ a transição é descontínua. Se o sistema apresentar uma densidade de estados tal que $x < 1$, o sistema não apresenta uma condensação de Bose-Einstein [108].

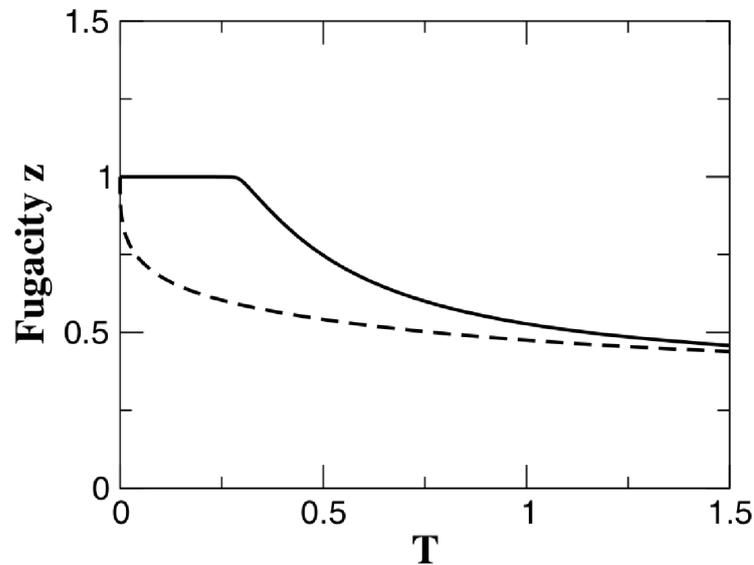
Na figura 29, são apresentadas as densidades de estados integradas de bósons com

Figura 29: (a) Densidade de estados do mapa logístico e (b) Densidade de estado do mapa circular.



Fonte: de Oliveira, I. N., Lyra, M. L., Albuquerque, E. L. e da Silva, L. R., J. Phys.: Condens. Matter, 3499, vol.17, 2005.

Figura 30: Dependência térmica da fugacidade de um gás de bósons não interagentes com diferentes espectros multifractais. A linha sólida representa a fugacidade de gás com espectro obtido a partir do mapa circular. A linha tracejada corresponde a a fugacidade de gás cujo espectro de energias foi obtido a partir do mapa logístico.



Fonte: de Oliveira, I. N., Lyra, M. L., Albuquerque, E. L. e da Silva, L. R., J. Phys.: Condens. Matter, 3499, vol.17, 2005.

espectros multifractais . Mais especificamente, foram analisados um gás ideal de bósons com espectro de energia obtido a partir dos mapas logístico e circular [110]. Para um gás de bósons com espectro de energia obtido a partir do mapa logístico, foi observado que a densidade de estados integrada escala com um expoente $x = 0,43$, de forma que não há condensação de Bose-Einstein nesse sistema. Já para o caso de um gás de bósons com

espectro de energia obtido a partir do mapa circular, a densidade de estados integrada com a energia com um expoente $x = 1,60$. Neste caso, uma condensação de Bose-Einstein é esperada. Estas previsões podem ser verificadas a partir da comparação da dependência térmica das fugacidades calculadas a partir dos dois espectros multifractais, mostradas na figura 30. Como vemos, a fugacidade obtida a partir do espectro do mapa logístico atinge o valor unitário apenas $T = 0$.

2.5 Gases quânticos em uma rede de Apolônio - Métodos utilizados

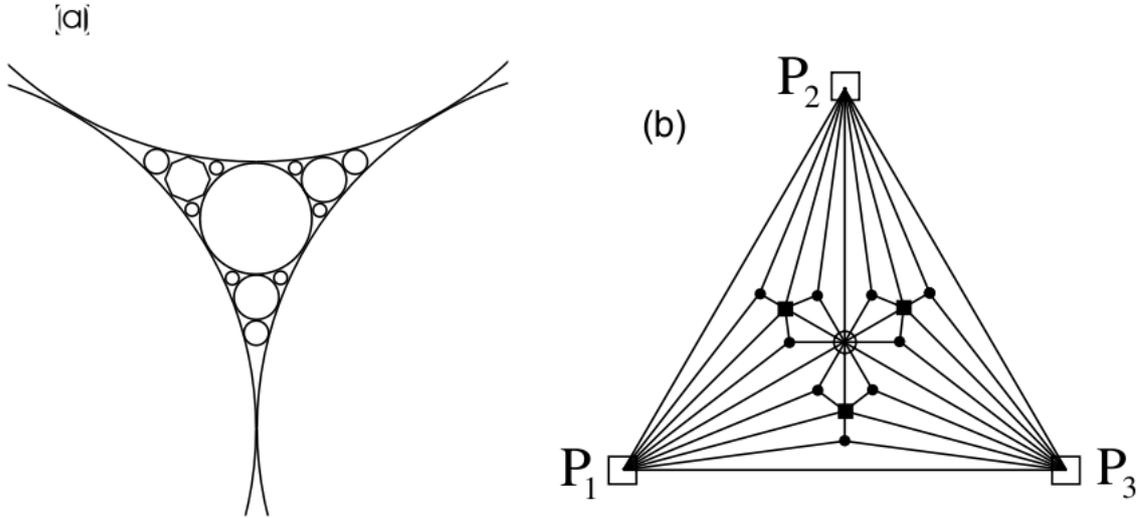
Sistemas físicos com topologias de redes complexas vêm sendo amplamente estudados nos últimos anos. Recentemente, foi investigado como a topologia de algumas dessas redes afeta as propriedades de um gás ideal de Bose em baixas temperaturas. De fato, como a estrutura de rede afeta a densidade de estados do sistema, a existência de condensação de Bose-Einstein está diretamente relacionada com a topologia da rede. Nesta seção, apresentaremos o modelo que foi utilizado neste trabalho. Mais especificamente, vamos apresentar como a rede de Apolônio foi gerada e como o espectro de energia do sistema foi obtido.

2.5.1 Geração da rede de Apolônio

Para definir a rede de Apolônio, vamos iniciar analisando o problema do preenchimento do espaço por esferas, apresentado pelo matemático grego Apolônio de Perga[112]. É evidente que não é possível preencher o espaço com esferas iguais de tamanho finito. A solução do problema proposto por Apolônio foi preencher os espaços entre as esferas que se tocam com esferas menores, as quais tocariam nas esferas maiores adjacentes. Os espaços restantes seriam preenchidos por esferas ainda menores, que deixariam espaços menores, que seriam preenchidos por esferas menores e assim por diante. Para simplificar, vamos considerar o preenchimento de um espaço bidimensional. Neste caso, ao invés de esferas, serão utilizados discos, como mostra a figura 31(a): O tamanho dos discos segue uma lei de potência cujo expoente é 1,3 [112]. Finalmente, a rede de Apolônio é contruída ligando os centros dos discos que se tocam. O resultado pode ser visto na figura 31(b).

A rede de Apolônio com n gerações, possui $m(n)$ sítios mais 3 vértices, com conectividade k . Os sítios da rede satisfazem as seguintes relações $m(n) = 3^n, 3^{n-1}, 3^{n-2}, \dots, 3^2, 3, 1$. Por sua vez, as conectividades são dadas por $k = 3, 3.2, 3.2^2, \dots, 3.2^{n-1}, 3.2^n, 2^{n+1} + 1$. O valor de $k = 2^{n+1} + 1$ corresponde a conectividade dos vértices P_1, P_2 e P_3 , representados na figura 31(b).

Figura 31: (a) Preenchimento do espaço bidimensional por discos, correspondendo à solução clássica do problema proposto por Apolônio de Perga; (b) Rede de Apolônio com 3 gerações.



Fonte: Andrade, J. S., Jr, Herrmann, H. J., Andrade, R. F. S. e da Silva, L. R., Physical Review Letters, 018702, vol.94, 2005.

Na n -ésima geração da rede de Apolônio, o número total N_n de sítios é dado por

$$N_n = 3 + \frac{3^{n+1} - 1}{2} \quad , \quad (2.87)$$

que obedecem à seguinte distribuição da conectividade

$$P(k) = \sum_{k' \geq k} m(k', n) / N_n \quad . \quad (2.88)$$

Para redes grandes, é possível escrever a distribuição de forma contínua, com $P(k) \propto k^{1-\gamma}$, com $\gamma = 1 + \ln(3)/\ln(2) \approx 2,585$ [72]. Uma vez que o número de sítios aumenta de um fator 3 a cada geração e a conectividade de cada sítio com um fator 2, a rede de Apolônio é livre de escalas, com o número médio de conexões por sítio seguindo uma lei de potência. Tal característica é típica de sistemas fractais.

