



**Universidade Federal de Sergipe**

**Centro de Ciências Exatas e Tecnologia**

**Departamento de Física**

**Curso de Física Bacharelado**

**Nadine Vieira Almeida Rocha**

**Estudo do condensado de Bose-Einstein em redes complexas**

**Trabalho de Conclusão de Curso**

**São Cristóvão - SE  
Brasil  
2023**

Nadine Vieira Almeida Rocha

## **Estudo do condensado de Bose-Einstein em redes complexas**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharelado em Física

**Orientador:** André Mauricio Conceição De Souza

*Dedico à Nadir e Nina,  
por serem a vida da minha vida.*

# Agradecimentos

Agradeço ao meu Senhor, por estar em cada parte desta caminhada, me direcionando e dando força, "sem ti sou grão de areia perdido num imenso mar."

Agradeço a minha família, em especial à Nadir, minha mãe, por ser meu porto seguro, estar sempre ao meu lado e ser a pessoa mais importante da minha vida. Às minhas tias e primas por todo o incentivo e conselhos ao longo dos anos.

Agradeço a família que escolhi ao longo da vida, meus amigos. Às amizades preciosas que levo desde o Arqui: Natália, Jéssica, Luana, Hanna, Ananda, Diana, Luanna, Jeangela, Ana Amélia, Bianca, Thiago, Caio Matheus e Raffael. Aos meus amigos que cultivei na UFS, em especial, Lucas, Renato, Davi, Eliaquim e Otávio, meu amor, colegas que tanto me apoiaram e aconselharam sobre a física e a vida. Aos amigos de fé que ganhei com o movimento Escalada, em especial Jana. Aos amigos do Tortuga, em especial Andressa e Brenda. E ao acolhimento e parceria dos meninos do Pople, em especial Cláudio e Gabriel, que tanto me aconselharam sobre este trabalho.

Agradeço a todos professores que foram mestres para mim, que tanto me ensinaram e incentivaram ao longo deste anos, em especial os doutores André Maurício, Ricardo Freire, José Diogo, Stoian Zlatev e Marcus Vinicius, que sempre foram solícitos em tirarem minhas dúvidas e conselhos.

Bósons são partículas que não se restringem ao princípio de exclusão de Pauli. Com a diminuição da temperatura, elas podem formar um condensado, conhecido como condensado de Bose-Einstein. Conectando a mecânica estatística quântica com a teoria de redes complexas, estudamos o condensado a partir do número de partículas, temperatura crítica e calor específico em função das características das redes. Redes complexas são formas eficientes de observar e analisar conexões da natureza a partir de um conjunto de pontos e linhas. Nos aprofundamos na história, importância e propriedades das redes complexas e na rede pequeno mundo, um tipo de rede complexa que inicialmente pretendia estudar a sociedade, mas posteriormente passou a ser aplicada a outros campos do conhecimento. Aplicamos os conhecimentos abordados em uma rede complexa tipo estrela e em uma rede complexa tipo pequeno mundo. Na rede estrela, reobtivemos os resultados de Vital e colaboradores [Vidal et al., Phys. Rev. E 83, 061137 (2011)]. O desafio de se reproduzir experimentalmente o condensado de Bose-Einstein, que pode ter diversas utilidades para a sociedade, concentra-se na exigência de temperaturas críticas muito baixas. Na rede de campo médio, percebemos que os parâmetros  $k$  e  $q$  se comportam como a dimensão de uma rede regular e isso permite com que possamos cada vez mais aumentar a temperatura crítica do nosso sistema somente aumentando o número de ligações.

**Palavras Chaves:** Física, Mecânica Estatística Quântica, Redes complexas, Condensado de Bose-Einstein

# Abstract

Bosons are particles that are not restricted by Pauli's exclusion principle. As the temperature decreases, they can form a condensate, known as Bose-Einstein condensate. Connecting quantum statistical mechanics with network theory, we study the condensate by the number of particles, critical temperature and the specific heat as a function of the characteristics of the networks. Networks are efficient ways of observing and analyzing connections in nature from a set of points and lines. We delve deeper into the history, importance and properties of networks and small world networks, a specific type of network that aims to study society, but is applied in various fields of knowledge. We apply the knowledge covered in a star-type network and a mean field network. In the star network, we reobtained the results of Vidal et al. [Vidal et al., Phys. Rev. E 83, 061137 (2011)]. The challenge of experimentally reproducing the Bose-Einstein condensate, which can have many uses for society, focuses on the requirement for very low critical temperatures. In the mean field network, we notice that the parameters  $k$  and  $q$  behave like a dimension of a regular network and this allows us to increasingly increase the critical temperature of our system just by increasing the number of connections.

**Keywords:** Physics, Quantum Statistical Mechanics, Networks, Bose-Einstein Condensate

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Condensado de Bose-Einstein</b>	<b>5</b>
2.1	Condensado de Bose-Einstein em 3 dimensões . . . . .	11
2.1.1	Conexão com a termodinâmica . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Redes complexas</b>	<b>22</b>
3.0.1	Matriz de adjacência . . . . .	24
3.1	Propriedades de uma rede complexa . . . . .	24
3.1.1	Número de vértices(N) . . . . .	25
3.1.2	Número de ligações(E) . . . . .	25
3.1.3	Conectância . . . . .	25
3.1.4	Grau do vértice . . . . .	26
3.1.5	Distribuição de grau $p(k_i)$ . . . . .	26
3.2	O problema do pequeno mundo . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Análise do Condensado de Bose-Einstein em uma rede estrela</b>	<b>29</b>
<b>5</b>	<b>Análise do Condensado de Bose-Einstein em uma rede campo médio de pequeno mundo</b>	<b>41</b>
5.1	A rede . . . . .	41
5.2	Hamiltoniana . . . . .	42
5.3	Espectro . . . . .	46
5.4	Médias . . . . .	49

<b>6 Conclusões</b>	<b>54</b>
<b>Referências</b>	<b>56</b>

# Lista de Figuras

1.1	Representação das pontes. Imagem: <a href="https://physics.weber.edu/carroll/honors/konigsberg.htm">https://physics.weber.edu/carroll/honors/konigsberg.htm</a> . .....	2
3.1	As pontes de Königsberg, fonte: Adérito Araújo / Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra/Montagem sobre reprodução. ....	22
4.1	$z$ em função de $\frac{T}{T_c}$ .....	34
4.2	$\frac{N_0}{N}$ em função de $\frac{T}{T_c}$ .....	35
4.3	$\frac{c_v}{k_B L}$ em função de $\frac{T}{T_c}$ .....	38
5.1	Rede pequeno mundo com 15 nós, com $q = 1$ . ....	41
5.2	Rede complexa com 10 nós, $k = 2, q = 0$ . ....	44
5.3	Rede complexa com 10 nós, $k = 2$ , para todo $0 < q < 1$ . ....	44
5.4	Rede complexa com 10 nós, $k = 4, q = 0$ . ....	45
5.5	Rede complexa com 10 nós, $k = 4, 0 < q < 1$ . ....	45
5.6	Rede complexa com 10000 nós, $k = 2$ , observando variação de $q$ . ....	50
5.7	Rede complexa com 10000 nós, $k = 4$ , varia $q$ . ....	50
5.8	Rede pequeno mundo com 10000 nós, $q = 0.99$ , observa-se a variação de $k$ . . .	51
5.9	Rede complexa com 10000 nós, $k = 2, T_c$ em função de $q$ . ....	52
5.10	Rede complexa com 10000 nós, $k = 4, T_c$ em função de $q$ . ....	52
5.11	Rede pequeno mundo com 10000 nós, $\frac{T_c}{k}$ . ....	52

O mundo é composto de partículas que podem ser férmions ou bósons. Os férmions possuem spin semi-inteiro e respeitam o princípio de exclusão de Pauli. Este princípio determina que nunca podemos ter mais de um férmion num mesmo estado quântico. Um conjunto de férmions respeita a distribuição de Fermi-Dirac. Como os elétrons tem spin  $1/2$ , são férmions e por isto podem haver somente dois elétrons em cada orbital atômico.

Já bósons possuem spin inteiro e não respeitam o princípio de exclusão, podendo compartilhar o mesmo estado quântico. Esta característica é crucial para o acontecimento do chamado condensado de Bose-Einstein, que é o acúmulo de partículas bosônicas num mesmo estado quântico em escala macroscópica. O condensado de bósons, conhecido atualmente como condensado de Bose-Einstein, foi proposto em 1924, quando o físico Bose não recorreu a física clássica para obter a fórmula de Plack do espectro do corpo negro. De início, seu trabalho foi rejeitado. Contudo, ele o enviou para Einstein, que estendeu os cálculos para átomos não inteiramente e o publicou (1). A partir disso, Einstein pôde notar que em temperaturas baixas, mas diferentes de  $T = 0k$ , uma grande quantidade de átomos vão para o estado de menor energia, segundo ele "Uma separação é efetiva, uma parte condensa, o resto permanece um 'gás ideal saturado'."

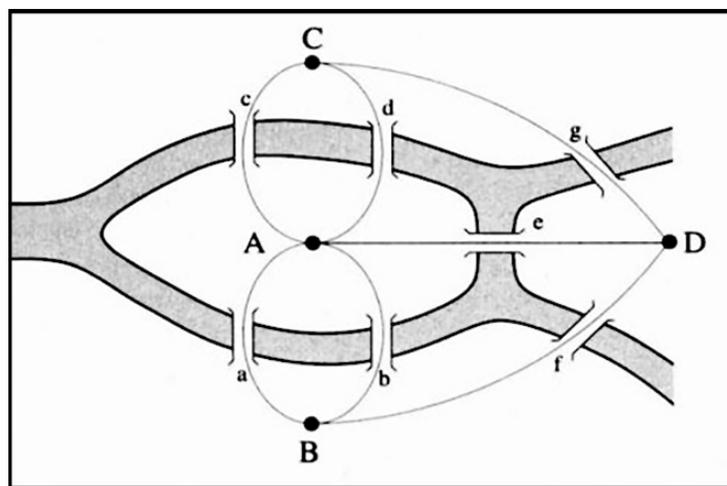
A medida que um gás é submetido a temperaturas muito baixas, com a agitação térmica cada vez menor, suas funções de onda aumentam e, se ele for denso o suficiente, essas funções de onda de DeBroglie chegam a se sobrepor. As funções de ondas do gás de bósons se superpõem construtivamente e formam uma grande função de onda, que pode exibir uma ordem de grandeza macroscópica e assim uma fase quântica, muitas vezes conhecidas como a quarta fase da matéria, além das fases sólida, líquida e gasosa.

A observação do condensado de Bose-Einstein aconteceu somente décadas depois com

Anderson e colaboradores (2), quando o grupo do MIT verificou a existência da condensação de Bose-Einstein em um vapor de átomos de rubídio-87 confinado por armadilhas magneto-ópticas juntamente com laser e resfriamento evaporativo a escalas de nanokelvin. Achou-se o condensado perto de uma temperatura de 170nK.

As aplicações do condensado são grandes, como a interferometria atômica estudada por Lachmann e colaboradores, (3) e a computação quântica, já estudada por (4). Mas a dificuldade de observação do condensado de Bose-Einstein experimentalmente é por exigir temperaturas críticas perto de 0K e densidades muito altas para que as funções de onda de DeBroglie se sobreponham, fazendo assim o estado fundamental macroscopicamente populado. O condensado já foi observado no hidrogênio (5), hélio metaestável (6) e potássio (7).

A teoria de redes se iniciou com o chamado desafio das pontes da cidade de Königsberg. Neste desafio se tentava entender se poderia caminhar por todas as ilhas que formam a cidade sem passar duas vezes pela mesma ponte. Este desafio foi solucionado por Euler, que resolveu o problema designando as ilhas como vértices e as pontes como arestas de uma figura matemática chamada de rede, como ilustrado na figura. Neste caso, uma rede complexa.



**Figura 1.1:** Representação das pontes. Imagem: <https://physics.weber.edu/carroll/honors/konigsberg.htm>.

Redes complexas são formas eficientes de organizar informações a partir de dois objetos matemáticos: vértices (pontos) e arestas (retas). As redes são formadas por um conjunto de vértices ligados pelas arestas. A partir do conjunto de arestas e vértices que formam as redes são realizados estudos através da observação de suas formas de organização e propriedades. Através da teoria de redes, podemos estudar os mais diversos tipos de conhecimento, tais como biologia, matemática e finanças.

Um tipo de rede que ganhou destaque foi a rede pequeno mundo, a partir do estudo do campo da psicologia feito por Milgram (8). O experimento, realizado por Milgram, estudou quantos passos (arestas) é preciso dar para que duas pessoas (vértices) escolhidas aleatoriamente em um grande sistema possam se conectar. O impacto neste estudo é a constatação que somente precisa-se em média de no máximo seis pessoas para intermediar esses dois indivíduos remotamente distantes. Porém, as redes de pequeno mundo não somente se aplicam à sociedade, como exemplificado por Duncan e colaboradores (9), mas em sistemas diversos como o sistema cerebral de um verme ou a rede elétrica dos Estados Unidos.

O primeiro a conectar a o condensado de Bose-Einstein com a teoria de redes complexas foi o físico Albert-László Barabási, que criou modelos como Bianconi-Barabási (10), modelo que captura as mudanças presentes nas redes de acordo com a evolução temporal, o modelo se baseia em duas características de redes em crescimento: o constante crescimento pela adição de vértices e arestas novas e a capacidade de cada vértice de adquirir vértices novos, a aptidão do vértice, por isso o modelo é chamado de *fitness*. O segundo modelo criado foi Barabási-Albert (11), utilizado em redes sem escala descrito por dois conceitos: crescimento e anexação preferencial, baseado em *feedbacks* positivos.