2.5.2 Cálculo do espectro de energias

Uma vez que a rede de Apolônio foi gerada, o próximo passo foi determinar o espectro de energia do sistema. Para tanto, foi utilizado o método *Tight-Binding* para partículas não interagentes. O Hamiltoniano do sistema foi definido como

$$H = \varepsilon \sum_i |i\rangle\langle i| + \sum_{(i,j)} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (2.89)$$

onde $|i\rangle$ representa o estado de uma partícula que ocupa o sítio i da rede, com energia de sítio ε . $t_{ij} = t$ é a amplitude de *hopping* entre os sítios (i, j) , ou a energia necessária para a partícula se deslocar entre os sítios (i, j) . Sem perda de generalidade, usaremos apenas t_{ij} como parâmetro energético do sistema, com $\varepsilon = 0$ para todos os sítios. Os autoestados de uma partícula podem ser escritos em termos da base de estados de Wannier [75, 76], com

$$|\Psi\rangle = \sum_i \phi_i |i\rangle \quad , \quad (2.90)$$

com ϕ_i sendo os coeficientes da expansão. Assim, o espectro de energias pode ser obtido resolvendo os sistema de equações acopladas

$$\sum_{j \neq i} t_{ij} \phi_j = E \phi_i \quad , \quad (2.91)$$

onde o sítio j faz uma conexão com o sítio i .

Como foi visto no capítulo 1, os estudos anteriores sobre gases quânticos ideais e sistemas magnéticos na rede de Apolônio mostraram que algumas propriedades termodinâmicas desses sistemas exibem forte dependência com o tamanho da rede [73, 75, 76]. Em particular, as temperaturas de transições de fase observadas em redes de Apolônio divergem com o número de sítios. Uma das possibilidades para esse comportamento anômalo é que a conectividade média por sítio varia com o tamanho da rede, ocasionando uma divergência na lagura da banda de energia. Para evitar este efeito, uma estratégia é reescalar as amplitudes de *hopping* pela média geométrica da conectividade dos sítios da rede

$$t_{ij} = t / \sqrt{k_i k_j} \quad , \quad (2.92)$$

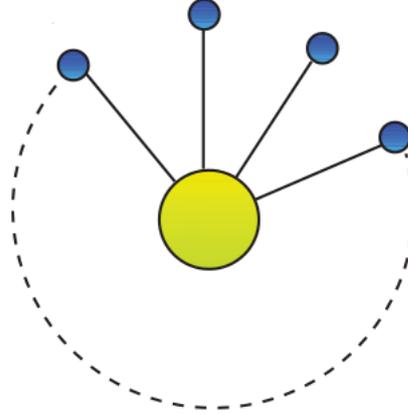
onde t é uma constante, enquanto k_i e k_j são as conectividades dos sítios i e j , respectivamente.

Essa estratégia foi empregada com sucesso para descrever o comportamento de um gás ideal de Bose numa rede tipo estrela [106], que consiste de um sítio central conectado a outros sítios periféricos, como ilustrada na figura 32. Essa rede possui propriedades similares as da rede de Apolônio, tais como estrutura hierárquica e invariância de escala.

Ao diagonalizarmos o Hamiltoniano da rede estrela, podemos notar que a energia de ligação escala com \sqrt{k} [106]. Para tanto, considere

$$H = \frac{\varepsilon}{\sqrt{k}} \sum_{i=1}^k (|i\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle i|) \quad , \quad (2.93)$$

Figura 32: A rede do tipo estrela é formada por um sítio central do qual partem ligações para sítios periféricos.



Fonte: Vidal, E. J. G. G., Lima, R. P. A. e Lyra, M. L.”, Physical Review E, 061137, vol.83, 2011.

Como notamos para os menores tamanhos da rede:

$$H = \begin{vmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{vmatrix} \rightarrow \begin{aligned} \lambda_1 &= t \\ \lambda_2 &= -t \end{aligned} \quad (2.94)$$

para uma conexão,

$$H = \begin{vmatrix} 0 & t & t \\ t & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 \end{vmatrix} \rightarrow \begin{aligned} \lambda_1 &= \sqrt{2}t \\ \lambda_2 &= -\sqrt{2}t \\ \lambda_3 &= 0 \end{aligned} \quad (2.95)$$

para duas conexões,

$$H = \begin{vmatrix} 0 & t & t & t \\ t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \rightarrow \begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda_2 = 0 \\ \lambda_3 &= \sqrt{3}t \\ \lambda_4 &= -\sqrt{3}t \end{aligned} \quad (2.96)$$

para três conexões, e assim por diante.

Atravéz do método *Tight-Binding*, foi possível determinar o espectro de energias de um gás confinado em uma rede de Apolônio. No próximo capítulo, serão apresentados os principais resultados obtidos, identificando se o reescalonamento das energias de *hopping* elimina as anomalias previamente observadas em algumas propriedades termodinâmicas de gases quânticos.

Resultados

Como vimos nos capítulos anteriores, a topologia da rede de Apolônio afeta drasticamente as propriedades termodinâmicas dos sistemas em estudo, tais como gases quânticos ideais [73, 74] e sistemas magnéticos (rede de spin) [75, 76]. Mais especificamente, as transições de fases em um gás ideal de bósons e em sistemas ferromagnéticos apresentaram temperatura de transição que diverge com o tamanho da rede [73, 74, 75, 76]. Uma das possíveis explicações para esse comportamento anômalo é que a conectividade média por sítio varia com tamanho da rede.

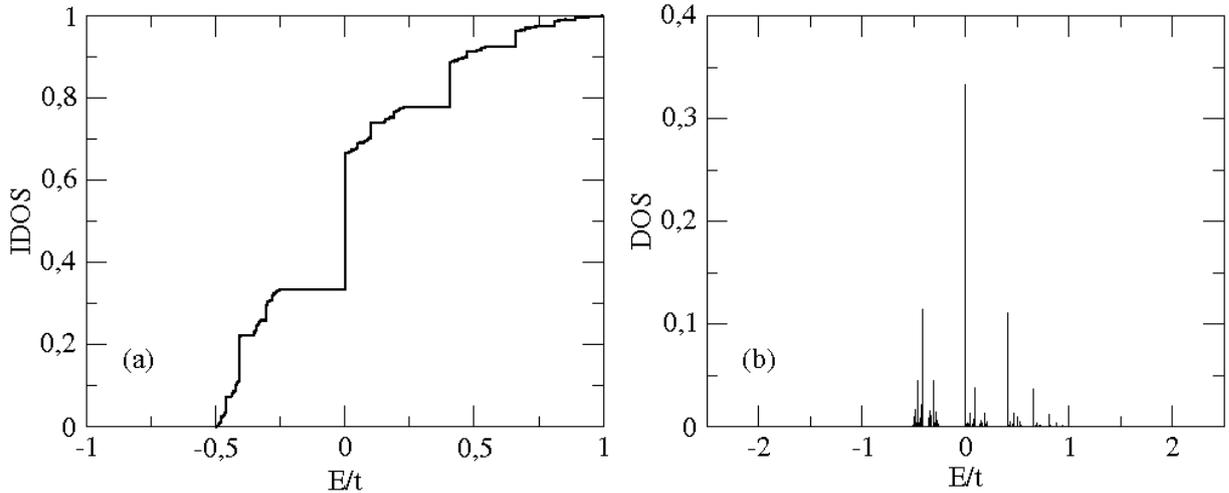
Com o objetivo de manter a largura do espectro de energia finito, reduzindo os efeitos de tamanho finito sobre as propriedades termodinâmicas de gases quânticos ideais em uma rede de Apolônio, será utilizado um esquema que rescala os parâmetros energéticos desses sistemas pela média geométrica da conectividade dos sítios da rede. Nas próximas seções apresentaremos os principais resultados obtidos, tanto para um gás de Fermi como para um gás de bósons não interagentes.

3.1 Espectro de energia da rede de Apolônio

A análise do papel da conectividade dos sítios será iniciada a partir do cálculo do espectro de energias e da densidade de estados do sistema. Estas duas quantidades independem da natureza do gás em estudo, dependendo apenas da topologia da rede. O espectro de energias foi calculado usando o modelo *Tight Binding* na rede de Apolônio, como descrito na seção 2.5.

Na figura 33, é apresentada a densidade de estados integrada para uma única partícula em uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações. Como esperado, o espectro de energia apresenta uma distribuição de estados assimétrica, devido a ausência de simetria quiral da rede [75, 76]. A densidade de estados integrada revela a existência de níveis degenerados, representados pelas linhas verticais na figura 33. Em particular, o nível com maior grau de degenerescência é em $E/t = 0$, que corresponde ao centro do espectro, com $1/3$ dos estados acessíveis de sistema. Os níveis de energia são separados por lacunas, que são representadas pelas linhas horizontais. As partes superior e inferior do espectro são relevantes para as propriedades termodinâmicas de férmions e bósons, respectivamente. Na parte superior do espectro, há a ocorrência de minibandas de energia, separadas por

Figura 33: Densidade de estados integrada para uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações. As linhas verticais de gráfico correspondem à existência de estados degenerados, e as horizontais são as lacunas de energia. No detalhe, a densidade de estados integrada escala com $E^{0,5}$.



Fonte: Autor

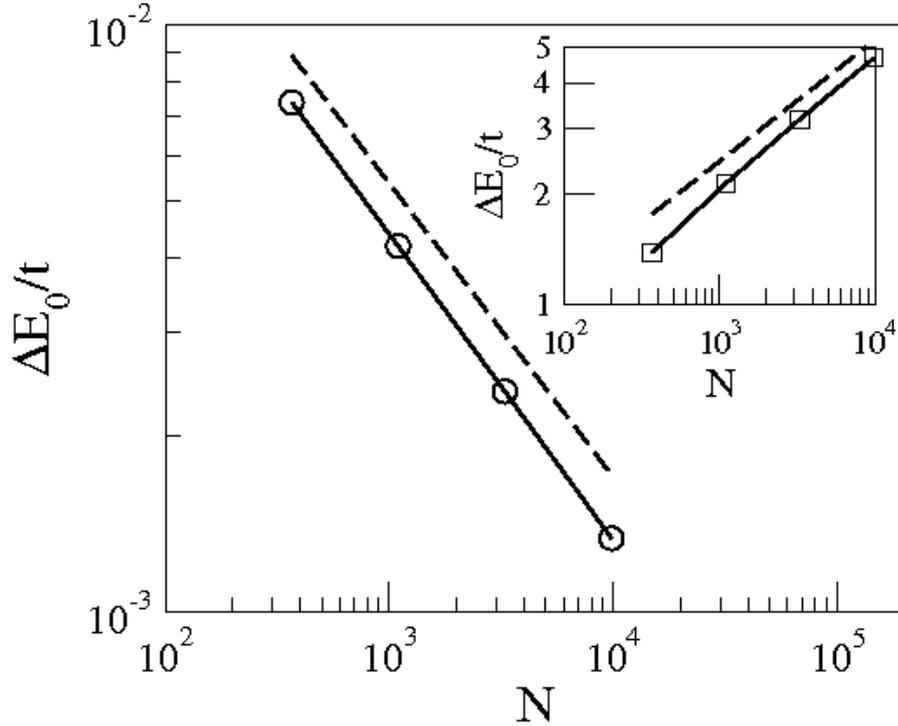
pequenas lacunas. A existência dessas minibandas é determinante para as propriedades de um gás de Fermi, como será visto mais adiante. Na parte inferior do espectro, observa-se que a densidade de estados integrada escala com $E^{3/2}$, como mostra o detalhe na figura 33, satisfazendo a condição para condensação de Bósons, como descrito na seção 2.4.6.

Os resultados obtidos aqui estão em concordância com os obtidos em trabalhos anteriores [75]. Desta maneira, a normalização da energia de *hopping* não altera a estrutura geral da densidade de estados do sistema. Contudo, uma importante modificação pode ser observada na diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, denominada de ΔE_0 . Na figura 34, é apresentada a diferença de energia, ΔE_0 , como função do número de sítios da rede de Apolônio, N . Note que a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado diminui com o tamanho da rede, seguindo uma lei de potência dada por $\Delta E_0 \propto N^{-1/2}$. Este comportamento é oposto ao observado em uma rede de Apolônio onde as energias de *hopping* não foram reescaladas, como mostra o detalhe da figura 34. De fato, é observado que $\Delta E_0 \propto N^{1/3}$ quando as energias de *hopping* não são reescaladas pela média geométrica da conectividade dos sítios [76]. Como veremos, este resultado será determinante para o comportamento em baixas temperaturas de um gás de Bósons confinado na rede de Apolônio.

3.2 Gás de elétrons em uma rede de Apolônio

Na seção anterior, foi apresentado como a topologia define o espectro de energia da rede de Apolônio. Em particular, foi mostrado que a reescala da energia de *hopping*

Figura 34: Diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado como função do número de sítios da rede rede Apolônio. As energias de hopping foram reescaladas pela média geométrica da conectividade dos sítios, dada pela equação 2.92. Note que $\Delta E_0 \propto N^{-1/2}$. No detalhe, a diferença de energia entre os níveis para o caso em que as energias de hopping não foram reescaladas, com $\Delta E_0 \propto N^{1/3}$.



Fonte: Autor

não promove grandes alterações na densidade de estado integrada do sistema. Nesta seção, usaremos o formalismo apresentado na seção 2.3 para caracterizar as propriedades termodinâmicas de um gás de elétrons não interagentes confinado na rede de Apolônio. O número de elétrons do sistema é N_e .

De acordo com a estatística de Fermi-Dirac, o número médio de ocupação do i -ésimo nível de energia é

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} \quad , \quad (3.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e μ é o potencial químico do sistema, o qual pode ser obtido a partir da condição que $\sum_{i=1}^N \langle n_i \rangle = N_e$. Neste caso, foi utilizado o método de Newton para obter $\mu(N_e/N, T)$. Uma vez calculado o potencial químico, foi possível obter a energia interna do sistema, definida como:

$$U(N_e/N, T) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \langle n_i \rangle \quad (3.2)$$

Assim, foi possível escrever o calor específico como:

$$C_v/k_B = \left(\frac{\beta}{2}\right)^2 \left\{ \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 \cosh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2] - \frac{\left(\sum_{i=1}^N \varepsilon_i \cosh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2]\right)^2}{\sum_{i=1}^N \cosh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2]} \right\} \quad (3.3)$$

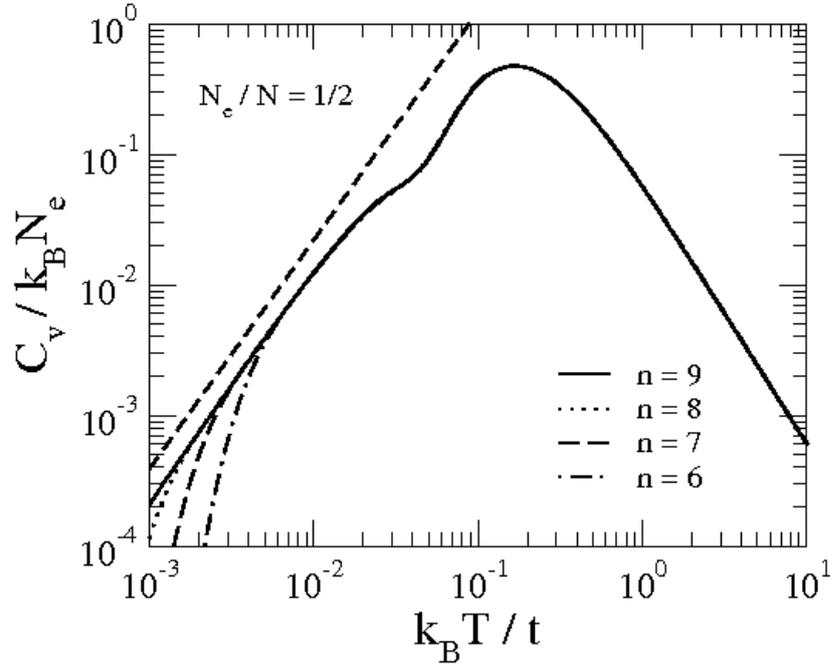
A figura 35 mostra o calor específico por partícula de um gás de elétrons não interagentes para diferentes gerações da rede de Apolônio. O número de elétrons foi fixado em $N_e/N = 1/2$. Aqui podemos avaliar os efeitos de tamanho finito sobre as propriedades termodinâmicas do sistema. Para uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações, os efeitos de tamanho finito são muito pequenos para temperaturas maiores que $k_B T/t = 10^{-3}$ e calor específico por partícula menores que $C_V/k_B N_e = 10^{-4}$. Em altas temperaturas, o calor específico apresenta um decaimento com $1/T^2$, característico de sistemas com espectro de energia restrito a um intervalo bem definido. Em baixas temperaturas, o calor específico por partícula apresenta um comportamento próximo a uma lei de potência, com $C_v \propto T^{1,75}$. Contudo, um desvio acentuado desta lei de potência pode ser observado em torno de $k_B T/t = 10^{-1}$. Este desvio está associado à existência de lacunas de energia entre as minibandas do espectro e o estado com energia $E/t = 0$. De fato, este nível corresponde a energia de Fermi para uma rede semi-preenchida em $T = 0$. Neste caso, as lacunas de energia reduzem a capacidade do sistema em trocar energia com um reservatório de calor até que a temperatura atinja um valor no qual os elétrons possam saltar para os níveis não ocupados. Apesar de haver uma redução nos efeitos de tamanho finito associado ao reescalar a energia de *hopping*, pode ser observado que o comportamento geral do gás de Fermi, se comparado com os resultados obtidos em trabalhos anteriores, não é muito diferente.

A redução na capacidade do sistema em trocar energia com um reservatório de calor em certas faixas de temperatura torna-se mais evidente se considerarmos outros valores de preenchimento da rede, como mostra a figura 36. Aqui foi considerada uma rede de Apolônio com $n = 9$ número de gerações, com um preenchimento da rede $N_e/N < 1/2$. Note que o calor específico apresenta oscilações, e no limite em que $N_e/N \rightarrow 0$, o calor específico começa desenvolver oscilações log-periódica [75], que são características de um sistema com um espectro de energia fractal [111].