A conexão das redes complexas com o condensado tem perpassado na biologia, como em redes neurais por Byrnes e colaboradores (12), no estudo marítimo de ondas gigantes por Xiao-Dong Bai e Dongxiao Zhang (13), mas o desafio de observar na prática o condensado de Bose-Einstein persiste.

Este trabalho tem como objetivo juntar o problema do condensado de Bose-Einstein e a teoria de redes complexas. Mais precisamente, estudamos a possibilidade da existência do condensado de Bose-Einstein em redes complexas.

No capítulo 2 será tratado sobre o condensado de Bose-Einstein, estudando-o a partir da mecânica estatística quântica. Baseamos nossa apresentação pelos livros de Pathria e colaboradores (14) e Kubo e colaboradores (15).

No capítulo 3 será estudado as redes complexas, analisando sua importância, propriedades e, em particular, as redes de pequeno mundo.

No capítulo 4 será reproduzido os cálculos feitos por Vidal e colaboradores (16) sobre o condensado de Bose-Einstein em uma rede complexa tipo estrela.

Estes resultados serão cruciais para o alcance do nosso principal objetivo: estudar a possibilidade da existência do condensado de Bose-Einstein em redes complexas de campo médio.

No capítulo 5, o objetivo se concentra na utilização da rede introduzida por (17). A partir dos cálculos analíticos para a diagonalização da matriz Hamiltoniana que caracteriza a rede de campo médio, analisaremos como se comporta o condensado de Bose-Einstein em tal rede.

No capítulo 6, finalmente, apresentou-se que os parâmetros  $q$  e  $k$  são responsáveis por aumentar a temperatura crítica da rede, ou seja, o grande desafio de fazer com que esta temperatura chegue a temperatura ambiente pode ser alcançada aumentando o número de ligações da rede. Em trabalhos futuros, estudaremos como todas propriedades termodinâmicas se comportarão de acordo com estes parâmetros.

## Condensado de Bose-Einstein

De acordo com Pathria e colaboradores (14), para começar os estudos do condensado de Bose-Einstein imagina-se um sistema de  $N$  partículas idênticas confinadas em um volume  $V$  e com energia  $E$ . Estuda-se  $\Omega(N, V, E)$ , que significa o número de microestados possíveis de serem acessados pelo sistema.

Os níveis de energia, para um volume grande, são muitos próximos uns dos outros, precisamos, então, dividir o espectro em um grande número de células de energia, que são agrupamentos de energias.

Sendo  $\varepsilon_i$  as energias,  $n_i$  o número de partículas e  $g_i$  a degenerescência dos  $i$ -ésimos níveis, para  $g_i \gg 1$ , o conjunto respeita tais regras:

$$N = \sum_i n_i \quad (2.1)$$

$$E = \sum_i n_i \varepsilon_i. \quad (2.2)$$

Desse modo,

$$\Omega(N, V, E) = \sum_{n_i} W(n_i) \quad (2.3)$$

Em que  $W(n_i)$  é o número de microestados associados ao conjunto de distribuição  $n_i$

$$W(n_i) = \prod_i w(i). \quad (2.4)$$

Sendo  $w(i)$  o número de microestados associados ao  $i$ -ésimo nível do espectro de energia, o produto permite percorrer todo o espectro, ou seja,  $w(i)$  represente o número de possibilidade que  $n_i$  partículas iguais podem ser organizadas nos  $g_i$ .

Sabendo que:

$$P = \frac{(R+N-1)!}{R!(N-1)!} \quad (2.5)$$

$$w(i) = \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}, \quad (2.6)$$

pondo (2.6) em (2.4), achamos:

$$W(n_i) = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}. \quad (2.7)$$

Usando (2.3), a entropia é dada por:

$$S(N, V, E) = k_B \ln \Omega(N, V, E) = k_B \ln \left[ \prod_i W(n_i) \right]. \quad (2.8)$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

Sabendo que o logaritmo da soma pode ser aproximadamente o logaritmo do maior termo da soma:

$$S(N, V, E) \approx k_B \ln W(\bar{n}_i), \quad (2.9)$$

em que  $\bar{n}_i$  consiste no conjunto de distribuição que consegue maximizar  $W(\bar{n}_i)$ , ou seja,  $\bar{n}_i$  são os valores, dentre  $n_i$  mais prováveis.

Possuindo (2.1) e (2.2) como vínculos, usa-se o método dos multiplicadores de Lagrange para determinar a distribuição mais provável de maximização. Tem-se que:

$$\left[ \delta S - \left( \alpha \sum_i \delta n_i + \beta \sum_i \varepsilon_i \delta n_i \right) \right] = 0 \quad (2.10)$$

$$\left[ \delta \ln W(n_i) - \left( \alpha \sum_i \delta n_i + \beta \sum_i \varepsilon_i \delta n_i \right) \right] = 0. \quad (2.11)$$

Determina-se

$$\ln W(n_i) = \ln \left[ \sum_i w(i) \right] = \ln \left[ \sum_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} \right] \quad (2.12)$$

usando a fórmula de Stirling, pois possui-se, tanto no numerador quanto no denominador, fato-

rial de números muito grandes, obtém-se:

$$= \sum_i ((n_i + g_i - 1)!) - \ln(n_i!(g_i - 1)!) \quad (2.13)$$

$$= \sum_i ((n_i + g_i - 1)!) - \ln(n_i!(g_i - 1)!) \quad (2.14)$$

$$= \sum_i (n_i + g_i - 1) \ln(n_i + g_i - 1) - n_i + g_i + 1 - n_i \ln(n_i) + n_i - (g_i - 1) \ln(g_i - 1) + g_i - 1 \quad (2.15)$$

$$= \sum_i (n_i) \ln\left(\frac{g_i}{n_i - 1}\right) + g_i \ln\left(1 - \frac{n_i}{g_i}\right) \quad (2.16)$$

$$= \sum_i n_i \ln\left(\frac{g_i}{n_i} + 1\right) + g_i \ln\left(1 + \frac{n_i}{g_i}\right). \quad (2.17)$$

A partir de (2.17), observamos que (2.11) torna-se

$$\sum_i \left[ \ln\left(\frac{g_i}{n_i} + 1\right) - \alpha - \varepsilon_i \beta \right] \delta n_i = 0. \quad (2.18)$$

Usando a arbitrariedade de  $\delta n_i$ , tem-se, para todo  $i$

$$\ln\left(\frac{g_i}{n_i} + 1\right) - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0 \quad (2.19)$$

$$\ln\left(\frac{g_i}{\bar{n}_i} + 1\right) = \alpha - \beta \varepsilon_i \quad (2.20)$$

$$\left(\frac{g_i}{\bar{n}_i} + 1\right) = e^{\alpha - \beta \varepsilon_i} \quad (2.21)$$

$$\frac{g_i}{\bar{n}_i} = e^{\alpha - \beta \varepsilon_i} - 1. \quad (2.22)$$

Observa-se que  $n_i \propto g_i$  e, a partir de (2.22)

$$\frac{\bar{n}_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\alpha - \beta \varepsilon_i} - 1}, \quad (2.23)$$

que é o número mais provável de partículas dividido pelo nível de energia na  $i$ -ésima partícula.

(2.23) independe da maneira que as partículas se agrupam em uma célula.

Usando os resultados acima, analisando (2.17) e usando o método dos multiplicadores de Lagrange, pois possui-se vínculos neste sistema, para calcular (2.11)

$$S \approx k_B \ln W(n_i) = k_B \sum_i \left[ n_i \left( \frac{g_i}{\bar{n}_i} + 1 \right) + g_i \ln \left( 1 + \frac{\bar{n}_i}{g_i} \right) \right], \quad (2.24)$$

e usando os resultados obtidos em (2.22) e (2.23)

$$= k_B \left( \sum_i \bar{n}_i (e^{\alpha - \beta \epsilon_i} - 1) + g_i \ln \left( 1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon_i} - 1} \right) \right) \quad (2.25)$$

$$= k_B \left( \sum_i \bar{n}_i (\alpha - \beta \epsilon_i) + g_i \ln \left( 1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon_i} - 1} \right) \right) \quad (2.26)$$

$$= k_B \alpha \sum_i \bar{n}_i - k_B \beta \sum_i \bar{n}_i \epsilon_i + k_B \sum_i \ln \left( 1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon_i} - 1} \right). \quad (2.27)$$

Comparando com (2.1) e (2.2), percebe-se que, a primeira parte do somatório é igual a  $\alpha N$  e a segunda parte  $\beta E$ ,

$$\frac{S}{k_B} - \alpha N - \beta E = \sum_i g_i \ln \left( 1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon_i} - 1} \right). \quad (2.28)$$

Identifica-se que  $\alpha = \frac{-\mu}{k_B T}$  e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , substituindo em (2.28) e fazendo a conexão com a termodinâmica

$$\frac{S}{k_B} + \frac{\mu N}{k_B T} - \frac{E}{k_B T} = \frac{PV}{k_B T}. \quad (2.29)$$

A pressão termodinâmica do sistema é, então:

$$PV = k_B T \sum_i g_i \ln \left( 1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon_i} - 1} \right). \quad (2.30)$$

A função de partição pode ser escrita como:

$$Q_n(V, T) = \sum_E e^{-\beta E}, \quad (2.31)$$

sendo  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

Que é a função de partição do sistema e a energia de uma partícula é:

$$E = \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon. \quad (2.32)$$

Sendo  $n_{\varepsilon}$  o número de partículas no estado de energia, os valores de  $n_{\varepsilon}$  devem respeitar

$$N = \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon}. \quad (2.33)$$

A função de partição torna-se:

$$Q_n(V, T) = \sum_{n_{\varepsilon}} e^{-\beta \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon}. \quad (2.34)$$

A partir disso,

$$\Xi(T, V) = \sum_{n_{\varepsilon}} \left( e^{-\beta \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon} \right). \quad (2.35)$$

Sendo  $z$  a fugacidade, na função de partição, tem-se:

$$\Xi(z, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} (z^N) \sum_{\varepsilon} e^{-\beta \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon} \quad (2.36)$$

$$\Xi(z, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} (z^N) \sum_{\varepsilon} e^{-\beta \sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon} \quad (2.37)$$

$$\Xi(z, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} z^{\sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon} \left\{ \prod_{\varepsilon} (z e^{-\beta \varepsilon})^{n_{\varepsilon}} \right\} \quad (2.38)$$

$$\Xi(z, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} z^{\sum_{\varepsilon} n_{\varepsilon} \varepsilon} \left\{ \prod_{\varepsilon} (z e^{-\beta \varepsilon})^{n_{\varepsilon}} \right\} \quad (2.39)$$

$$\Xi(z, T, V) = \sum_{n_0, n_1, \dots} (z e^{-\beta \varepsilon_0})^{n_{\varepsilon_0}} (z e^{-\beta \varepsilon_1})^{n_{\varepsilon_1}} \dots \quad (2.40)$$

$$\Xi(z, T, V) = \left[ \sum_{n_0} (z e^{-\beta \varepsilon_0})^{n_{\varepsilon_0}} \right] \left[ \sum_{n_1} (z e^{-\beta \varepsilon_1})^{n_{\varepsilon_1}} \right] \dots \quad (2.41)$$

Sabendo que:

$$\sum_{n_0} (ze^{-\beta\varepsilon})^{n_0} = \sum_{n_0} (x)^{n_0} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1-x}, \quad (2.42)$$

e que  $n_\varepsilon = 0, 1, 2, \dots$ , assim,

$$\Xi(z, T, V) = \left[ \prod_{\varepsilon} \frac{1}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} \right]. \quad (2.43)$$

O potencial  $q$  do sistema é dado por:

$$q(z, V, T) \equiv \frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \Xi(z, T, V) \quad (2.44)$$

$$q(z, V, T) = \ln \prod_{\varepsilon} \frac{1}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} \quad (2.45)$$

$$q(z, V, T) = - \sum_{\varepsilon} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}). \quad (2.46)$$

Sendo  $\langle n_\varepsilon \rangle$  o número médio de ocupação do nível  $\varepsilon$ , utilizando (2.38) e (2.46)

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \frac{1}{\Xi} \left[ \frac{1}{-\beta} \left( \frac{\partial \Xi}{\partial \varepsilon} \right) \right] \quad (2.47)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = -\frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{\Xi} \left( \frac{\partial \Xi}{\partial \varepsilon} \right) \right] \quad (2.48)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = -\frac{1}{\beta} \left[ \left( \frac{\partial (\ln \Xi(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} \right) \right] \quad (2.49)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = -\frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( - \sum_{\varepsilon} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) \right) \right) \quad (2.50)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \sum_{\varepsilon} \left( \frac{ze^{-\beta\varepsilon}}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} \right) \left( \frac{e^{\beta\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon}} \right) \quad (2.51)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \sum_{\varepsilon} \left( \frac{z}{e^{\beta\varepsilon} - z} \right) \left( \frac{1}{z} \right) \quad (2.52)$$

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1}. \quad (2.53)$$

Esta equação é chamada de distribuição de Bose-Einstein, e serve como base para o estudo das propriedades coletivas das partículas bosônicas, isto é, partículas quânticas de spin inteiro.