3.3 Gás de bósons em uma rede de Apolônio

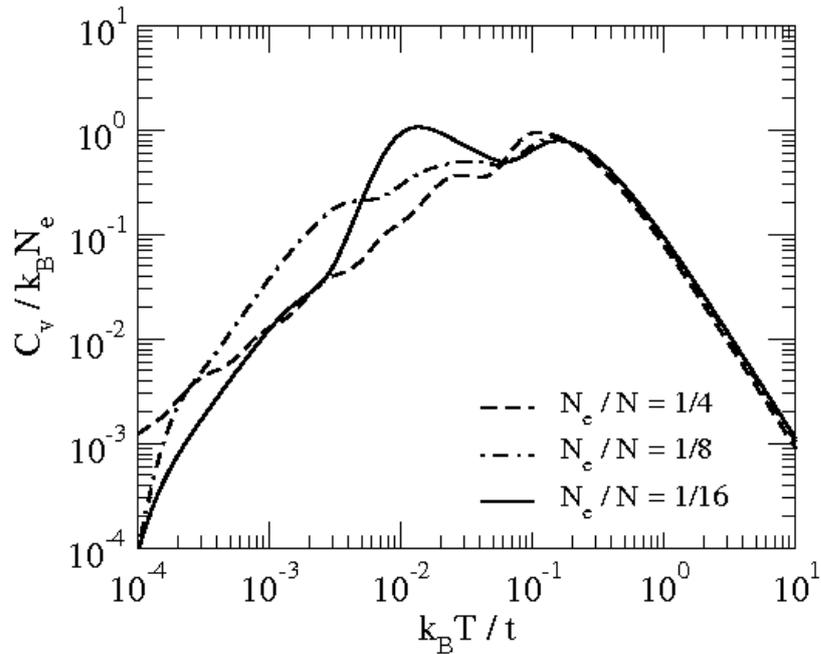
Como vimos na seção passada, a característica multifractal do espectro de energia é determinante para o comportamento termodinâmico de uma gás de elétrons não interagentes. Contudo, nenhum efeito associado ao reescalonamento das energias de *hopping*

Figura 35: Calor específico por partícula de uma gás de elétrons não interagentes confinados em redes de Apolônio com diferentes gerações. O número de partículas foi fixado em $N_e/N = 1/2$.



Fonte: Autor

Figura 36: Calor específico em função da temperatura de um gás de férmions em rede de Apolônio com $n = 9$ gerações e diferentes valores de ocupação. É observado uma oscilação log-periódica, como esperado para sistemas cujo espectro de energias apresenta uma distribuição multifractal.



Fonte: Autor

foi observado. Um cenário completamente distinto é visto quando consideramos um gás de bósons não interagentes confinado em uma rede de Apolônio.

De acordo com a estatística de Bose-Einstein, um gás de bósons não interagentes com N_p partículas deve obedecer a seguinte função de distribuição:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_i)} - 1} \quad , \quad (3.4)$$

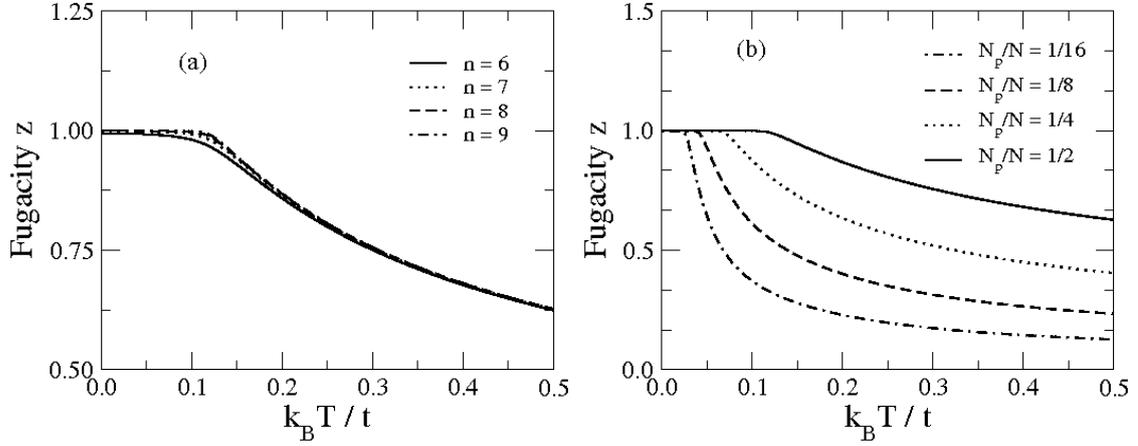
onde $z = e^{\beta\mu}$ é a fugacidade do sistema. Mais uma vez, o cálculo do potencial químico pode ser realizado usando a condição de $\sum_{i=1}^N \langle n_i \rangle = N_p$. Neste caso, estamos considerando que o número de bósons do sistema se conserva.

Na figura 37 é apresentada a fugacidade em função da temperatura tanto para diferentes gerações da Rede de Apolônio com um número de ocupação fixo, como para diferentes números de ocupação de uma rede de Apolônio com número de gerações fixo. Todas as energias foram adequadamente ajustadas em $\varepsilon_i \mapsto \varepsilon_i + |E_0|$, de forma que o menor valor para o potencial químico seja $\mu = 0$. Para um número de ocupação fixo em $N_p/N = 1/2$, para todos os tamanhos de rede vemos que $z \rightarrow 1$, para temperaturas $k_B T/t < 10^{-1}$, como mostra a figura 37(a). De fato, este resultado demonstra que o uso da média geométrica da conectividade entre os sítios como parâmetro de escala para energia de *hopping* reduz sensivelmente os efeitos de tamanho finito observados em trabalhos anteriores [76]. É importante salientar que $z \simeq 1$ indica a existência de uma condensação de Bose-Einstein. Já para o caso em que o número de gerações da rede de Apolônio é fixado em $n = 9$, é possível observar que a faixa de temperaturas onde $z \rightarrow 1$ varia significativamente com o número de ocupação da rede. Este resultado é similar ao observado previamente para o gás de Bósons numa rede de Apolônio em que as energias de *hopping* não foram reescaladas [76].

Uma vez determinada a existência da condensação de Bose-Einstein, podemos calcular o número médio de partículas no estado fundamental, N_0 . Para tanto, é utilizada a expressão 2.73 definida no capítulo anterior, com $N_0 = z/(1 - z)$.

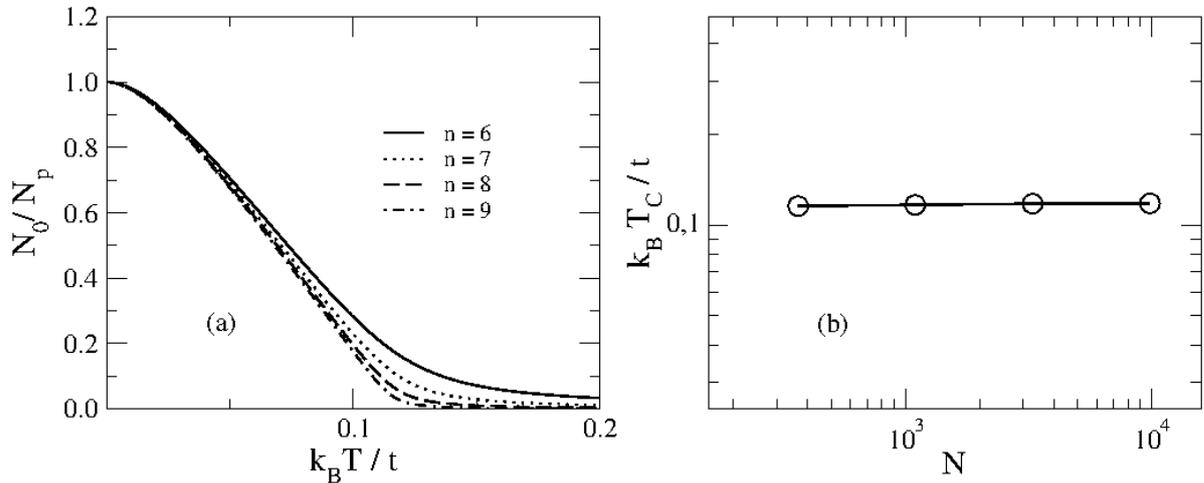
A figura 38(a) mostra a fração de ocupação do estado fundamental em função da temperatura, para redes de Apolônio com diferentes gerações. Mais uma vez, a densidade de partículas foi fixada em $N_p/N = 1/2$. Aqui vemos que a fração de bósons no estado fundamental vai a zero continuamente com o aumento da temperatura do sistema. No entanto, é possível observar que as curvas que descrevem a fração de partículas no estado fundamental são muito próximas, mostrando que os efeitos de tamanho finito foram praticamente eliminados em decorrência do uso da média geométrica da conectividade entre os sítios como parâmetro de escala para energia de *hopping*. Uma vez que a fração N_0/N_p corresponde ao parâmetro de ordem da transição de condensação de Bose-Einstein, podemos obter a partir dela a temperatura de transição, T_c . Para tanto, consideramos a temperatura de transição como o ponto de máxima curvatura. A temperatura crítica, T_c , para diferentes tamanhos da rede é mostrada na figura 38(b). Como podemos observar,

Figura 37: (a) Fugacidade em função da temperatura em redes de Apolônio com diferentes gerações e número de ocupação fixo em $N_p/N = 1/2$. Note que $z \rightarrow 1$ em $k_B T/t < 10^{-1}$, indicando a existência de uma condensação de Bose-Einstein. (b) Fugacidade em função da temperatura para uma rede de Apolônio com número de gerações $n = 9$ e diferentes números de ocupação.



Fonte: Autor

Figura 38: (a) Fração de partículas no estado fundamental em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede de Apolônio: $n = 6$ (linha contínua), $n = 7$ (linha pontilhada), $n = 8$ (linha tracejada), $n = 9$ (linha traço-pontilhada). A densidade de partículas foi fixada em $N_p/N = 1/2$. Em (b), é apresentada a dependência de temperatura crítica com o tamanho da rede. Note que T_c não varia com o tamanho da rede.



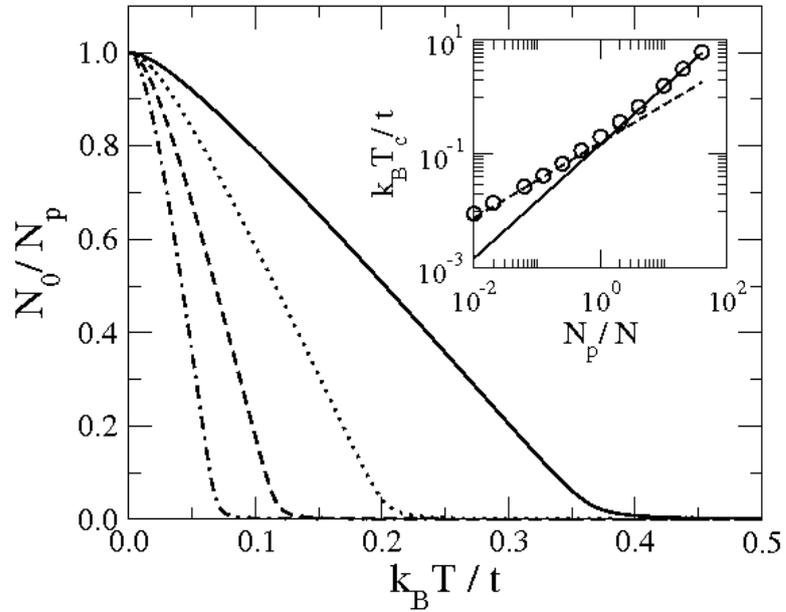
Fonte: Autor

a temperatura de transição tem um valor que independe do tamanho da rede, e tem um valor de aproximadamente $k_B T_c/t = 0,1124$. Este resultado contrasta com os resultados anômalos observados em estudos prévios de transições de fase em uma rede de Apolônio, onde T_c diverge com o tamanho da rede [73, 75]. A remoção do comportamento anômalo de T_c reflete o fato que a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro

estado excitado decai com o tamanho da rede, com $\Delta E_0 \propto N^{-1/2}$.

O efeito do número de ocupação sobre a condensação de Bose-Einstein são mostrados na figura 39. Em particular, é apresentado o número de partículas no estado fundamental em função da temperatura, para diferentes número de ocupação de uma rede de Apolônio de degração $n = 9$. Como podemos notar, a temperatura de transição aumenta à medida que a densidade de partículas cresce. Notamos que para grandes frações de ocupação $T_c \propto N_p/N$, e para valores pequenos, $T_c \propto 1/\ln(N_p/N)$, concordando com trabalhos anteriores [106].

Figura 39: Número de partículas no estado fundamental em função da temperatura em uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações, para diferentes valores de ocupação: $N_p/N = 2$ (linha sólida), $N_p/N = 1$ (linha pontilhada), $N_p/N = 1/2$ (linha tracejada), $N_p/N = 1/4$ (linha traço-pontilhada). A dependência da temperatura de transição com o número de ocupação é mostrada no detalhe.



Fonte: Autor

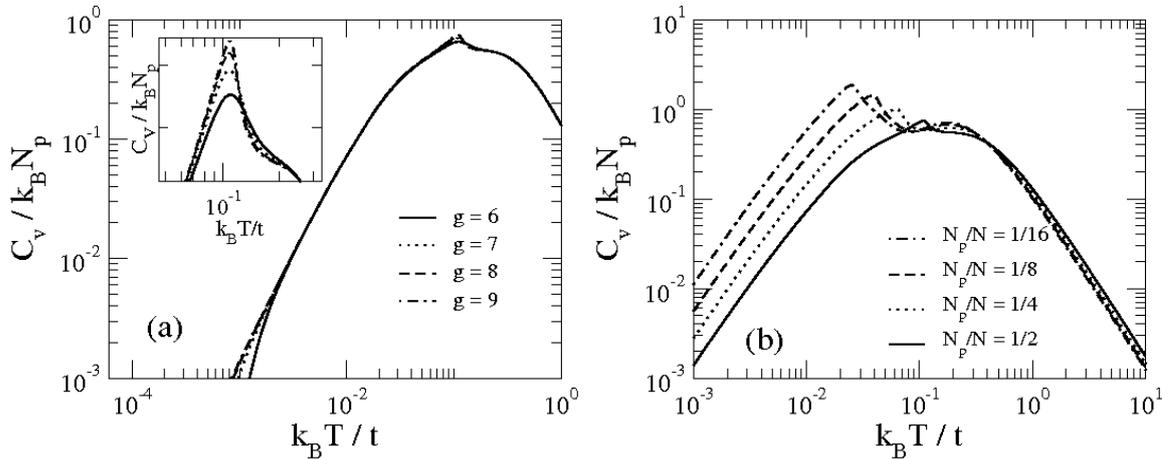
Uma vez que a condensação de Bose-Einstein foi caracterizada, podemos agora analisar a comportamento termodinâmico de um gás de bósons não interagentes confinado na rede de Apolônio. Usando a definição da energia na equação 3.2 e a função de distribuição de Bose-Einstein, podemos escrever o calor específico do sistema como:

$$C_v/k_B = \left(\frac{\beta}{2}\right)^2 \left\{ \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 \sinh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2] - \frac{\left(\sum_{i=1}^N \varepsilon_i \sinh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2]\right)^2}{\sum_{i=1}^N \sinh^{-2} [\beta(\varepsilon_i - \mu)/2]} \right\}. \quad (3.5)$$

A figura 40 exhibe o calor específico por partícula em função da temperatura para diferentes tamanhos e números de ocupação da rede de Apolônio. Mantendo a densidade

de partículas em $N_p/N = 1/2$ e variando o número de gerações da rede de Apolônio, vemos que os efeitos de tamanho finito são evidentes apenas na região em que $k_B T/t < 10^{-2}$ e $C_v/k_B N_p < 10^{-2}$, como mostra a 40a. Em torno de $k_B T/t \sim 10^{-1}$, observamos um ponto de máximo no calor específico, caindo continuamente, como mostra o detalhe da figura. Esse comportamento do calor específico nessa faixa de temperatura indica que a condensação de Bose-Einstein na rede de Apolônio é uma transição de fase de segunda ordem. Em altas temperaturas, o calor específico de todas as curvas segue um decaimento com $1/T^2$. A figura 40b mostra o calor específico por partícula em função da temperatura para diferentes densidades do gás em uma rede de Apolônio com $n = 9$ gerações. Mais uma vez podemos observar a ocorrência de um máximo no calor específico, porém a temperatura onde o máximo ocorre, associado à existência da condensação de Bose-Einstein. Diferente do que ocorre com o gás de férmions, o calor específico de um gás de bósons não apresenta oscilações log-periódicas. Isto decorre do fato que as propriedades termodinâmicas do gás bósons dependem apenas da estrutura na região inferior do espectro de energias.

Figura 40: (a) Calor específico por partícula em função da temperatura para um gás bósons não interagentes confinados em redes de Apolônio com diferentes números de gerações. O número de ocupação foi mantido em $N_p/N = 1/2$. No detalhe, a existência de uma descontinuidade na temperatura de ocorrência da condensação de Bose-Einstein. (b) Calor específico por partícula em função da temperatura para um gás bósons não interagentes confinados em uma rede de Apolônio com número de gerações $n = 9$.



Fonte: Autor

3.3.1 Expoentes críticos

Argumentos de escala de tamanho finito podem ser apresentados para estimar com precisão a temperatura de transição BEC e os expoentes críticos relevantes. Ao assumir

um comportamento de escalonamento de um único parâmetro, a fração de condensado, na proximidades da transição, terá a forma universal

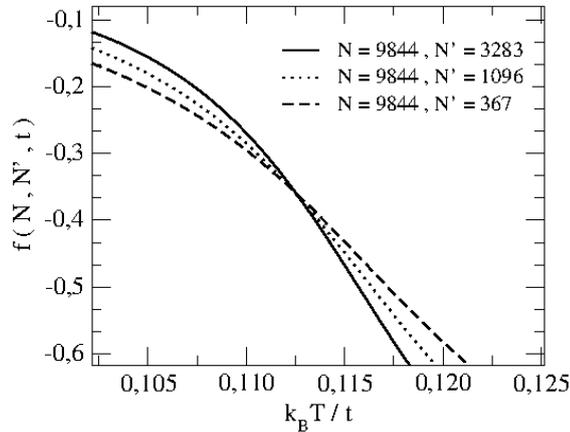
$$\rho_0(N, T) = N^{-\zeta/\nu} h[(T - T_c)N^{1/\nu}], \quad (3.6)$$

onde é assumida uma dependência implícita com densidade de partículas. Sendo ζ o expoente que rege o desaparecimento de a fração condensada, à medida que se aproxima por baixo [$\rho_0 \propto (T_c - T)^\zeta$] no limite termodinâmico. Já ν é um expoente de correlação típico que desempenha um papel semelhante ao $d\nu$ em rede regulares d-dimensionais. Há várias técnicas que exploram a hipótese de escala de tamanho finito a fim de calcular os parâmetros críticos. Aqui, analisamos a dependência da temperatura do conjunto de funções auxiliares

$$f(N, N', T) = \frac{\ln[\rho_0(N, T)/\rho_0(N', T)]}{\ln N/N'} \quad (3.7)$$

calculada para diferentes pares de tamanhos de rede (N, N'). De acordo com a hipótese de escala, estas funções se tornam independentes de (N, N') à temperatura de transição. Além disso, este valor invariável de escala $f(N, N', T_c) = -\zeta/\nu$.