## 2.1 Condensado de Bose-Einstein em 3 dimensões

Considera-se uma partícula quântica livre se movimentando em uma caixa de tamanho  $L$ . Por ser uma partícula quântica deve obedecer a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \varepsilon\psi, \quad (2.54)$$

cuja solução é:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.55)$$

Utilizando a equação de contorno  $\psi(0) = 0$ , temos que  $0 = A + B$ , ou seja,  $B = -A$ ,

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2A\text{sen}(kx). \quad (2.56)$$

Como,  $\psi(L) = 0$ ,

$$\text{sen}(kL) = 0 \quad (2.57)$$

$$kL = n\pi \quad (2.58)$$

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad (2.59)$$

A equação torna-se, então:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2(2A\text{sen}(kx))}{dx^2} = \varepsilon(2A\text{sen}(kx)) \quad (2.60)$$

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} (-2Ak^2\text{sen}(kx)) = \varepsilon(2A\text{sen}(kx)). \quad (2.61)$$

Então, em uma dimensão, temos:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{8\pi^2m} \quad (2.62)$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n_1^2. \quad (2.63)$$

Analogamente, em duas dimensões

$$\varepsilon = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2 + n_2^2), \quad (2.64)$$

e em três dimensões

$$\varepsilon = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (2.65)$$

Para estudar a densidade de estados, considera-se  $r^2 \equiv (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ ,

$$r^2 = \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon \quad (2.66)$$

$n_1^2, n_2^2, n_3^2$  são eixos e  $r$  é o raio de uma hipersfera.

Sendo  $D(\varepsilon)$  proporcional ao volume desta esfera, ou seja, é proporcional ao  $r^3$

$$D(\varepsilon) = \left( \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.67)$$

$$D(\varepsilon) = \frac{(8m\varepsilon)^{\frac{3}{2}} L^3}{h^3} \quad (2.68)$$

$$D(\varepsilon) = \frac{(8m\varepsilon)^{\frac{3}{2}} V}{h^3}. \quad (2.69)$$

Para estudar a densidade de estados, usa-se um artifício usado por Kubo e colaboradores(15), vê-se os números de estados possíveis

$$\Omega_0(\varepsilon) = \sum_{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + \dots < \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon = r^2} 1 \quad (2.70)$$

Em 3 dimensões, tem-se que:

$$\Omega_0(\varepsilon) = \frac{4}{3} \pi \frac{1}{8} r^3 = \frac{4}{3} \pi \frac{1}{8} \left( \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.71)$$

$$\Omega_0(\varepsilon) = \frac{4}{3} \pi (2m\varepsilon)^{\frac{3}{2}} \frac{V}{h^3}. \quad (2.72)$$

Em duas dimensões, tem-se:

$$\Omega_0(\varepsilon) = \pi \frac{1}{4} r^2 = \frac{\pi}{4} \left( \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon \right)^{\frac{2}{2}} \quad (2.73)$$

$$\Omega_0(\varepsilon) = \pi(2m) \frac{L^2}{h^2} \varepsilon. \quad (2.74)$$

Em uma dimensão, tem-se:

$$\Omega_0(\varepsilon) = \frac{\pi r}{2} = \frac{\pi}{2} \left( \frac{8mL^2}{h^2} \varepsilon \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.75)$$

$$\Omega_0(\varepsilon) = \pi(2m)^{\frac{1}{2}} \frac{L}{h} \varepsilon^{\frac{1}{2}}. \quad (2.76)$$

Observando as equações (2.72), (2.74) e (2.76), pode-se generalizá-las como:

$$\Omega_0(\varepsilon) = c_d \pi (2m)^{\frac{d}{2}} \frac{L^d}{h^d} \varepsilon^{\frac{d}{2}}. \quad (2.77)$$

obtem-se a expressão assintótica para a densidade não relativística de estados  $g(\varepsilon)$  em função da energia  $\varepsilon$

$$g(\varepsilon) \equiv \frac{d\Omega_0}{dE} = \frac{d}{2} c_d \pi (2m)^{\frac{d}{2}} \frac{L^d}{h^d} \varepsilon^{\left(\frac{d}{2}-1\right)}. \quad (2.78)$$

Observa-se que:

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} \varepsilon^{\frac{1}{2}}, & \text{se } d = 3 \\ \varepsilon^0, & \text{se } d = 2 \\ \varepsilon^{-\frac{1}{2}}, & \text{se } d = 1 \end{cases} \quad (2.79)$$

Em sistemas com três dimensões o espectro possui muita degenerescência e esta faz com que maior a energia, maior número de estados e, conseqüentemente, a probabilidade de encontrar-se um estado com energia cada vez maior é maior, ou seja, o condensado somente acontece se:

$$g(\varepsilon) = \varepsilon^\alpha, \text{ se } \alpha > 0. \quad (2.80)$$

Como o Bose-Einstein somente acontece em 3 dimensões, por precisar crescer com a

energia, tem-se que:

$$g(\varepsilon) = \left( \frac{2\pi V}{h^3} \right) (2m)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}. \quad (2.81)$$

### 2.1.1 Conexão com a termodinâmica

Obtive-se que:

$$\frac{PV}{k_B T} \equiv \ln \Xi = - \sum_{\varepsilon} \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) \quad (2.82)$$

$$N = \sum_{\varepsilon} \langle n_{\varepsilon} \rangle = \sum_{\varepsilon} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon} - 1}, \quad (2.83)$$

em que  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $z$  é a fugacidade do gás que se relaciona com  $\mu$  a partir de:

$$z \equiv \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right). \quad (2.84)$$

Retomando a (2.82) e considerando o espaço contínuo tridimensional

$$PV = k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln\left(1 + \frac{1}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1}\right) d\varepsilon \quad (2.85)$$

$$PV = k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln\left(\frac{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i}}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1}\right) d\varepsilon \quad (2.86)$$

$$PV = k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln\left(\frac{1}{1 - e^{-\alpha - \beta \varepsilon_i}}\right) d\varepsilon \quad (2.87)$$

$$PV = -k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln(1 - e^{-\alpha - \beta \varepsilon_i}) d\varepsilon \quad (2.88)$$

$$PV = -k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln(1 - e^{-\frac{\mu}{k_B T} - \frac{\varepsilon_i}{k_B T}}) d\varepsilon \quad (2.89)$$

$$PV = -k_B T \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon_i}) d\varepsilon \quad (2.90)$$

Aplicando os resultados de (2.81)

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{-2\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \varepsilon^{\frac{3}{2}} \ln(1 - z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon - V \ln(1 - z) \quad (2.91)$$

Analogamente,

$$N = \sum_{\varepsilon} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.92)$$

$$N = \int_0^{\infty} \left( \frac{2\pi V}{h^3} \right) (2m)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.93)$$

$$N = \left( \frac{2\pi V}{h^3} \right) (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.94)$$

$$\frac{N}{V} = \left( \frac{2\pi}{h^3} \right) (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.95)$$

Sabe-se que,  $\frac{N}{V} = \frac{N_{\varepsilon>0}}{V} + \frac{N_0}{V}$  e como  $N_0 = \frac{z}{1-z}$

$$\frac{N}{V} = \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z}. \quad (2.96)$$

Quando  $z \ll 1$  em (2.91) e (2.96), os termos  $\frac{z}{1-z}$  ficam da ordem de  $\frac{1}{N}$ , pois  $T \gg 1$  todos os níveis de energia são populados com a mesma probabilidade, a probabilidade de cada nível será então:  $\frac{1}{N}$ .

Porém, a medida que  $z$  cresce e assume valores perto de 1,  $\frac{z}{1-z}$  presente na equação (2.96), que corresponde a  $\frac{N_0}{V}$ , em que  $N_0$  é o número de partículas em  $\varepsilon = 0$ , tende a  $\frac{z}{1-z} \rightarrow \infty$ . Ou seja, o estado fundamental torna-se macroscopicamente populado, assim,  $\frac{1}{V} \frac{z}{1-z} = \frac{N_0}{V} =$  finito .

Como  $\frac{1}{1-z^{-1}} = N_0$  e sendo  $z = \frac{N_0}{N_0+1}$ , assim:

$$\frac{-\ln(1-z)}{V} = \frac{-\ln\left(\frac{z}{N_0}\right)}{V} = \frac{-\ln(N_0+1)}{V}. \quad (2.97)$$

Substituindo  $\beta\varepsilon \equiv x$  em (2.91) e (2.96), consideremos o comprimento de onda de De-Broglie

$$\lambda \equiv \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.98)$$

Quando  $T \rightarrow \infty$ , percebe-se que  $\lambda \rightarrow 0$  e, sendo  $g_\nu(z)$  as funções de Bose-Einstein

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{-2\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \varepsilon^{\frac{3}{2}} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \frac{1}{\nu} \ln(1 - z) \quad (2.99)$$

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{-2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\beta} \ln(1 - ze^{-x}) dx \quad (2.100)$$

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{2\pi(2mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^\infty x^{\frac{1}{2}} \ln(1 - ze^{-x}) dx \quad (2.101)$$

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} g_{\frac{5}{2}}(z). \quad (2.102)$$

Analogamente,

$$\frac{N - N_0}{V} = \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{z} z^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1 \quad (2.103)$$

$$\frac{N - N_0}{V} = \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\frac{x^{\frac{1}{2}}}{\beta}}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} \quad (2.104)$$

$$\frac{N - N_0}{V} = \frac{2\pi}{h^3} (2mk_B T)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} \quad (2.105)$$

$$\frac{N - N_0}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{\frac{3}{2}}(z). \quad (2.106)$$

Em que:

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1} e^x - 1} dx. \quad (2.107)$$

A energia interna do sistema é dada por:

$$U \equiv -\frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial \beta} \quad (2.108)$$

$$U = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{pV}{k_B T} \right) \quad (2.109)$$

$$U = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( V \frac{1}{\lambda^3} g_{\frac{5}{2}}(z) \right) \quad (2.110)$$

$$U = k_B T^2 g_{\frac{5}{2}}(z) V \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{\lambda^3} \right) \quad (2.111)$$

$$U = k_B T^2 g_{\frac{5}{2}}(z) V \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \right) \quad (2.112)$$

$$U = \frac{3}{2} k_B \frac{v}{\lambda^3} g_{\frac{5}{2}}(z). \quad (2.113)$$

Pode-se fazer a generalização do sistema por:

$$P = \left( \frac{2}{3} \right) \left( \frac{U}{V} \right). \quad (2.114)$$

Sendo  $V$  o volume por partículas, ou seja,  $v = \frac{V}{N}$  e  $a_l$  o coeficiente virial, a equação de estado se torna:

$$\frac{PV}{Nk_B T} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \left( \frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1}, \quad (2.115)$$

em que:

$$a_1 = 1, a_2 = \frac{-1}{4\sqrt{2}}, a_3 = \frac{-2}{9\sqrt{3}} - \frac{1}{8}. \quad (2.116)$$

O calor específico é dado por:

$$\frac{c_v}{Nk_B} \equiv \frac{1}{Nk_B} \frac{\partial U}{\partial T} \quad (2.117)$$

$$\frac{c_v}{Nk_B} = \frac{1}{Nk_B} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{3}{2} k_B \frac{v}{\lambda^3} g_{\frac{5}{2}}(z) \right) \quad (2.118)$$

$$\frac{c_v}{Nk_B} = \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{PV}{Nk_B} \right) \quad (2.119)$$

$$\frac{c_v}{Nk_B} = \frac{3}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left( \frac{5-3l}{2} a_l \left( \frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1} \right). \quad (2.120)$$

Nas equações (2.115) e (2.120), temos  $P \rightarrow nk_B T$  e  $c_v \rightarrow \frac{3}{2} Nk_B$ , ou seja, os valores clássicos da pressão e do calor específico. Em temperaturas altas, porém finitas,  $c_v$  é mais alto do que seu valor limite. Por outro lado, quando  $T \rightarrow 0$ ,  $c_v$  também tende a 0.

Quanto mais a temperatura diminui e, conseqüentemente  $\frac{\lambda^3}{v}$  cresce, as equações (2.115) e (2.120) não são mais úteis.

O valor de  $z$  é, então, obtido a partir da equação (2.99),

$$N_e = \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} g_{\frac{3}{2}} \quad (2.121)$$

$$g_{\frac{3}{2}} = \frac{N_e}{V} \frac{h^3}{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}} \quad (2.122)$$

$$g_{\frac{3}{2}} = n \frac{h^3}{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.123)$$

Retomando a equação (2.107), tem-se que:

$$g_{\frac{3}{2}}(z) = \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1}e^x - 1} dx, \quad (2.124)$$

ou seja,

$$\int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \frac{nh^3 \Gamma(\frac{3}{2})}{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.125)$$

Quando  $z(n, T_c) = 1$ , acha-se a temperatura crítica

$$\int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \frac{nh^3 \Gamma(\frac{3}{2})}{V(2\pi mk_B T_c)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.126)$$

Observa-se que  $g_{\frac{3}{2}}$ , com  $z = 1$

$$g_{\frac{3}{2}}(1) = 1 + \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} + \frac{1}{3^{\frac{3}{2}}} \equiv \xi \left( \frac{3}{2} \right). \quad (2.127)$$

Sendo  $N_e$  o número de partículas no estado excitado,  $N_e \simeq N$ , se  $z$  não for extremamente próximo de 1.

Para todo  $z$ , tem-se que:

$$g_{\frac{3}{2}} \leq \xi \left( \frac{3}{2} \right). \quad (2.128)$$

Assim, a equação (2.121) torna-se:

$$N_e \leq \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right). \quad (2.129)$$

Para dado  $V$  e  $T$ , o número total de partículas em todos estados excitados é também limitado.

Enquanto o número de partículas do sistema for menor que este valor limitante, praticamente todas as partículas se distribuem nos estados excitados e o valor de  $z$  é determinado pela equação (2.129), sendo  $N_e \simeq N$ . Porém, caso este valor exceda o valor limitante, os estados excitados receberão o número máximo de partículas, ou seja:

$$N_e = \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right). \quad (2.130)$$

Enquanto o estado fundamental receberá:

$$N_0 = N - \left[ \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \right]. \quad (2.131)$$

Este fenômeno de acúmulo de um grande número de partículas no estado fundamental é o condensado de Bose-Einstein, que, apesar de conter semelhanças com o processo de condensação de vapor em líquido, possui muitas diferenças conceituais com o mesmo, e a principal é que o condensado tem origem puramente quântica.