Figura 41: Funções de escala auxiliares $f(N, N', T)$ contra a temperatura usando $N = 9844$ e $N' = 3283$ ($g = 8$), $N' = 1096$ ($g = 7$) e $N' = 367$ ($g = 6$). Onde foi usada a densidade de partículas $N/N_p = 1/2$. O ponto de cruzamento indica a transição para condensado de Bose-Einstein em $k_B T_c/t = 0,1124$.

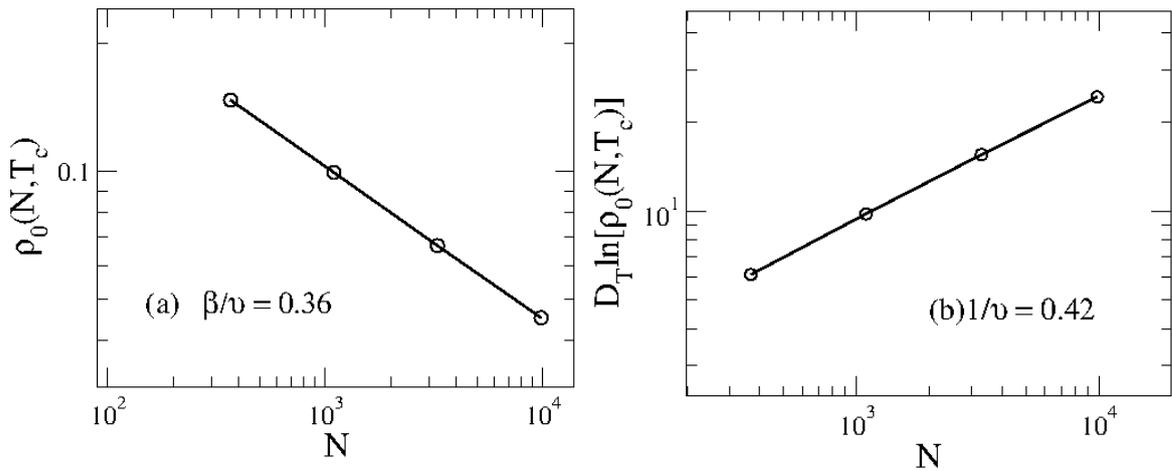


Fonte: Autor

Na figura 41, mostramos um conjunto de funções auxiliares $f(N, N', T_c)$. Em todas elas, foi utilizado como o número N de sítios da rede com número de geração $g = 9$ ($N = 9844$), enquanto que o N' foi feito a partir de redes com número de geração $g = 6$ ($N' = 367$) $g = 7$ ($N' = 1096$) e $g = 8$ ($N' = 3283$). Aqui, também é considerado constante a densidade de partículas $N_p/N = 1/2$. Nota-se que todas as curvas se cruzam aproximadamente no mesmo ponto, indicando, assim, a transição BEC. Nossa melhor estimativa para a temperatura de transição para esta densidade de partículas em particular é $k_B T_c/t =$

0.1124, com a barra de erro proveniente do pequeno desvio do ponto de cruzamento. O valor invariável da escala fornece a estimativa de $\beta/\nu = 0.36$. A precisão de tais estimativas é verificado na figura 42a, onde marcamos a fração condensada na T_c para tamanhos distintos de rede. A lei de escala $\rho_0(N, T_c) \propto N^{-\beta/\nu}$ vale para duas ordens de magnitudes de tamanhos rede, sem qualquer correção evidente da lei de escala. O

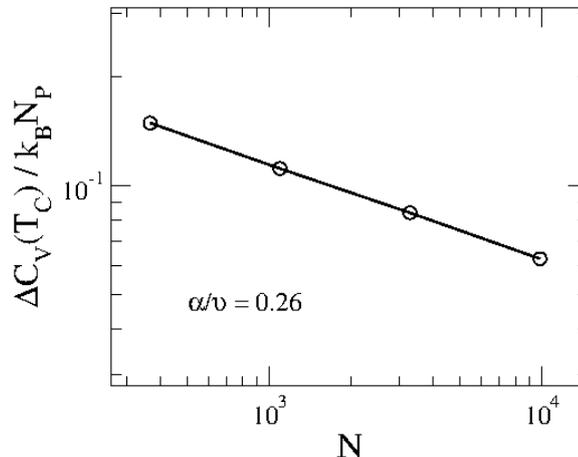
Figura 42: (a) A fração de partículas condensadas, escala com o número de sítios N com o expoente $\beta/\nu \approx 0.36$ na temperatura crítica, (b) e $\frac{d}{dT}[\ln \rho_0(N, T)]$ escala com N com o expoente $1/\nu \approx 0.42$.



Fonte: Autor

expoente de correlação ν também pode ser estimado notando a derivada do logaritmo da fração condensada em relação à $\frac{d}{dT}[\ln \rho_0(N, T)] \propto N^{1/\nu}$ na transição. Este comportamento de escala é descrito na figura 42b que fornece $1/\nu = 0.42$.

Figura 43: Parte singular do calor específico na temperatura de transição, $C_v(N \rightarrow \infty, T_c) - C_v(N, T)$, contra o tamanho da rede, de onde podemos estimar o expoente crítico $\alpha/\nu \approx 0.26$



Fonte: Autor

Finalmente, os argumentos de escala de tamanho finito similares podem ser usados para analisar os dados do calor específico. Na temperatura de transição, os dados relatados na figura 40a indicam que $C_v(N \rightarrow \infty, T_c)$ converge para um valor finito, uma característica compartilhada pela transição BEC gás ideal em redes regulares. A parte singular do calor específico $C_v(N \rightarrow \infty, T_c) - C_v(N, T)$ também obedece a uma escala de parâmetro único. No ponto crítico, a parte singular escala com $C_v(N \rightarrow \infty, T_c) - C_v(N, T) \propto N^{-\alpha/\nu}$. A dependência da contribuição singular do calor específico no ponto crítico é mostrada na figura 43 para uma densidade de partículas $N_p/N = 1/2$, onde nossa melhor estimativa foi $C_v(N \rightarrow \infty, T_c)/k_B N_p = 0.801$ e $\alpha/\nu = -0.26$. Junto com a estimativa anterior do expoente de correlação, este último resultado implica em $\alpha = -0.62$. Notadamente, a relação de hiperescala $\nu = 2 - \alpha$ é violada no presente sistema. Esse resultado é um reflexo dos efeitos de tamanho finito, uma vez que usamos redes apolonianas de tamanhos pequenos, muito distantes do limite termodinâmico.

Conclusão

Neste trabalho, estudamos as propriedades termodinâmicas de gases quânticos não interagentes confinados em uma rede de Apolônio. Usando o modelo *tight-binding*, o espectro de energias foi calculado a partir da diagonalização numérica do hamiltoniano, com a energia de *hopping* sendo reescalada pela média geométrica da conectividade entre sítios. Foi observado que o espectro de energia apresenta uma distribuição de estados assimétrica, devido a ausência de simetria quiral da rede. O cálculo da densidade de estados integrada revelou a existência de níveis degenerados, com a presença de minibandas principalmente na parte superior do espectro. Além disso, foi observado que a densidade de estados integrada escala com $E^3/2$ na parte inferior do espectro.

No estudo das propriedades termodinâmicas de um gás de elétrons não interagentes em uma rede de Apolônio, foi observado que o uso de uma energia de *hopping* reduziu os efeitos de tamanho finito sobre o calor específico do sistema. Na região de altas temperaturas, foi visto que o calor específico apresenta o comportamento típico de sistema com o espectro de energia delimitado, com $C_v \propto T^{-2}$. Além disso, foi obtido que a existência de minibandas na parte superior do espectro induz o surgimento de oscilações log-periódicas no calor específico, que são características de um sistema com um espectro de energia fractal. Nossos resultados indicam que as oscilações log-periódicas tornam-se mais acentuadas à medida que um maior número de minibandas preenchido.

No caso do gás de bósons não interagentes confinado numa rede de Apolônio, foi observado que a fugacidade apresenta o comportamento típico para um sistema em que ocorre a condensação de Bose-Einstein. Em particular, foi mostrado que a utilização da média geométrica da conectividade entre os sítios como parâmetro de escala para energia de *hopping* reduziu sensivelmente os efeitos de tamanho finito observados em trabalhos anteriores, com a remoção da dependência anômala da temperatura de transição com o tamanho da rede. Mais especificamente, foi observado que a temperatura de transição decai com o tamanho da rede seguindo uma lei de potência, com $T_c \propto N^{1/3}$. Tal dependência é reflexo da redução da diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado com o tamanho da rede. Nossos resultados mostram que condensação de Bose-Einstein é uma transição de segunda ordem. As leis de escala para o número de partículas no estado fundamental (parâmetro de ordem) e para o comprimento de correlação foram determinadas.

Os resultados deste trabalho auxiliaram a compreender o comportamento das propriedades termodinâmicas de gases quânticos não interagentes em redes de Apolônio. É importante ressaltar que a rede de Apolônio é uma rede hierárquica livre de escala que possui propriedades multifractais. Desta forma, os resultados obtidos podem motivar o estudo das propriedades de gases quânticos em outras redes complexas com características similares as da rede de Apolônio. Uma possibilidade é estudo da condensação de Bose-Einstein numa rede diamante, que possui características topológicas semelhantes as da rede de Apolônio. Um outro problema que pode ser investigado é como o acoplamento entre duas redes afeta as propriedades termodinâmicas de um gás de férmions não interagentes.

REFERÊNCIA

- [1] BREHM, J.J.; MULLIN, W.J. Introduction to the structure of the matter: a course in modern physics. Weley, 1989.
- [2] PATHRIA, R.K. Statistical Mechanics. Butterworth Heinemann, second edition, 1996.
- [3] REIF, F. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics McGrall Hill, 1965.
- [4] COHEN, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum Machanics. Wiley, 1977.
- [5] GREINAR, W.; NEISE, L.; STÖCKER, H. Thermodynamics and Statistical Mechanics. Springer, second edition, 1997.
- [6] ASCROFT, N.W.; MERMIN, N.D. Solid state physics. Brooks/Cole, 1976.
- [7] KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, 2005.
- [8] WHEATLEY, J.C. Experimental properties of superfluid (3)He. Reviews of modern physics, v.47, n.2, p.415, 1975.
- [9] VOLLHARDT, D.; WÖLFLE, P. The Superfluid phases of helium 3. Taylor & Francis, 1990.
- [10] ANDERSON, P.W. Considerations on the flow of superfluid helium. Reviews of modern physics, v.38, n.7, p.298, 1966.
- [11] TOSHIO, S.; RAMABADHRA, V. Thermodynamic Behavior of Lifluid Helium-Three in Its Possible Superfluid Phase. Physical Review, v.125, n.5, p.1484, 1962.
- [12] BORGHESANI, A.F.; SANTINI, M. High-temperature electron localization in dense He gas. Physical Review E, v.65, p.056403, 2002.
- [13] DAVIS, K.M.; MIURA, K; SUGIMOTO, N. Writing waveguides in glass with a femtosecond laser. Optics Letters, v.20, p.1729, 1996.
- [14] MACIÁ, E. The role of aperiodic order in science and technology. Reports on Progress in Physics, v.69, n.2, p.397, 2006.
- [15] DAY, R.S.; SUHAI, S.; LADIK, J. Electronic structure in large finite aperiodic polypeptide chains. Chemical Physics, v.62, p.165, 1981.
- [16] SEEL, M. Electronic spectra of aperiodic protein model chains. Chemical Physics, v.43, p.103, 1979.
- [17] KELLER, M.; METZNER, W. Thermodynamics of a superconductor with strongly bound Cooper pairs. Physical Review B, v.60, n.5, p.3499, 1999.
- [18] SCHROEDER, D.V. Thermal physics. Addison Wesley Longman, 1999.
- [19] ZWIERLEIN, M.W. et al. Fermionic superfluidity with imbalanced spin population. Scienci, v.311, p.492, 2006.
- [20] ZWIERLEIN, M.W. et al. Direct observation of the superfluid phase transition in ultracold Fermi gases. nature, v.442, n.6, p.54, 2006.
- [21] FUJITA, S. et al. Foundations of Physics Lettes, v.5, p.471., 1999.
- [22] REICHL, L.E. A Mordern Course in Statistical Physics. John Wiley & Sons, 1998.
- [23] RUEDA, J.A.; RUFFINI, R.. Towards a relativistic Thomas-Fermi Theory of white dwarfs and neutron stars. International Jornal of modern physics E, v.20, p.141,

- 2011.
- [24] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, second edition, 1987.
 - [25] CORNELL, E.A.; WIEMAN C.A. Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. *Reviews of modern physics*, v.74, p.875, 2002.
 - [26] ANDERSON, M.H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269:198, 1995.
 - [27] GLASHOW, S.L.; GELL-MANN, M. Gauge theories of vector particles. *Annals of physics*, v.15, p.437, 1961.
 - [28] BOYARKIN, O.M. *Introduction to physics of elementary particles*. Nova Science Publishers, 2007.
 - [29] DE SANDES, H.; ROSENFELD, R. Radion-Higgs mixing effects on bounds from LHC Higgs boson searches. *Physical Review D*, v.85, p.053003, 2012.
 - [30] SPIRA, M. et al. Higgs boson production at the LHC. *Nuclear Physics B*, v.453, p.17, 1995.
 - [31] SIEGEL, R.; HOWELL, J. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor & Francis, 2002.
 - [32] PINES, D. *Elementary excitations in solids*. Perseus Books, 1999.
 - [33] SCHIFF, D.; VERLET, L. Ground State of Liquid Helium-4 and Helium-3. *Physical Review*, v.160, n.1, p.208, 1967.
 - [34] TISZA, L. The Theory of Liquid Helium. *Physical Review*, v.72, n.9, p.838, 1947.
 - [35] PENROSE, O.; ONSAGER, L. Bose-einstein Condensation and Liquid Helium. *Physical Review*, v.104, n.3, p.576, 1956.
 - [36] ANCO, S.C.; BLUMAN, G. Nonlocal symmetries and nonlocal conservation laws of Maxwell's equations. *J. Math. Phys.*, v.38, p.3508, 1997.
 - [37] RENSHAW C.E.; KALLFELZ W.M. The radiation continuum model of light and the galilean invariance of Maxwell's equations. *Aerospace and electronic systems magazine*, v.13, p.3, 1998.
 - [38] ANCO, S.C.; DENNIS, T.H.E. Symmetries, Conservation Laws, and Cohomology of Maxwell's Equations Using Potentials. *Acta Applicandae Mathematicae*, v.89, p.1, 2005.
 - [39] BRADING, K.; CASTELLANI, E. *Symmetries in Physics: Philosophical Reflections*. Cambridge, 2003.
 - [40] ZALLEN, R. *The physics of amorphous solids*. John Wiley &, 1998.
 - [41] DEBENEDETTI, P.G. et al Theory of supercooled liquids and glasses: energy landscape and statistical geometry perspectives. *Adv. Chem. Engin.*, v.28, p.21, 2001.
 - [42] GREER, A.L. *Metallic Glasses*. *Science*, v.267, p.1947, 1995.
 - [43] JENNISKENS, P.; BLAKE D.F. Structural transitions in amorphous water ice and astrophysical implications. *Science*, v.265, p.753, 1994.
 - [44] TILLEY, R.J.D. *Crystals and Crystal Structures*. John Wiley & Sons, 2006.
 - [45] SHECHTMAN, D. et al. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical Review Letters*, v.53, p.1951, 1984.
 - [46] LEVINE, D.; STEINHARDT, P.J. Quasicrystals. I. Definition and structure. *Physical Review B*, v.34, p.596, 1986.
 - [47] VAN DER LINDEN, M.N.; DOYE, J.P.K.; LOUIS, A.A. Formation of dodecagonal quasicrystals in two-dimensional systems of patchy particles. *Journal of Chemical Physics*, v.136, p.054904, 2012.

- [48] MICHALCOVA, A. Quasicrystals or - for What The Nobel Prize in Chemistry Was Awarded in 2011. *Chemicke Listy*, v.106, p.55, 2012.
- [49] BELIN-FERRÉ, E.; FOURNÉE, E.; DUBOIS, J.M. Quasicrystals. I. Definition and structure. *Mater. Trans.*, v.42, p.911, 2001.
- [50] COSTA, C.H.O.; et al. Fractal spectra in generalized Fibonacci one-dimensional magnonic quasicrystals. *Journal of magnetism and magnetic materials*, v.324, p.2315, 2012.
- [51] JANOT, C. Conductivity in quasicrystals via hierarchically variable-range hopping. *Physical Review B*, v.53, p.181, 1996.
- [52] MACIÁ, E. Thermal conductivity in complex metallic alloys: Beyond Wiedemann-Franz law. *Physical Review B*, v.79, p.245112, 2009.
- [53] BARBER, E.M. *Aperiodic Structures in Condensed Matter*. CRC Press, 2009.
- [54] DRONAMRAJU, K.R. Erwin Schrödinger and the Origins of Molecular Biology. *Genetics*, v.153, p.1071, 1999.
- [55] MONTALBÁN, A. et al. Selective spatial localization of the atom displacements in one-dimensional hybrid quasi-regular (Thue–Morse and Rudin–Shapiro)/periodic structures. *Surface Science*, v.601, p.2538, 2007.
- [56] ANDRADE, R.F.S.; PINHO, S.T.R. Break of universality for an Ising model with aperiodic Rudin-Shapiro interactions. *Eur. Phys. J. B*, v.34, p.343, 2003.
- [57] PROVATA, A.; ALMIRANTIS, Y. Fractal Cantor patterns in the sequence structure of DNA. *Fractals-complex geometry patterns and scaling in nature and society*, v.8, p.15, 2000.
- [58] LIU, X.L.; LIANG, L.W.; LI, J. Correlation property and electronic transfer property of Cantor-styled artificial DNA sequence. *Acta Physica Sinica*, v.60, n.077201, 2011.
- [59] CALDARELLI, G; VESPIGNANI, A. *Large scale structure and dynamics of complex networks*. World Scientific, 2007.
- [60] PASTOR-SATORRAS, R.; RUBI, M.; DIAZ-GUILERA, A. *Statistical Mechanics of Complex Networks*. Springer, 2003.
- [61] ALBERT, R; BARABÁSI, A. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of modern physics*, v.74, p.47, January 2002.
- [62] JEONG, H.; TOMBOR, B.; ALBERT, R. The large-scale organization of metabolic networks. *Nature*, v.407, p.651, 2000.
- [63] DITTRICH, P. et al. Spontaneous Group Formation in the Seceder Model. *Physical Review Letters*, v.84, p.3205, 2000.
- [64] BOCCALETTI, S. et al. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports*, v.424, p.175, 2006.
- [65] BARABÁSI, A.L. et al. Evolution of the social network of scientific collaborations. *Physica A*, v.311, p.590, 2002.
- [66] DEHMER, M. *Structural analysis of complex networks*. Dirkhäuser, 2011.
- [67] TRAVERS, J.; MILGRAM, S. An experimental study of the small world problem. *Sociometry*, v.32, n.4, p.425, 1969.
- [68] ALBERT, R.; HAWOONG; BARABÁSI, A.L. Error and attack tolerance of complex networks. *Nature*, v.406, p.378, 2000.
- [69] BARABÁSI, A.L. et al. Scale-free and hierarchical structures in complex networks. *AIP Conf. Proc.*, v.661, p.1, 2002.
- [70] RAVASZ, E. et al. Hierarchical Organization of Modularity in Metabolic Networks. *Science*, v.297, p.1551, 2002.