O valor de  $z$  é:

$$z = \frac{N_0}{N_0 + 1} \approx 1 - \frac{1}{N_0}. \quad (2.132)$$

Para a condensação começar, partindo da equação (2.125)

$$0 < N - \left[ \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \right] \quad (2.133)$$

$$-N < - \left[ \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \right] \quad (2.134)$$

$$N > \left[ \frac{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \right]. \quad (2.135)$$

Caso  $N$  e  $V$  permaneçam constantes e  $T$  varie

$$\left[ T^{\frac{3}{2}} < \frac{Nh^3}{V(2\pi mk_B)^{\frac{3}{2}} \xi\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (2.136)$$

$$T < \frac{Nh^2}{(2\pi mk_B)^{\frac{3}{2}}} \left[ \frac{N}{V \xi\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (2.137)$$

$$T < T_c = \frac{Nh^2}{(2\pi mk_B)^{\frac{3}{2}}} \left[ \frac{N}{V \xi\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{2}{3}}. \quad (2.138)$$

Sendo  $T_c$  a temperatura característica, observando a equação (2.132), percebe-se que ela depende de  $m$  e  $\frac{N}{V}$ , que é a densidade por partícula do sistema.  $\frac{N_0}{N}$  corresponde a a densidade de partículas no estado fundamental, quando  $T < T_c$ , o sistema é a mistura das seguintes fases:

I) fase normal, em que  $N_e = N \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}$

II) fase condensada, em que as  $N_0$  partículas que não podem se distribuir nos estados excitados, se acumulam no estado fundamental.

Se  $T > T_c$ , somente a fase normal acontece.

Sendo  $N_0 = \frac{z}{1-z}$  o número de partículas do estado fundamental,  $N_0$  é negligenciado comparando-se com  $N$ .

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.139)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(-1 + 1 + \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.140)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(1 - \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.141)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(1 - \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.142)$$

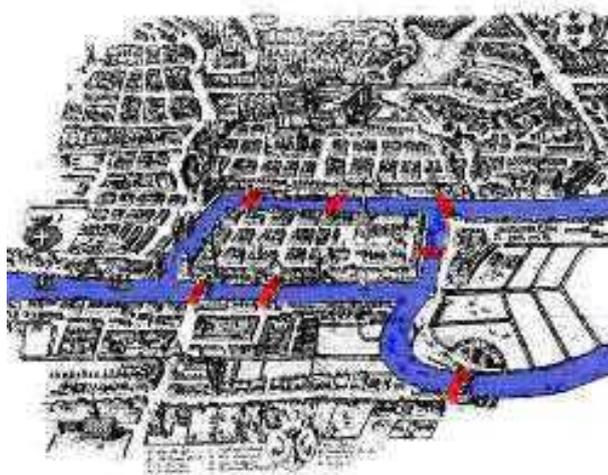
Se  $T \approx T_c$ , temos que  $\frac{T_c - T}{T_c} \ll 1$  e, definindo  $\frac{T_c - T}{T_c} \equiv x$ , temos que:

$$(1 - x)^{\frac{3}{2}} \approx 1 - \frac{3}{2}x, \text{ se } x \ll 1 \quad (2.143)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(1 - \left(\frac{3}{2}x\right)\right) \quad (2.144)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{3}{2} \frac{T_c - T}{T_c}. \quad (2.145)$$

A capital de Prússia Oriental, Königsberg, é dada como o local de nascimento da teoria dos grafos e assim, das redes complexas. Pode ser visto uma representação da cidade na 3.1 . Königsberg era uma cidade comercial e, como fica às margens do rio Pregel, foram construídas sete pontes, cinco delas ao redor da ilha Kneiphof que era cercada pelo rio e outras duas em outras partes do rio. Seria possível andar pelas sete pontes, voltar para a faixa de terra inicial e nunca caminhar novamente pela mesma ponte?



**Figura 3.1:** As pontes de Königsberg, fonte: Adérito Araújo / Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra/Montagem sobre reprodução.

Euller solucionou este questionamento provando que não era possível. As quatro partes terrestres do problema foram representadas como os vértices A, B, C e D e as pontes foram representadas como linhas. Euller provou por contradição que se houvesse um caminho que percorresse todas as pontes, mas nunca a mesma ponte duas vezes, então os vértices com número ímpar de arestas devem ser o começo ou o final deste caminho. Cada vértice precisa ter um grau par de pontes, para entrarmos e sairmos de cada vértice.

Euller foi o primeiro a solucionar um problema representando-o por meio de vértices e arestas, facilitando assim seu entendimento, visualização e resolução.

Uma rede complexa é definida como um conjunto de pontos, chamados vértices, que são unidos por arestas. A utilidade da rede complexa perpassa por dispositivos físicos, sociais e biológicos. Uma grande variedade de objetos pode ser representada por uma rede complexa, desde redes sociais até a cadeia alimentar.

De acordo com Newman (18), muitos sistemas de interesses dos cientistas são compostos de partes que conectam-se entre si de alguma maneira. Existem pessoas que estudam a individualidade de seus indivíduos, já outros, analisam as conexões ou interseções. Um ponto sobre estas conexões que precisa de atenção, é o padrão das conexões entre os sistemas. Este padrão pode ser representado como uma rede complexa, sendo, então os componentes representados nos vértices e as conexões entre eles, pelas arestas. Sendo assim, uma rede complexa é a representação simplificada reduzindo o sistema a uma representação teórica que captura os padrões das conexões.

Cientistas têm desenvolvido ferramentas, ao longo dos anos, para análise, modelagem e estudo das redes complexas. Boa parte destas representações tiveram início com uma simples rede e, depois de cálculos adequados, notou-se as melhores conexões entre vértices ou o tamanho adequado de um vértice para outro. Outras ferramentas têm a capacidade de fazer previsões matemáticas sobre procedimentos da rede, como, por exemplo, a disseminação de uma doença.

Em função do trabalho com as redes complexas ser teórico, estas ferramentas podem, ser aplicadas a quaisquer sistemas que está sendo representado como uma rede complexa. Se você, então, tiver um assunto de interesse que possa ser representado por uma rede complexa, existem diversas ferramentas, já desenvolvidas e compreendidas, que podem ser aplicadas a sua rede. É crucial compreender que nem todas as ferramentas lhe darão resultados úteis, mas se o questionamento sobre sua rede for correta, existirão várias ferramentas que podem ser utilizadas e dar o devido direcionamento.

As redes complexas são uma maneira genérica, porém poderosa, de representar conexões e interações de objetos de um sistema.

### 3.0.1 Matriz de adjacência

Utilizando o livro de Newman (18), tem-se que a matriz de adjacência é a melhor maneira de representar uma rede complexa matematicamente. Sendo  $i$  e  $j$  vértices, a matriz de adjacência será  $A_{ij}$ , em que:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se houver ligações entre os vértices } i \text{ e } j, \\ 0, & \text{se não houver.} \end{cases} \quad (3.1)$$

A partir da matriz de adjacência pode-se analisar a rede complexa e obter suas propriedades.

## 3.1 Propriedades de uma rede complexa

Segundo Newman (18), a análise de uma rede complexa começa quando fazemos uma imagem da mesma. Esta visualização pode nos ajudar a enxergar o que os dados dizem. Somente eles podem dificultar nosso entendimento do sistema. Sabe-se que, o olho humano tem uma grande facilidade de reconhecer padrões e por que não usar este dom a nosso favor? Por outro lado, se a rede tiver centenas ou milhares de vértices, o entendimento dos dados a partir da visualização se tornará praticamente impossível. Boa parte das redes analisadas pelos cientistas possuem milhares, até mesmo milhões, de componentes, sendo assim, a visualização em redes como esta é praticamente inútil, precisando assim de outras técnicas para entender o comportamento do sistema. Como dito, o estudo de redes de grande porte é de extrema importância para vários campos da ciência atual, tendo assim a necessidade do desenvolvimento de técnicas de medidas e métricas que ajudem a compreender estas redes.

A centralidade, segundo Newman (18), é um exemplo de classe útil para medidas de rede. É sabido que pontos centrais designam a importância de algo e componentes centrais vêm sendo estudados em redes sociais. O estudo sobre o que é ser central em uma rede complexa é algo que instiga estudos sobre medidas matemáticas.

As redes complexas são divididas em duas classes: redes direcionadas e redes não-direcionadas. Nas rede direcionadas as arestas entre dois vértices seguem uma direção, como numa rua em que os carros podem se movimentar apenas numa direção. Graficamente, redes

direcionais são facilmente identificadas porque as arestas possuem setas, em que essas setas indicam a direção a informação que quer ser passada pela rede, existem dois tipos de graus: o *in-degree* e o *off-degree*, este corresponde a arestas apontadas para fora do vértice e aquele, para arestas apontadas em direção ao vértice. Fazendo alusão a um artigo científico, os artigos que ele cita são o *off-degree* e as citações que ele recebe são os *in-degree*. Nosso objeto de estudo serão redes não direcionadas, em que as arestas não são direcionadas.

Seguem as principais propriedades que auxiliarão nosso estudo de redes não direcionadas:

### 3.1.1 Número de vértices(N)

O número de vértices presentes na rede é a ordem da matriz de adjacência.

### 3.1.2 Número de ligações(E)

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ i \neq j}} A_{i,j} + \sum_i A_{i,i} \quad (3.2)$$

ou

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \leq j} A_{i,j}. \quad (3.3)$$

O número de máximo de ligações corresponde a:

$$E_{max} = \frac{N(N-1)}{2}. \quad (3.4)$$

### 3.1.3 Conectância

Observando a relação entre  $E$  e  $E_{max}$  temos a conectância, que representa a densidade de ligações

$$c = \frac{E}{E_{max}} = \frac{2E}{N(N-1)} \quad (3.5)$$

Observa-se que a conectância é dada em números entre  $0 \leq c \leq 1$ .

### 3.1.4 Grau do vértice

Um conceito simples e crucial é o grau. O grau de um vértice consiste no número de outros vértices atados a ele através de arestas. Tomando como exemplo a Internet, o grau significa o número de dados conectados a um computador ou roteador. Ou seja, vértices com um grau muito alto costumam desempenhar o papel de centralidade, então o grau também nos ajuda a perceber quais são os pontos principais de uma rede.

Sendo  $k_i$  o número de ligações do vértice  $i$ , ou seja,  $k_i = \sum_j A_{ij}$ .

Em uma rede sem autoligação, tem-se que:

$$\sum_i k_i = \sum_j A_{ij} = 2E \quad (3.6)$$

O grau médio é:

$$\langle k \rangle = \frac{\sum_i k_i}{N} = \frac{2E}{N} \quad (3.7)$$

### 3.1.5 Distribuição de grau $p(k_i)$

Mede a probabilidade de encontrar  $k$  ligações em um dado vértice da rede. Tem-se que:

$$p(k) = \frac{\text{quantidade de } k}{\text{total}} \quad (3.8)$$

## 3.2 O problema do pequeno mundo

Um conceito que têm implicações práticas dentro da rede complexa é o efeito de pequeno mundo. A chamada distância geodésica é a menor número de arestas que possa existir entre um vértice e outro. Tomando como exemplo dois amigos, a distância geodésica entre eles pode ser 1, pois existe somente uma única aresta os conectando e o amigo do amigo tem, então, distância geodésica 2. Empiricamente sabe-se que, a distância geodésica entre pares de vértices é muito pequena, somente crescendo ao logaritmo do número de vértices. Este conceito foi primeiramente estudado psicologicamente, mas o poder deste conceito permite que ele seja generalizado.

As repercussões do efeito de pequeno mundo tem efeitos curiosos. O compartilhamento de notícias ou fofocas nas redes sociais. Pense que você ouviu algo de um amigo e passa essa informação para outro amigo seu e este passa para outro amigo dele e assim sucessivamente. Isto se espalhará mais e mais rápido se houver somente seis passos entre qualquer pessoa no mundo do que se existir centenas ou milhões. Sabe-se que um boato pode se espalhar para uma comunidade inteira num piscar de olhos e isso explica muito sobre redes sociais.

Uma das razões que explica o poder da Internet é entender que um computador conectado a rede é somente distante em alguns “saltos” ópticos/elétricos a alguns dados a outro qualquer computador. Sendo real, os caminhos percorridos pelos pacotes de dados na Internet têm somente dez a vinte saltos de comprimento, se houvesse mil saltos o compartilhamento de informações seria completamente diferente.

Imaginando pessoas sendo representadas como vértices e uma linha significa que essas pessoas se conhecem, dentre uma população grande, qual a probabilidade de duas pessoas escolhidas aleatoriamente se conhecerem? Algo mais interessante de se questionar é: qual o número mínimo de pessoas que, conhecendo umas as outras, permita que um indivíduo  $a$  conheça o indivíduo  $b$ ?

O que nos impressiona no problema do pequeno mundo é a percepção de, por maior que seja o número de indivíduos no mundo, haverá um número pequeno que conecte pessoas de diferentes países e nos evidencia que, por mais complicadas que pareçam as relações sociais, nossa sociedade é unida por um elo de conhecimento, que, mesmo que duas pessoas não se conheçam mutuamente, elas podem ser ligadas por alguns passos de conexões, em média, 6.

O primeiro a pensar no experimento do pequeno mundo foi o pesquisador Milgram (8), o estudo nos revela informações impressionantes sobre a sociedade, revelando interconectividades entre os indivíduos, tornando de fato, nosso mundo pequeno. O experimento consistiu em um grupo de pessoas iniciais e um alvo remoto geograficamente, distante de onde o estudo se iniciou e tem como objetivo mapear as conexões feitas para que a correspondência, que continha algumas informações básicas do alvo, chegasse até ele.

As pessoas iniciais enviavam à outras pessoas um documento contendo: uma descrição do estudo e as regras da participação; o nome do alvo bem como algumas informações que possam ajudar a minimizar o caminho até ele; uma lista, que permitirá que a mesma pessoas

que não receba o documento duas vezes e um documento pedindo informações gerais para cada participante. Dentre as regras pedia-se que se adicionasse um cartão postal, permitindo o rastreamento da correspondência. As informações sobre cada pessoa que aceita participar do estudo permite responder perguntas sobre a homogeneidade das conexões entre os elos em idade e sexo, por exemplo.

## Análise do Condensado de Bose-Einstein em uma rede estrela

Este estudo do Condensado de Bose-Einstein em redes complexas se inicia numa rede simples, chamada rede estrela. A rede estrela é uma rede complexa com um sítio central conectado a  $L$  vértices ao redor, descrito como gráfico estrela.

A matriz hamiltoniana da rede é dada por Vidal e colaboradores (16):

$$H = \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} \sum_{i=0}^{\infty} (|i\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle i|). \quad (4.1)$$

Tem-se que:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$\langle 0| = (1, 0, 0, \dots, 0) \quad (4.4)$$

$$\langle i| = (0, 0, \dots, 1, \dots, 0) \quad (4.5)$$

Tem-se, por exemplo:

$$|0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$$|1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Então:

$$\sum_i |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & & & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Tem-se, então, que a hamiltoniana é:

$$H = \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} \sum_{i=0}^{\infty} (|i\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle i|) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} & \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} & \dots & \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} \\ \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & \\ \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

$|0\rangle$  descreve a partícula central e  $|i\rangle$  as partículas periféricas, sendo que  $i = 1, 2, \dots, L$ . As partículas periféricas estão conectadas à central por uma distância de  $\frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}$ .

Esta matriz hamiltoniana  $H$  é exatamente a matriz de adjacência  $A$  da rede multiplicada pelo fator de energia  $\frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}$ .

Diagonalizando  $H$  iremos obter que as autoenergias são:  $E_- = -\varepsilon$ , que tem autoestado correspondente  $|\Psi_0\rangle = (\frac{1}{\sqrt{2}})|0\rangle - (\frac{1}{\sqrt{2L}})\sum_i |i\rangle$ , o estado fundamental é a superposição antissimétrica em que metade da densidade das partículas se localiza no sítio central e a outra metade é uniformemente distribuído pelos sítios periféricos;  $E_+ = \varepsilon$  e  $E = 0$ .

Considerando um número flutuante de partículas e o potencial químico  $\mu$ , tem-se que:

$$\bar{n}_r = \frac{1}{(e^{\beta(E_r - \mu)} - 1)} \quad (4.10)$$

sendo  $z = e^{\beta(\varepsilon + \mu)}$ . Tem-se, então, que no caso em que  $E = 0$

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} + 1} \quad (4.11)$$

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu + \beta\varepsilon - \beta\varepsilon} + 1} \quad (4.12)$$

$$n_0 = \frac{1}{z^{-1}e^{-\beta\varepsilon} + 1} \quad (4.13)$$

Já o caso que  $E_+ = \varepsilon$

$$n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (4.14)$$

$$n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\beta(2\varepsilon - \varepsilon - \mu)} - 1} \quad (4.15)$$

$$n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\beta(2\varepsilon)}e^{-\beta(\varepsilon + \mu)} - 1} \quad (4.16)$$

$$n_\varepsilon = \frac{1}{z^{-1}e^{2\beta\varepsilon} - 1}. \quad (4.17)$$

Por fim, quando  $E_- = -\varepsilon$ , obtém-se:

$$n_{-\varepsilon} = \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon + \mu)} - 1} \quad (4.18)$$

$$n_{-\varepsilon} = \frac{1}{e^{-\beta\varepsilon}e^{-\beta\mu} - 1} \quad (4.19)$$

$$n_{-\varepsilon} = \frac{1}{z^{-1} - 1}. \quad (4.20)$$

Como

$$N = \sum_i N_i \quad (4.21)$$

$$N = n_{-\varepsilon} + (L - 1) \cdot n_0 + n_\varepsilon \quad (4.22)$$

$$N = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{L - 1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} + \frac{1}{z^{-1}e^{2\beta\varepsilon} - 1}. \quad (4.23)$$

Sendo  $z^{-1} = \exp(-\beta(\varepsilon + \mu))$  e como  $\bar{n}_r > 0$ , tem-se que:

$$\bar{n}_r = \frac{1}{z^{-1} - 1} > 0. \quad (4.24)$$

Como  $z^{-1} \gg 1$ , então  $0 < z \leq 1$ .

No limite termodinâmico,  $L \rightarrow \infty$  e como  $e^{2\beta\varepsilon} > 1$ , então  $z^{-1}e^{2\beta\varepsilon} > 1$  e  $z^{-1} > 1$ ,  $N$  torna-se:

$$N = \frac{L}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1}. \quad (4.25)$$

Para encontrar a transição de Bose-Einstein considera-se  $z(T_c) = 1$ , então:

$$N = \frac{L}{e^{\beta_c\varepsilon} - 1} \quad (4.26)$$

$$\frac{N}{L} = n = \frac{1}{e^{\beta_c\varepsilon} - 1} \quad (4.27)$$

$$n(e^{\beta_c\varepsilon} - 1) = 1 \quad (4.28)$$

$$ne^{\beta_c\varepsilon} - n = 1 \quad (4.29)$$

$$ne^{\beta_c\varepsilon} = 1 + n \quad (4.30)$$

$$e^{\beta_c\varepsilon} = \frac{1+n}{n} \quad (4.31)$$

$$\beta_c\varepsilon = \ln\left(\frac{1+n}{n}\right) \quad (4.32)$$

$$\frac{\varepsilon}{k_B T_c} = \ln\left(\frac{1+n}{n}\right) \quad (4.33)$$

$$\frac{k_B T_c}{\varepsilon} = \frac{1}{\ln\left(\frac{1+n}{n}\right)}. \quad (4.34)$$

Para  $T > T_c$ , tem-se que  $z^{-1} > 1$  e  $n = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta_c\varepsilon} - 1}$ , então:

$$n(z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1) = 1 \quad (4.35)$$

$$nz^{-1}e^{\beta\varepsilon} - n = 1 \quad (4.36)$$

$$nz^{-1}e^{\beta\varepsilon} = 1 + n \quad (4.37)$$

$$z^{-1} e^{\beta \varepsilon} = \frac{1+n}{n}. \quad (4.38)$$

Usando a equação (4.31)

$$z^{-1} e^{\beta \varepsilon} = \frac{1+n}{n} = e^{\beta_c \varepsilon} \quad (4.39)$$

$$z^{-1} = \frac{e^{\beta_c \varepsilon}}{e^{\beta \varepsilon}} \quad (4.40)$$

$$z^{-1} = e^{\beta_c \varepsilon - \beta \varepsilon} \quad (4.41)$$

$$z = e^{\beta \varepsilon - \beta_c \varepsilon} \quad (4.42)$$

$$z = e^{\varepsilon(\beta - \beta_c)} \quad (4.43)$$

$$z = \exp \left( \varepsilon \left( \frac{1}{k_B T} - \frac{1}{k_B T_c} \right) \right) \quad (4.44)$$

$$z = \exp \left( \varepsilon \left( \frac{T_c - T}{k_B T T_c} \right) \right) \quad (4.45)$$

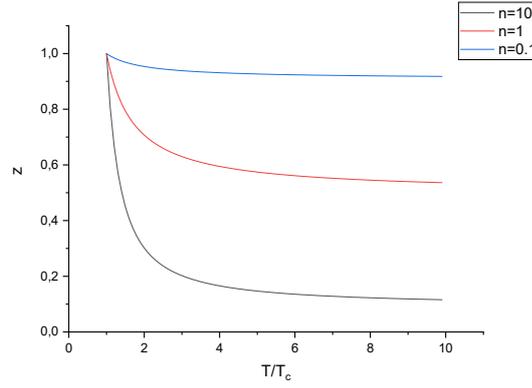
$$z = \left( \exp \frac{\varepsilon}{k_B T_c} \right)^{\frac{T_c - T}{T}} \quad (4.46)$$

$$z = (\exp(\varepsilon \beta_c))^{\frac{T_c}{T} - 1}. \quad (4.47)$$

Novamente fazendo uso da equação (4.31)

$$z = \left( \frac{1+n}{n} \right)^{\frac{T_c}{T} - 1} \quad (4.48)$$

$$z = \left( 1 + \frac{1}{n} \right)^{\frac{T_c}{T} - 1}. \quad (4.49)$$



**Figura 4.1:**  $z$  em função de  $\frac{T}{T_c}$

Na figura acima temos  $z$  sendo expresso em função de  $\frac{T}{T_c}$ , as curvas cairão de acordo com  $\frac{1}{n}$ , ou seja, quanto maior valor de  $n$  maior será a queda. Percebe-se nesta, que a fugacidade decai com o crescimento da temperatura, condizente com a equação (4.45).

Sendo  $N_0 = n_{-\varepsilon}$  e observando (4.22), tem-se que:

$$N_0 = N - (L - 1).n_0 - n_\varepsilon \quad (4.50)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{L-1}{N}n_0 - \frac{n_\varepsilon}{N}. \quad (4.51)$$

Para  $N \rightarrow \infty$  temos que  $L \rightarrow \infty$ , neste caso tem-se que  $L - 1 \rightarrow L$ .

$$\frac{L}{N} \equiv \frac{1}{n} \quad (4.52)$$

A equação (4.51) torna-se:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{n_0}{n} \quad (4.53)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{1}{z^{-1}e^{-\beta\varepsilon} + 1} \quad (4.54)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{n^{-1}}{e^{\beta\varepsilon} - 1}. \quad (4.55)$$

Sabendo que:

$$e^{\beta\varepsilon} = \exp\left(\frac{\beta\varepsilon\beta_c}{\beta_c}\right) \quad (4.56)$$

$$e^{\beta\varepsilon} = \exp\left(\varepsilon\beta_c\frac{T_c}{T}\right) \quad (4.57)$$

$$e^{\beta\varepsilon} = (\exp(\varepsilon\beta_c))^{T/T_c}. \quad (4.58)$$

Usando a equação (4.31):

$$e^{\beta_c\varepsilon} = \left(\frac{n+1}{n}\right) \quad (4.59)$$

$$\frac{n+1}{n} - 1 = e^{\varepsilon\beta_c} - 1 \quad (4.60)$$

$$\frac{n+1-n}{n} = e^{\varepsilon\beta_c} - 1 \quad (4.61)$$

$$\frac{1}{n} = e^{\varepsilon\beta_c} - 1. \quad (4.62)$$

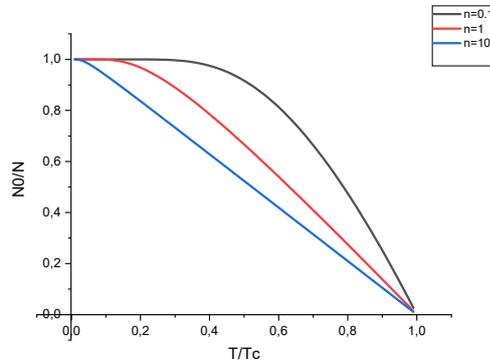
Retomando a equação (4.55), tem-se:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{n^{-1}}{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{T/T_c} - 1} \quad (4.63)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{T/T_c} - \left(1 + \frac{1}{n}\right)}{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{T/T_c} - 1} \quad (4.64)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{T/T_c} - \left(1 + \frac{1}{n}\right)}{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{T/T_c} - 1} * \frac{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{-T/T_c}}{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{-T/T_c}} \quad (4.65)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1 - \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{1 - T/T_c}}{1 - \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{-T/T_c} - 1}. \quad (4.66)$$



**Figura 4.2:**  $\frac{N_0}{N}$  em função de  $\frac{T}{T_c}$

Na Figura 4.2 temos  $\frac{N_0}{N}$  em função de  $\frac{T}{T_c}$ , observa-se que quando  $\frac{T}{T_c} \rightarrow 0$ ,  $\frac{N_0}{N}$  tende a seu

valor máximo e quando  $\frac{T}{T_c} = 1$  tende a seu valor mínimo.

O número de partículas  $N_0$  no condensado aumenta quando a temperatura diminui e quando  $T = 0$  todas as partículas estarão no estado fundamental, estado de Bose-Einstein. Quando  $\frac{N_0}{N} = 0$  tem-se o estado fundamental deixando de ser macroscopicamente populado.

Observando a variação das curvas da Figura 4.2, percebe-se que  $n = 0, 1$  permanece no estado fundamental mesmo com o aumento da temperatura, ou seja, ele tem dificuldade de sair do estado fundamental. Já com  $n = 10$ , a queda da curva é rápida, ou seja, tem-se facilidade de sair do estado fundamental para os estados mais excitados.