- [71] SAMPATH, P. et al. A hierarchical network controls protein translation during murine embryonic stem cell self-renewal and differentiation. *Cell Stem Cell*, v.2, n.5, p.448, 2008.
- [72] ANDRADE, J.S., Jr et al. Apollonian Networks: Simultaneously Scale-Free, Small World, Euclidean, Space Filling, and with Matching Graphs. *Physical Review Letters*, v.94, p.01870, 2005.
- [73] Andrade, R.F.S.; HERRMANN, H.J. Magnetic models on Apollonian networks. *Physical Review E*, v.71, p.056131, 2005.
- [74] ARAÚJO, N.A.M.; ANDRADE, R.F.S.; HERRMANN, H.J. q-state Potts model on the Apollonian network. *Physical Review E*, v.82, p.046109, 2010.
- [75] DE OLIVEIRA, I.N. et al. Free-electron gas in the Apollonian network: Multifractal energy spectrum and its thermodynamics fingerprints. *Physical Review E*, v.79, p.016104, 2009.
- [76] DE OLIVEIRA, I.N. et al. Bose-Einstein condensation in the Apollonian complex network. *Physical Review B*, v.81, p.030104, 2010.
- [77] ANGELESCU, N.; VERBEURE, A.; ZAGREBNOV, V. A. On Bogoliubov's model of superfluidity. *J. Phys A: Math Gen.*, v.25, p.3473, 1992.
- [78] OSHEROFF, D.D.; RICHARDSON, R.C.; LEE, D.M. Evidence for a New Phase of Solid He3. *Physical Review Letters*, v.28, p.885, 1976.
- [79] SHANENKO, A.A. Imperfect Fermi gas: Kinetic and interaction energies. *Physical Review A*, v.70, p.063618, 2004.
- [80] BARDEEN, J.; COOPER, L.N.; SCHRIEFFER, J.R. Theory of Superconductivity. *Physical Review*, v.108, n.5, 1957.
- [81] ALVESALO, T.A. et al. Experimental determination of viscosity and density of the normal component of superfluid ^3He at the melting curve. *Physical Review Letters*, v.32, n.18, 1974.
- [82] PETHICK, C.J.; SMITH, H.; BHATTACHARYYA, P. Viscosity and thermal conductivity of superfluid ^3He : Low-temperature limit. *Physical Review Letters*, v.34, n.11, 1975.
- [83] MANNHART, J. et al. Electric Field effect in high- T_c superconductors. *Journal of Alloys and Compounds*, v.195, p.519, 1993.
- [84] LICHTENBERG, F. et al. Properties of the new Bi-Sr-Ca-Cu-O superconductors. *Physica C*, v.153, p.617, 1988.
- [85] GREENE, R.L. et al. Evidence for electron-electron correlations in La_2CuO_4 and $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ superconductors. *Solid State Communications*, v.63, n.5, p.379, 1987.
- [86] FUKUDA, K. et al. Magnetic properties of La_2CuO_4 single crystals. *Solid State Communications*, v.63, n.9, p.811, 1987.
- [87] PHILLIPS, P. *Advanced solid state physics*. Westview press, 2003.
- [88] SIGRIST, M.; UEDA, K. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Reviews of modern physics*, v.63, n.2, p.239, 1991.
- [89] TRUSCOTT, A.G. et al. Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms. *Science*, v.291, p.2570, 2001.
- [90] JANOT, C.; DE BOISSIEU, M. Quasicrystals as a hierarchy of Clusters. *Physical Review Letters*, v.72, n.11, p.1674, 1994.
- [91] LONDON, F. On the Bose-Einstein Condensation. *Physical Review*, v.54, n.1, p.947, 1938.
- [92] HUANG, K. Transition temperature of a uniform imperfect Bose gas. *Physical*

- Review Letters, v.83, n.19, p.3770, 1999.
- [93] FANNES, M.; VERBEURE, A. The condensed phase of the imperfect Bose gas. *J. Math. Phys.*, v.21, p.1809, 1980.
 - [94] LIEB, E.H.; LINIGER, W. Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State. *Physical Review*, v.130, n.4, p.1605, 1963.
 - [95] SAKURAI, J.J. *Modern quantum mechanics*. Addison Wesley Longman, 1994.
 - [96] MCKINNEY, B.A.; DUNN, M.; WATSON, D.K. N identical particles under quantum confinement: a many-body dimensional perturbation theory approach. *Annals of physics*, v.310, p.56, 2004.
 - [97] KASTENING, B. Bose-Einstein condensation temperature of a homogenous weakly interacting Bose gas in variational perturbation theory through seven loops. *Physical Review A*, v.69, p.043613, 2004.
 - [98] KASTENING, B. Bose-Einstein condensation temperature of a homogeneous weakly interacting Bose gas in variational perturbation theory through six loops. *Physical Review A*, v.68, p.061601, 2003.
 - [99] BOGOLIUBOV, N.N. On the theory of superfluidity. *J. Phys. (USSR)*, v.11, p.23, 1947.
 - [100] KAPITULA, T.; KEVREKIDIS, P.G. Bose-Einstein condensates in the presence of a magnetic trap and optical lattice. *Chaos*, v.15, p.037114, 2005.
 - [101] MATSUI, T. BEC of free bosons on networks. *Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics*, v.9, n.1, p.1, 2006.
 - [102] BURIONI, R. et al. Bose-Einstein condensation on inhomogeneous complex networks. *J. Phys. B: At. Mom. Opt. Phys.*, v.34, p.4697, 2001.
 - [103] BRUNELLI, I. et al. Topology-induced spatial Bose-Einstein condensation for bosons on star-shaped optical networks. *J. Phys. B: At. Mom. Opt. Phys.*, v.37, p.S275, 2004.
 - [104] DALFOVO, F.; GIORGINI, S.; PITAEVSKII, L.P. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of modern physics*, v.71, p.463, 1999.
 - [105] SANCHEZ-PALENCIA, L.; SANTOS, L. Bose-Einstein condensates in optical quasicrystal lattices. *Physical Review A*, v.72, p.053607, 2005.
 - [106] VIDAL, E.J.G.G.; LIMA, R.P.A.; LYRA, M.L. Bose-Einstein condensation in the infinitely ramified star and wheel graphs. *Physical Review E*, v.83, p.061137, 2011.
 - [107] WU, B.; NIU, Q. Landau and dynamical instabilities of the superflow of Bose-Einstein condensates in optical lattices. *Physical Review A*, v.64, p.061603, 2001.
 - [108] YAN, Z. et al. Density of states and thermodynamic properties of an ideal system trapped in any dimension. *J. Phys A: Math Gen.*, v.32, p.4069, 1999.
 - [109] LIEB, E.H.; SEIRINGER, R.; YNGVASON, J. One-Dimensional Behavior of Dilute, Trapped Bose Gases. *Communications in Mathematical Physics*, v.244, p.347, 2004.
 - [110] DE OLIVEIRA, I.N. et al. Bosons with multifractal energy spectrum: specific heat log periodicity and Bose-Einstein condensation. *J. Phys.: Condens. Matter*, v.17, p.3499, 2005.
 - [111] DE OLIVEIRA, I.N.; LYRA, M.L.; ALBUQUERQUE, E.L. Specific heat anomalies of non-interacting fermions with multifractal energy spectra. *Physica A*, v.343, p.424, 2004.
 - [112] BOYD, D.W. Osculatory packing of a 3 dimensional sphere. *Canadian journal of mathematics*, v.25, p.303, 1973.