A equação (4.66) expressa em relação de  $\varepsilon$  e  $k$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_c}\right) \left(1 - \frac{T_c}{T}\right)}{1 - \exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_c}\right) \left(-\frac{T_c}{T}\right)} \quad (4.67)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\varepsilon T}{k_B T_c}\right) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(\frac{-\varepsilon}{k_B T}\right)} \quad (4.68)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\varepsilon T}{k_B T_c}\right) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(\frac{-\varepsilon}{k_B T}\right)} \quad (4.69)$$

$$\frac{N_0}{N} = \frac{e^{\beta\varepsilon} - e^{\beta_c\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \quad (4.70)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{e^{\beta_c\varepsilon} - 1}{e^{\beta\varepsilon} - 1}. \quad (4.71)$$

A energia média é dada por:

$$\langle E \rangle = \sum_i \varepsilon_i n_i \quad (4.72)$$

$$\langle E \rangle = 0 \cdot n_{\varepsilon=0} + \varepsilon \cdot n_{\varepsilon=E} - \varepsilon \cdot n_{\varepsilon=-E} \quad (4.73)$$

$$\langle E \rangle = -\frac{\varepsilon}{e^{-\beta(\mu+\varepsilon)} - 1} + \frac{\varepsilon}{e^{-\beta(-\mu+\varepsilon)} - 1} \quad (4.74)$$

$$\langle E \rangle = \varepsilon \left( -\frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{1}{z^{-1} e^{2\varepsilon\beta} - 1} \right) \quad (4.75)$$

$$\langle E \rangle = -\varepsilon \cdot n_{\varepsilon=-E} = -\varepsilon N_0. \quad (4.76)$$

Para  $T > T_c$  temos que  $N_0 = 0 \rightarrow \langle E \rangle = 0$ . Para analisar o calor específico considera-se que na fase não condensada de alta temperatura, o número de partículas que não ocupam os estados degenerados representam uma função nula no limite termodinâmico.

Tem-se que:

$$c_v \equiv \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\varepsilon \frac{\partial N_0}{\partial T}. \quad (4.77)$$

Usando a equação (4.71)

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\frac{N}{L}}{e^{\varepsilon\beta} - 1} \quad (4.78)$$

$$N_0 = N - N \frac{\frac{L}{N}}{e^{\varepsilon\beta} - 1} \quad (4.79)$$

$$N_0 = N - \frac{L}{e^{\varepsilon\beta} - 1} \quad (4.80)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial \beta} = \frac{-Le^{\varepsilon\beta} \varepsilon}{(e^{\varepsilon\beta} - 1)^2} \quad (4.81)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial T} = \frac{\partial N_0}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} \quad (4.82)$$

Como  $\beta = \frac{1}{kT}$

$$\frac{\partial \beta}{\partial T} = \frac{-1}{k_B T^2} \quad (4.83)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial T} = \frac{-1}{k_B T^2} \frac{\partial N_0}{\partial \beta} = -\frac{k_B}{k_B^2 T^2} \frac{\partial N_0}{\partial \beta} \quad (4.84)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial T} = -k_B \beta^2 \frac{\partial N_0}{\partial \beta} \quad (4.85)$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial T} = -k_B \beta^2 \frac{-Le^{\varepsilon\beta} \varepsilon}{(e^{\varepsilon\beta} - 1)^2} \quad (4.86)$$

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\varepsilon \left( -k_B L \frac{\varepsilon \beta^2 e^{\varepsilon\beta}}{(e^{\varepsilon\beta} - 1)^2} \right). \quad (4.87)$$

A medida que a exponencial varre enquanto  $T \rightarrow 0$  é tipicamente o sistema com uma energia de gap entre estado fundamental e os estados excitados.

O valor máximo para  $T_c$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{\varepsilon^2 \beta^2 e^{\varepsilon\beta}}{(e^{\varepsilon\beta} - 1)^2} \quad (4.88)$$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{\varepsilon^2 \beta^2 \left(\frac{n+1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}}}{\left(\left(\frac{n+1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}} - 1\right)^2}. \quad (4.89)$$

A partir da equação (4.59), pode-se concluir que:

$$e^{\beta\varepsilon} = \left(\frac{n+1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}} \quad (4.90)$$

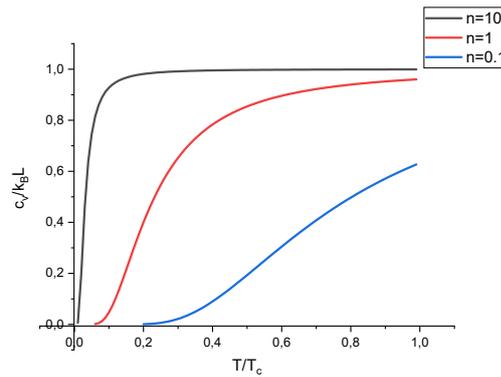
$$\frac{\varepsilon}{k_B T} = \ln\left(\left(\frac{n+1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}}\right) \quad (4.91)$$

$$\frac{\varepsilon}{k_B T} = \frac{T_c}{T} \ln\left(\left(\frac{n+1}{n}\right)\right) \quad (4.92)$$

$$\frac{\varepsilon^2}{k_B^2 T^2} = \left[\frac{T_c}{T} \ln\left(\left(\frac{n+1}{n}\right)\right)\right]^2. \quad (4.93)$$

Usando o resultado obtido na equação (4.89)

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{\left[\frac{T_c}{T} \ln\left(1 + \frac{1}{n}\right)\right]^2 \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}}}{\left[\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\frac{T_c}{T}} - 1\right]^2}. \quad (4.94)$$



**Figura 4.3:**  $\frac{c_v}{k_B L}$  em função de  $\frac{T}{T_c}$

Na figura acima observamos o comportamento de  $\frac{c_v}{k_B L}$  em relação ao crescimento de  $\frac{T}{T_c}$ .

A rápida queda para 0 do  $\frac{c_v}{k_B T}$  quando  $T \rightarrow 0$  é uma característica de sistemas que tem um *gap*, diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental, entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental.

À temperatura 0K, não tem-se energia o suficiente para se atravessa o *gap* e, assim, ocupar o primeiro estado fundamental.

Nota-se, na Figura 4.3 que a curva com  $n = 10$  cresce mais bruscamente que  $n = 1$  e que  $n = 0, 1$ , ou seja, a curva é mais acentuada porque o *gap* deve ser menor.

$$P(E_1)_{n=0,1} < P(E_1)_{n=1} < P(E_1)_{n=10}. \quad (4.95)$$

A probabilidade de popular em  $n = 0, 1$ , quanto maior a probabilidade mais rápido será para atingir o estado fundamental; isso está em concordância com as informações fornecidas na Figura 4.2, o  $n = 0, 1$  atinge muito mais cedo o estado fundamental, o calor específico demora mais, assim, para crescer.

Observando a equação (4.94), se  $T = T_c$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{[\ln(1 + \frac{1}{n})^2] (1 + \frac{1}{n})}{(\frac{1}{n})^2} \quad (4.96)$$

Considerando que  $x = \frac{1}{n}$

$$\frac{c_v}{k_B L} = [\ln(1 + x)]^2 \frac{(1 + x)}{x^2}. \quad (4.97)$$

Caso  $n \rightarrow \infty$ , então  $x \rightarrow 0$  e  $(1 + x) = 1$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{[\ln(1 + x)]^2}{x^2}. \quad (4.98)$$

Como  $\ln(1 + x) \approx x$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{x^2}{x^2} = 1. \quad (4.99)$$

Mas, se  $n \rightarrow 0$  então  $x \rightarrow \infty$ , ou seja,  $(1 + x) = x$ , com isso, a equação (4.96) torna-se:

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{[\ln(x)^2 x]}{(x)^2} \quad (4.100)$$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{\ln(x)^2}{x} \quad (4.101)$$

$$\frac{c_v}{k_B L} = \frac{(\ln(\frac{1}{n}))^2}{\frac{1}{n}} \quad (4.102)$$

$$\frac{c_v}{k_B L} = n(\ln n)^2. \quad (4.103)$$

Os resultados acima reproduzem o trabalho de Vital e colaboradores (16).

## Análise do Condensado de Bose-Einstein em uma rede campo médio de pequeno mundo

### 5.1 A rede

A rede complexa representada na Figura 5.1 foi criada por Grabow e colaboradores.(17) para simular uma teoria de campo médio para um sistema de pequeno mundo. São poucos tipos de redes de pequeno mundo que é possível fazer cálculos analíticos, assim, Grabow e colaboradores criaram esta rede e foram capazes de fazer a diagonalização do operador laplaciano.

Neste trabalho, será analisado o Hamiltoniano associado a rede e em seguida será discutido o condensado de Bose-Einstein.

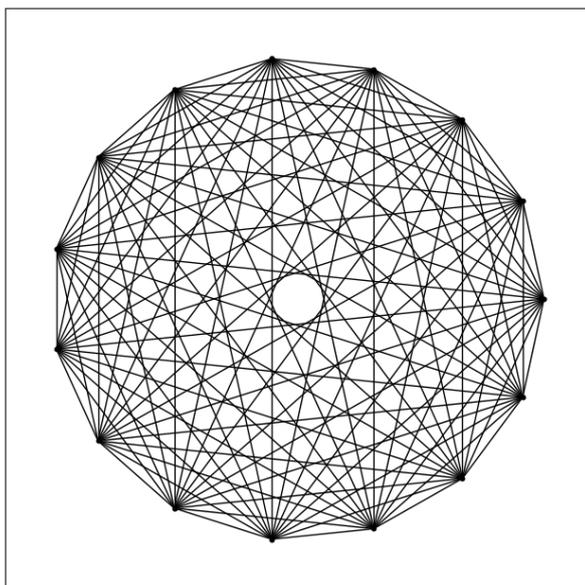


Figura 5.1: Rede pequeno mundo com 15 nós, com  $q = 1$ .

## 5.2 Hamiltoniana

$$H = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & \dots & \dots & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_0 & c_1 & \dots & c_2 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & c_1 \\ c_1 & \dots & \dots & c_{N-1} & c_0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Sendo  $q$  o valor que determina o tipo de ligação, em que  $q \in [0, 1]$ . Para que o sistema simule, via campo médio, todos sítios ligados entre si o parâmetro  $q$  foi criado para variar simular a intensidade. Grabow e colaboradores(17) constatam que  $q = 0$  são redes regulares e  $q \ll 1$  são de pequeno mundo.

Os autores (17) expressaram o modelo usando a matriz laplaciana  $L$ . No nosso caso escrevese a matriz hamiltoniana, em que  $L = H - k1$ .

Para  $q = 0$ , tem-se que:

$$c_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i = 0 \\ 1, & \text{se } i \in 1, \dots, \frac{k}{2}, N - \frac{k}{2}, \dots, N - 1 \\ 0, & \text{se } i \in \{\frac{k}{2}, \dots, N - \frac{k}{2} - 1\}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Tem-se que  $S_1 = 1, \dots, \frac{k}{2}, N - \frac{k}{2}, \dots, N - 1$  e  $S_2 = \frac{k}{2} + 1, \dots, N - \frac{k}{2} - 1$ , o papel do  $k$  será definir o conjunto  $S_1$  e  $S_2$ , quanto maior o  $k$ , maior será o  $S_1$ . Como temos que Rede =  $S_1 + S_2$ , então  $k$  irá reduzir  $S_2$ .

Grabow e colaboradores (17) usaram o seguinte método para encontrar os componentes da matriz laplaciana e usa-se a eficiência deste para acharmos as energias do nossos sistema.

Para um  $q$  diferente de 0, tem-se:

$$f = \frac{N(N-1) - (1-q)Nk}{2} \quad (5.3)$$

$$f_1 = \frac{qNk}{2} \quad (5.4)$$

$$f_2 = \frac{N(N-1) - Nk}{2} \quad (5.5)$$

Em  $S_1$  tem-se:

$$w_1 = \frac{f_1}{f} \cdot \frac{\frac{qkN}{2}}{\frac{kN}{2}} \quad (5.6)$$

$$w_1 = \frac{\frac{qNk}{2}}{\frac{N(N-1) - (1-q)kN}{2}} \cdot \left( \frac{\frac{qkN}{2}}{\frac{kN}{2}} \right) \quad (5.7)$$

$$w_1 = \frac{q^2 k N}{N[(N-1) - (1-q)k]} \quad (5.8)$$

$$w_1 = \frac{q^2 k}{[(N-1) - (1-q)k]} \quad (5.9)$$

Em  $S_2$  tem-se:

$$w_2 = \frac{f_2}{f} \cdot \frac{\frac{qkN}{2}}{\frac{kN}{2}} \quad (5.10)$$

$$w_2 = \frac{\frac{N(N-1) - kN}{2}}{\frac{N(N-1) - (1-q)kN}{2}} \cdot \left( \frac{\frac{qkN}{2}}{\frac{kN}{2}} \right) \quad (5.11)$$

$$w_2 = \frac{qk}{N-1 - (1-q)k} \quad (5.12)$$

Notemos em  $w_1$  e  $w_2$  que, se aumentar o  $k$  e deixar o  $q$  fixo é equivalente a aumentar o  $k$  e deixar o  $q$  fixo.

A hamiltoniana será, então composta por e estes serão então os saltos de energia deste sistema

$$c_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i = 0 \\ 1 - q + w_1, & \text{se } i \in S_1 \\ w_2, & \text{se } i \in S_2 \end{cases} \quad (5.13)$$

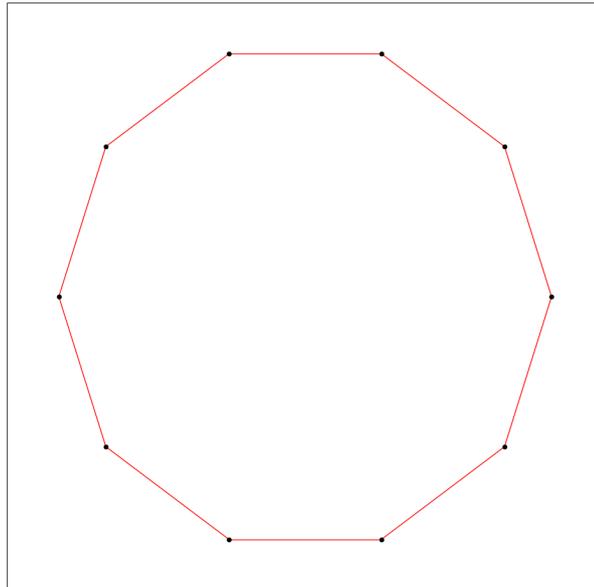
A partir disso, percebe-se que o que caracteriza  $S_1$  e  $S_2$  será  $q$ , se  $q = 0$ , tem-se

$$c_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i = 0 \\ 1 - q + w_1 = 1, & \text{se } i \in S_1 \\ w_2 = 0, & \text{se } i \in S_2 \end{cases} \quad (5.14)$$

Constatado na equação (5.2).

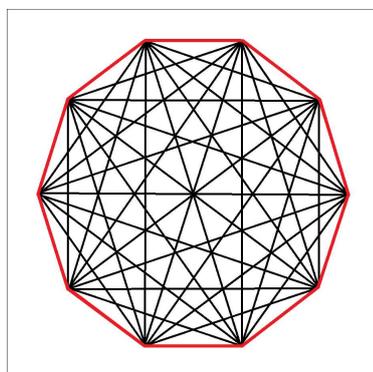
Para todo  $q$  diferente de 0 a rede é completamente ligada e quando  $q = 1$  as ligações terão a mesma intensidade, tem-se que  $w_1 = w_2$ , ou seja, se  $q$  aumenta,  $S_2 \rightarrow S_1$ , para todo  $k$ . Tem-se então que o papel do  $q$  é dar importância às ligações de  $S_2$ .

No caso de  $k = 2$ , tem-se



**Figura 5.2:** Rede complexa com 10 nós,  $k = 2$ ,  $q = 0$ .

Na Figura 5.2, tem-se uma rede com  $k = 2$  e  $q = 0$ , neste caso o  $S_1$  corresponde aos vizinhos primeiros da rede e não possuímos  $S_2$ , pois não temos saltos presentes nesta.

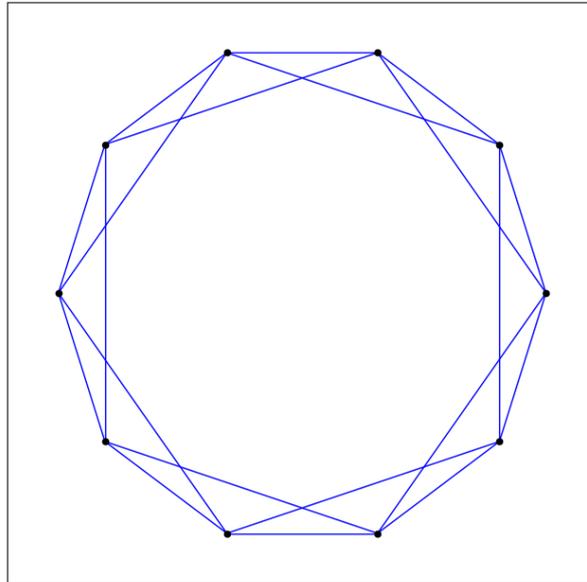


**Figura 5.3:** Rede complexa com 10 nós,  $k = 2$ , para todo  $0 < q < 1$ .

Na Figura 5.3 tem-se um exemplo de rede pequeno mundo com 16 nós,  $k = 2$  e  $q$  entre

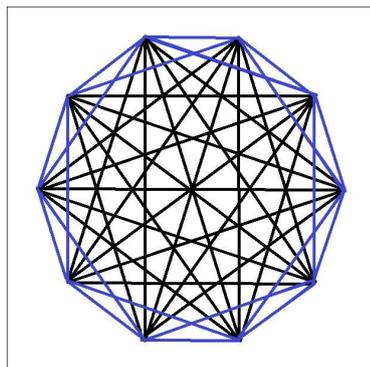
0 e 1, quanto maior for o valor de  $q$ , mais a cor preta, representando  $S_2$ , se aproximará da cor vermelha, representando  $S_1$ .

Com  $k = 4$ , tem-se:



**Figura 5.4:** Rede complexa com 10 nós,  $k = 4$ ,  $q = 0$ .

Na Figura 5.4 tem-se uma rede com  $k = 4$  e  $q = 0$ .



**Figura 5.5:** Rede complexa com 10 nós,  $k = 4$ ,  $0 < q < 1$ .

Na Figura 5.5 tem-se uma rede pequeno mundo com  $k = 4$  e  $q$  entre 0 e 1.

### 5.3 Espectro

Segundo os autores (17) o espectro é:

$$\lambda_l^{mf} = \sum_{j=0}^{N-1} c_j \exp \left[ \frac{-2\pi\beta(l-1)j}{N} \right] \quad (5.15)$$

Podendo ser representado por:

$$\lambda_l^{mf} = \sum_{j=0}^{N-1} c_j z_l^j \quad (5.16)$$

Em que  $l = 1, 2, \dots, N$

$$c_l = c_{N-l} \quad (5.17)$$

$$\lambda_l = c_0 + c_1 z_l + c_2 z_l^2 + \dots + c_{N-1} z_l^{N-1} \quad (5.18)$$

$$\lambda_l = c_0 + c_1 z_l + c_2 z_l^2 + \dots + c_{\frac{N}{2}-1} z_l^{\frac{N}{2}-1} + c_{\frac{N}{2}} z_l^{\frac{N}{2}} + c_{\frac{N}{2}+1} z_l^{\frac{N}{2}+1} + \dots + c_{N-1} z_l^{N-1} \quad (5.19)$$

$$\lambda_l = c_0 + c_{\frac{N}{2}} z_l^{\frac{N}{2}} + c_1 [z_l + z_l^{N-1}] + c_2 [z_l^2 + z_l^{N-2}] + \dots + c_{\frac{N}{2}-1} [z_l^{\frac{N}{2}-1} z_l^{\frac{N}{2}+1}] \quad (5.20)$$

se  $z_l \equiv \exp \left[ \frac{-2\pi i(l-1)}{N} \right]$ , então  $z_l^N \equiv \exp \left[ \frac{-2\pi i(l-1)N}{N} \right] = \exp [-2\pi i(l-1)] = 1$ ,  $\lambda_l$  torna-se então

$$\lambda_l = c_0 + c_{\frac{N}{2}} z_l^{\frac{N}{2}} + c_1 [z_l + z_l^{-1}] + c_2 [z_l^2 + z_l^{-2}] + \dots + c_{\frac{N}{2}-1} [z_l^{\frac{N}{2}-1} + z_l^{-(\frac{N}{2}+1)}] \quad (5.21)$$

Se  $z_l^{\frac{N}{2}} = \exp \left[ \frac{-2\pi i(l-1)}{2} \right] = \exp [-\pi i(l-1)] = \cos(\pi(l-1)) + i \sin(\pi(l-1)) = (-1)^{l+1} = (-1)^{l-1}$

$$\lambda_l = c_0 + c_{\frac{N}{2}} (-1)^{l-1} + 2c_1 \cos(\theta_l) + 2c_2 \cos(2\theta_l) + \dots + 2c_{\frac{N}{2}-1} \cos\left(\left(\frac{N}{2}-1\right)\theta_l\right) \quad (5.22)$$

Em que  $\theta_l \equiv \exp \left[ \frac{-2\pi i(l-1)}{N} \right]$

$$\lambda_l = c_0 + c_{\frac{N}{2}} (-1)^{l-1} + 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} c_j \cos(j\theta_l). \quad (5.23)$$

Mas:

$$w_1 = qw_2 \quad (5.24)$$

Notemos, a partir disso, que  $q$  determinará  $w_1$

$$w_2 = \frac{qk}{N-1-(1-q)k} = c''k \quad (5.25)$$

$$c'' = \frac{q}{N-1-(1-q)k} \quad (5.26)$$

$$kc' = (1-q) + kqc'' \quad (5.27)$$

$$k(c' - c'') = (1-q) + (q-1)kc'' = (1-q)(1 - kc'') \quad (5.28)$$

$$c_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i = 0 \\ 1 - q + w_1 = c'k, & \text{se } i \in S_1 \\ w_2 = c''k, & \text{se } i \in S_2 \end{cases} \quad (5.29)$$

$$\lambda_l = (-1)^{l-1} c_{\frac{N}{2}} + 2kc' \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} c_j \cos(i\theta_l) + 2kc'' \left[ \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(j\theta_l) + \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \cos(j\theta_l) \right] \quad (5.30)$$

$$\lambda_l = (-1)^{l-1} c_{\frac{N}{2}} + k(c' - c'')R_l + 2kc'' \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(j\theta_l), \quad (5.31)$$

com

$$R_l \equiv \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos \left( j \exp \left[ \frac{-2\pi i(l-1)}{N} \right] \right) = \frac{\sin \left( \frac{(k+1)\pi(l-1)}{N} \right)}{\sin \left( \frac{\pi(l-1)}{N} \right)} - 1. \quad (5.32)$$

Mas:

$$2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(i\theta_l) = \frac{\sin \left( \left( \frac{N}{2} - 1 + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi(l-1)}{N} \right)}{\sin \left( \frac{2\pi(l-1)}{2N} \right)} - 1 \quad (5.33)$$

$$2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(i\theta_l) = \frac{\sin \left( (N-1) \frac{\pi(l-1)}{N} \right)}{\sin \left( \frac{2\pi(l-1)}{2N} \right)} - 1 \quad (5.34)$$

$$2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(i\theta_l) = \frac{\sin \left( \pi(l-1) - \frac{\pi(l-1)}{N} \right)}{\sin \left( \frac{\pi(l-1)}{N} \right)} - 1 \quad (5.35)$$

$$2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(i\theta_l) = \frac{\sin(\pi(l-1)) \cos \frac{\pi(l-1)}{N}}{\sin \left( \frac{\pi(l-1)}{N} \right)} - \frac{\cos(\pi(l-1)) \sin \left( \frac{\pi(l-1)}{N} \right)}{\sin \left( \frac{\pi(l-1)}{N} \right)} - 1 \quad (5.36)$$

$$2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}-1} \cos(i\theta_j) = -\cos(\pi(l-1)) \sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right) - 1 = (-1)^l - 1. \quad (5.37)$$

Assim:

$$\lambda_l = (-1)^{l-1} c_{\frac{N}{2}} + k(c' - c'')R_l + 2kc''[(-1)^l - 1], \quad (5.38)$$

com  $c_{\frac{N}{2}} = c''k$ , pois  $\frac{N}{2} \in S_2$

$$\lambda_l = k(c' - c'')R_l + kc''[(-1)^{l-1} + (-1)^{l-1} - 1] \quad (5.39)$$

$$\lambda_l = -kc'' + k(c' - c'')R_l. \quad (5.40)$$

Mas  $kc'' = w_2$  e  $kc' = (1-q) + qw_2$ , ou seja,  $k(c' - c'') = (1-q)(1-w_2)$ . Portanto,

$$\lambda_l = -w_2 + (1-q)(1-w_2)R_l. \quad (5.41)$$

Pode-se ver que:

$$\lambda_1 = -w_2 + (1-q)(1-w_2)R_1, \quad (5.42)$$

com  $R_1 = k + 1 - 1 = k$

$$\lambda_1 = -w_2 + (1-q)(1-w_2)k. \quad (5.43)$$

E se  $q = 0$ , tem-se que:

$$\lambda_l = R_l = \frac{\sin\left(\frac{(k+1)\pi(l-1)}{N}\right)}{\sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)} - 1. \quad (5.44)$$

Neste caso, se  $k = 2$

$$\lambda_l = \frac{\sin\left(\frac{3\pi(l-1)}{N}\right)}{\sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)} - 1 \quad (5.45)$$

$$\lambda_l = 3 \frac{\sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)}{\sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)} - \frac{4 \sin^3\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)}{\sin\left(\frac{\pi(l-1)}{N}\right)} - 1 \quad (5.46)$$

$$\lambda_l = 2 \cos\left(\frac{2\pi(l-1)}{N}\right). \quad (5.47)$$

## 5.4 Médias

Iremos estudar todas as ligações a partir da média destas, usa-se uma intensidade diferente, a partir do  $q$ .

Usa-se todas as ligações e pesos diferentes destas. Esses pesos darão, em média, as diferentes configurações de diferentes ligações.

Usando os resultados obtidos de  $\lambda_l$  e  $R_l$ , pode-se calcular

$$N = \sum_r n_r = \sum_l \frac{1}{e^{\beta(\lambda_l - \mu)} - 1}. \quad (5.48)$$

Mas,

$$e^{\beta(\lambda_l - \mu + E_0 - E_0)} = e^{\beta(\lambda_l - E_0)} \cdot e^{-\beta(\mu - E_0)}. \quad (5.49)$$

Como  $z = e^{\beta(\mu - E_0)}$ , tem-se que:

$$N = \sum_{l=0}^1 \frac{1}{z^{-1} e^{\beta(\lambda_l - E_0)} - 1}. \quad (5.50)$$

No estado excitado, tem-se que:

$$N_e = \frac{1}{e^{\beta(\lambda_l - E_0)} - 1}. \quad (5.51)$$

Como  $N = N_0 + N_e$ , tem-se que  $N_0$

$$N_0 = N - N_e \quad (5.52)$$

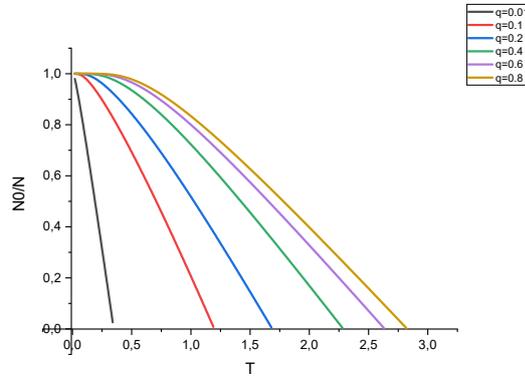
$$N_0 = N - \sum_l \frac{1}{e^{\beta(\lambda_l - E_0)} - 1} \quad (5.53)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{1}{N} \sum_l \frac{1}{e^{\beta(\lambda_l - E_0)} - 1}. \quad (5.54)$$

Percebe-se que representamos a nossa rede de campo médio, a priori na Figura 5.1 com 15 nós, posteriormente com 10 nós 5.3, 5.2, 5.4 e 5.5 para poder entender como a rede e os parâmetros se comportam, mas para haver transição de fase precisamos estar no limite

termodinâmico, por isso trata-se de uma rede com 10000 nós.

Observando o comportamento de  $\frac{N_0}{N}$  a partir da variação de  $q$  em sistemas com  $k = 2$  e 4:



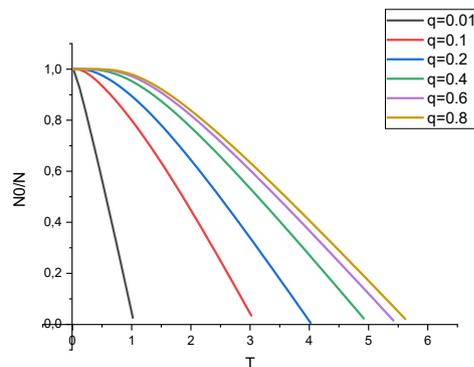
**Figura 5.6:** Rede complexa com 10000 nós,  $k = 2$ , observando variação de  $q$ .

Na Figura 5.6 temos  $\frac{N_0}{N}$  em função do crescimento de  $T$  de uma rede complexa com 10000 nós,  $k = 2$  e observa-se a variação de  $q = 0,01; 0,1; 0,2; 0,4; 0,6$  e  $0,8$ .

Percebe-se que quando  $T = 0$  todas as partículas estarão no estado fundamental, independente do valor de  $q$ , a medida que a temperatura cresce, as partículas vão para o estado mais excitado. Quando  $\frac{N_0}{N} = 0$  o estado fundamental deixou de ser macroscopicamente populado.

Percebe-se também, que quando  $q = 0,01$  a queda é rápida, ou seja, tem-se facilidade de sair do estado fundamental para o estado excitado. Já observando  $q = 0,8$  nota-se que a curva é mais tênue, ou seja, sai do estado fundamental com mais dificuldade.

Quanto maior valor de  $q$ , mais todos sítios tendem a se ligarem entre si, a  $T_c$  é maior, se aumentar o  $q$ .

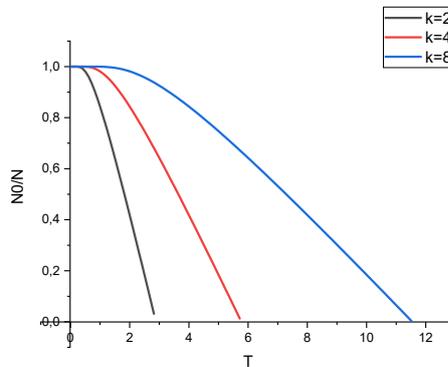


**Figura 5.7:** Rede complexa com 10000 nós,  $k = 4$ , varia  $q$ .

Na Figura 5.7 tem-se uma rede com  $k = 4$  e observa-se o comportamento de  $\frac{N_0}{N}$  em relação ao crescimento de  $T$ , com igual variação de  $q$ .

De forma semelhante a 5.6,  $T = 0$  todas as partículas estarão no estado fundamental, independente do valor de  $q$ , a medida que  $\frac{N_0}{N}$  vai diminuindo com o aumento da temperatura, o estado fundamental vai deixando de ser macroscopicamente populado. Também condizente com 5.6, quanto menor o  $q$  a queda é rápida, ou seja, sai do estado fundamental para o estado excitado com facilidade, já quanto maior o  $q$ , tem-se dificuldade de sair do estado fundamental.

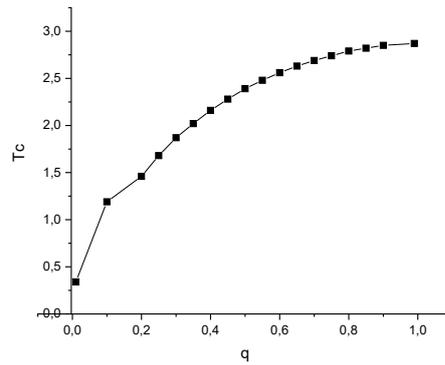
Pode-se comparar o comportamento da temperatura crítica fixando o  $q$  e observando como se comportará com  $k$  diferente.



**Figura 5.8:** Rede pequeno mundo com 10000 nós,  $q = 0.99$ , observa-se a variação de  $k$ .

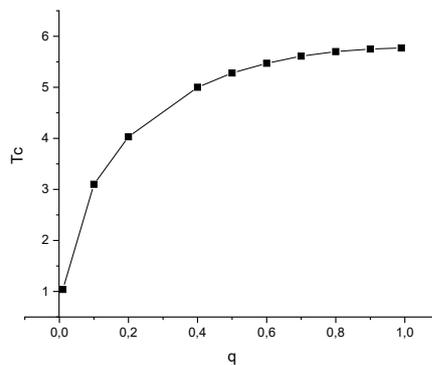
Na Figura 5.8 observa-se que, com  $k = 2$  a saída do estado fundamental é muito mais rápida e a temperatura crítica é menor, já com  $k = 8$ , tem-se um  $T_c$  maior. Ou seja, o  $k$  tem um papel semelhante a dimensão na rede campo médio.

Para descobrir a temperatura crítica em função de  $q$ , pega-se o último valor antes de  $\frac{N_0}{N}$  tornar-se negativo, ou seja, quando toca-se o eixo da abscissa e obtém-se



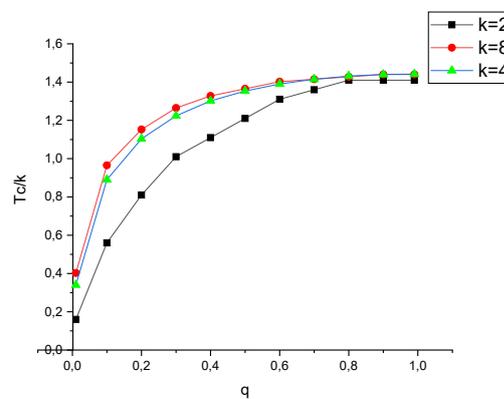
**Figura 5.9:** Rede complexa com 10000 nós,  $k = 2$ ,  $T_c$  em função de  $q$ .

Na Figura 5.9, observa-se a evolução da temperatura em relação a  $q$ , com  $k = 2$ .



**Figura 5.10:** Rede complexa com 10000 nós,  $k = 4$ ,  $T_c$  em função de  $q$ .

Na Figura 5.10, observa-se a evolução da temperatura em relação a  $q$ , com  $k = 4$ .



**Figura 5.11:** Rede pequeno mundo com 10000 nós,  $\frac{T_c}{k}$ .

Na Figura 5.11 faz-se uma análise de como se comporta as curvas de  $\frac{T_c}{k}$  em relação a

$q$ , fazendo uma divisão dos resultados obtidos por  $k$ , percebe-se que quanto maior for o  $k$ , a temperatura crítica se estabilizará mais rapidamente. Ao dividir por  $k$ , o ponto final será igual e para garantir o tamanho, as curvas com  $k$  maior ele se estabilizará primeiro.

Como dito,  $k$  e  $q$  têm um papel similar a de dimensão de uma rede regular, pois ambos tendem a tonar os sítios mais ligados entre si, sabe-se que quanto maior a dimensão maior será o  $T_c$ .

Vislumbrando a importância do condensado de Bose-Einstein na ciência e diversidade de funcionalidades das redes complexas, foi estudado, a priori, numa rede complexa estrela, norteados pelo trabalho de Vidal e colaboradores (16). Foi observado o comportamento da fugacidade,  $z$  em função de  $\frac{T_c}{T}$  a partir da equação (4.49), observamos que as curvas cairão de acordo com a função polinomial de grau  $1, \frac{1}{n}$ , em que,  $n = \frac{N}{L}$ , notando, assim, que quanto maior o valor de  $n$  mais rápida será a queda.

Foi trabalhado também que o número de partículas no condensado tende a aumentar a medida que a temperatura diminui e quando  $T \rightarrow 0$  todas as partículas estarão no estado fundamental. Esse é um resultado condizente com nossa análise de  $\frac{c_v}{k_B L}$  em função de  $\frac{T}{T_c}$ , nesta percebemos que a rápida queda quando  $T \rightarrow 0$  evidencia a existência de gap em nosso sistema, porque quando  $T$  estiver próximo de 0K, não tem-se energia necessária para que o bóson passe do estado fundamental para o primeira estado excitado. Nota-se também que curva de  $n = 10$  é muito mais acentuada que  $n = 1$  e  $n = 0, 1$ , constando, assim, que  $P(E_1)_{n=0,1} < P(E_1)_{n=1} < P(E_1)_{n=10}$ , condizente com os resultados obtidos no gráfico 4.2.

No capítulo 5 foi embasado na rede complexa de introduzida na referência (17) para verificar a existência do condensado de Bose-Einstein.

Para este trabalho, foi utilizado a matriz hamiltoniana. Utilizando o parâmetro  $q$ , que nos dá o peso das ligações, e  $k$ , que nos diz sobre as vizinhanças, analisou-se o número médio de partículas e o comportamento de  $T_c$  em relação a  $q$ .

Quando foi analisado o comportamento de  $\frac{N_0}{N}$  verificou-se que, a medida que  $k$  cresce, os valores da temperatura tornam-se cada vez maiores.

A partir desta, analisou-se a temperatura crítica em relação a  $q$  e, posteriormente, analisou-

se o comportamento da curvatura de  $\frac{T_c}{k}$  em função de  $q$  e percebe-se que quanto maior o  $k$  mais rápida a temperatura crítica se estabiliza.

Foi percebido que os parâmetros  $k$  e  $q$  se comportam como a dimensão de uma rede regular.

O desafio de aumento da temperatura crítica deste sistema pode ser assim solucionado aumentando os parâmetros  $k$  e  $q$ , ou seja, aumentando o número de ligações entre os nós. Em trabalhos futuros veremos como todas as propriedades físicas se comportam de acordo com os parâmetros citados.

As aplicações do condensando são grandes, mas o desafio de aumentar a temperatura crítica do sistema, perto da temperatura ambiente, e abaixar a densidade necessária é um desafio que ajudaremos a resolver com este trabalho.

Abaixo da temperatura crítica o estado fundamental se macroscopicamente populado e percebe-se que, aumentando os números de ligações a temperatura crítica crescerá. Em trabalhos futuros estudaremos como todas as outras propriedades termodinâmicas se comportarão de acordo com os parâmetros  $q$  e  $k$ .

## Referências

- [1] Albert Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. zweite abhandlung. *Albert Einstein: Akademie-Vorträge: Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften 1914–1932*, pages 245–257, 2005.
- [2] Mike H Anderson, Jason R Ensher, Michael R Matthews, Carl E Wieman, and Eric A Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, 269(5221):198–201, 1995.
- [3] Maïke D Lachmann, Holger Ahlers, Dennis Becker, Aline N Dinkelaker, Jens Grosse, Ortwin Hellmig, Hauke Müntinga, Vladimir Schkolnik, Stephan T Seidel, Thijs Wendrich, et al. Ultracold atom interferometry in space. *Nature communications*, 12(1):1317, 2021.
- [4] Ebrahim Ghasemian. Dissipative quantum computation and quantum state preparation based on bec qubits. *JOSA B*, 40(2):247–259, 2023.
- [5] Dale G Fried, Thomas C Killian, Lorenz Willmann, David Landhuis, Stephen C Moss, Daniel Kleppner, and Thomas J Greytak. Bose-einstein condensation of atomic hydrogen. *Physical Review Letters*, 81(18):3811, 1998.
- [6] F Pereira Dos Santos, Jérémie Léonard, Junmin Wang, CJ Barrelet, F Perales, E Rasel, CS Unnikrishnan, M Leduc, and C Cohen-Tannoudji. Bose-einstein condensation of metastable helium. *Physical Review Letters*, 86(16):3459, 2001.
- [7] Giovanni Modugno, Gabriele Ferrari, Giacomo Roati, Robert J Brecha, A Simoni, and Massimo Inguscio. Bose-einstein condensation of potassium atoms by sympathetic cooling. *Science*, 294(5545):1320–1322, 2001.
- [8] Stanley Milgram. The small world problem. *Psychology today*, 2(1):60–67, 1967.
- [9] Duncan J Watts and Steven H Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *nature*, 393(6684):440–442, 1998.
- [10] Ginestra Bianconi and A-L Barabási. Competition and multiscaling in evolving networks. *Europhysics letters*, 54(4):436, 2001.
- [11] Réka Albert and Albert-László Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of modern physics*, 74(1):47, 2002.
- [12] Tim Byrnes, Shinsuke Koyama, Kai Yan, and Yoshihisa Yamamoto. Neural networks using two-component bose-einstein condensates. *Scientific reports*, 3(1):2531, 2013.

- 
- [13] Xiao-Dong Bai and Dongxiao Zhang. Search for rogue waves in bose-einstein condensates via a theory-guided neural network. *Physical Review E*, 106(2):025305, 2022.
  - [14] Raj Kumar Pathria. *Statistical mechanics*. Elsevier, 2016.
  - [15] Ryogo Kubo, Morikazu Toda, and Natsuki Hashitsume. *Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics*, volume 31. Springer Science & Business Media, 2012.
  - [16] EJGG Vidal, RP A Lima, and ML Lyra. Bose-einstein condensation in the infinitely ramified star and wheel graphs. *Physical Review E*, 83(6):061137, 2011.
  - [17] Carsten Grabow, Stefan Grosskinsky, and Marc Timme. Small-world network spectra in mean-field theory. *Physical review letters*, 108(21):218701, 2012.
  - [18] Mark Newman. *Networks*. Oxford university press, 2018.