

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA

SOBRE A TERMODINÂMICA DOS  
ESPECTROS

Edelver Carnovali Junior

Orientador: Prof. Dr. Maurício Porto Pato

Tese submetida ao Instituto de Física  
da Universidade de São Paulo, para  
a obtenção do título de doutor em  
ciências.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Maurício Porto Pato (IFUSP)  
Prof. Dr. Mário José de Oliveira (IFUSP)  
Prof. Dr. José Carlos Sartorelli (IFUSP)  
Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Unicamp)  
Profa. Dra. Kyoko Furuya (Unicamp)

São Paulo, 2008.



## Resumo

Tês ensembles, respectivamente relacionados com as distribuições Gaussiana, Lognormal e de Lévy, são abordados neste trabalho primordialmente do ponto de vista da termodinâmica de seus espectros. Novas expressões para as grandezas termodinâmicas são encontradas para os ensembles de Stieltjes e de Bertuola-Pato, e a conexão destes com os ensembles Gaussianos é estabelecida. Esta tese também compromete-se com a continuação do desenvolvimento e aprimoração do ensemble generalizado de Bertuola-Pato, estendendo alguns resultados para os ensembles *simplético* e *unitário generalizados*, além do *ortogonal generalizado* já introduzido anteriormente por A. C. Bertuola e M. P. Pato.

## Abstract

Three ensembles, related to the Gaussian, the Lognormal and the Lévy distributions respectively, have been studied in this work and were investigated most of all in what concerns their spectral thermodynamics. New expressions for the thermodynamics quantities were found for the Stieltjes and the Bertuola-Pato ensembles, and the connection with the gaussian ensembles is established. This work concerned with the development continuity and with the improvement of Bertuola-Pato generalized ensemble, extending some of the results to the *symplectic* and *unitary generalized ensembles*, besides the *orthogonal generalized ensemble* introduced before by A. C. Bertuola and M. P. Pato.

“Esta tese é dedicada aos meus pais, Edilver e Berenice, por todo carinho e suporte financeiro durante meus estudos”.

## **Agradecimentos**

Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro, ao meu orientador Maurício pelo conhecimento compartilhado, aos funcionários da comissão de pós-graduação pelo excepcional atendimento, e aos meus vários colegas de instituto por inúmeras discussões e opiniões que se mostraram valiosas não só para a academia, mas para minha vida como um todo.

Agradeço também ao meu filho Cauã, pela extraordinária motivação que o seu nascimento me deu nos últimos meses deste projeto, e à minha querida Stella, pelo carinho, apoio e compreensão durante os momentos mais difíceis.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Teoria das Matrizes Aleatórias (TMA): Origens, Perspectivas, Motivações</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Considerações sobre as simetrias do espaço-tempo e suas conseqüências para o operador Hamiltoniano</b>	<b>12</b>
<b>4</b>	<b>Os Ensembles Gaussianos</b>	<b>21</b>
4.1	O Ensemble Gaussiano Ortogonal (EGO) . . . . .	24
4.2	A densidade de probabilidade de uma matriz pertencente ao EGO e a distribuição conjunta de seus autovalores . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Termodinâmica de espectros</b>	<b>39</b>
5.1	Alguns Ensembles Relacionados aos Polinômios Ortogonais . .	42
5.2	Grandezas Termodinâmicas . . . . .	44
5.2.1	Ensemble de Jacobi: $V(x) = -\ln[(1-x)^\alpha(1+x)^\eta]$ . .	44
5.2.2	Ensemble de Hermite: $V(x) = x^2/2$ . . . . .	53
5.2.3	Ensemble de Legendre: $V(x) = 0$ . . . . .	55
5.3	Espectros do EGO e a termodinâmica do caso de Hermite: valores numéricos . . . . .	58
5.4	Simulação Numérica do Ensemble Gaussiano Ortogonal . . . .	61
<b>6</b>	<b>O Ensemble de Stieltjes: <math>V(x) = (1/s) \ln^2(x)</math></b>	<b>64</b>
<b>7</b>	<b>O Ensemble Generalizado de Bertuola-Pato</b>	<b>69</b>
7.1	O domínio $q < 1$ . . . . .	72
7.1.1	A distribuição de um elemento de matriz para $q < 1$ . .	73
7.1.2	A função de partição para o domínio $q < 1$ . . . . .	76

7.2	O domínio $q > 1$ . . . . .	79
7.2.1	A distribuição de um elemento de matriz para $q > 1$ . . . . .	79
7.2.2	A função de partição para o domínio $q > 1$ . . . . .	83
7.2.3	A conexão entre o ensemble generalizado Bertuola-Pato e o de Lévy . . . . .	85
7.2.4	Grandezas termodinâmicas . . . . .	88
<b>8</b>	<b>Conclusões</b>	<b>91</b>
<b>A</b>	<b>O método de Box-Müller</b>	<b>96</b>
<b>B</b>	<b>Derivadas de ordem não inteira</b>	<b>98</b>
<b>C</b>	<b>A transformada de Fourier de (7.14)</b>	<b>99</b>
<b>D</b>	<b>A expansão das Funções de Bessel Modificadas para pequenos argumentos</b>	<b>102</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O presente trabalho concentra-se no estudo da termodinâmica de espectros de ensembles relacionados a três importantes distribuições estatísticas, a saber, os ensembles Gaussiano, Lognormal e de Lévy. Com esta finalidade, duas generalizações dos ensembles Gaussianos foram estudadas e diferentes funções de partição foram encontradas para os ensembles de Stieltjes e de Lévy. A transição entre as termodinâmicas destes três ensembles também foi abordada tornando explícita a maneira como cada generalização recobre o caso Gaussiano.

Desta forma, os três próximos capítulos são dedicados exclusivamente à introdução da Teoria das Matrizes Aleatórias (TMA) e à dedução dos resultados mais relevantes ao desenvolvimento e aplicações da termodinâmica de espectros.

Uma breve introdução histórica é feita no capítulo 2, algumas considerações sobre as simetrias do espaço-tempo e suas implicações para o operador Hamiltoniano são feitas no capítulo 3; os ensembles Gaussianos são introduzidos no capítulo 4. Os capítulos seguintes preocupam-se em introduzir e aplicar a termodinâmica de espectros, tanto para os bem conhecidos ensembles Gaussianos, quanto para os novos ensembles de Stieltjes e de Bertuola-Pato, este último recobrando o ensemble de matrizes de Lévy em um certo domínio.

O ensemble de Stieltjes, bem como sua termodinâmica, é abordado no capítulo 6 e novas expressões para as grandezas termodinâmicas, diferentes das encontradas por Dyson e Mehta para os ensembles Circular e Gaussianos, são encontradas. Este ensemble, como já foi dito, se mostra interessante por estar relacionado com a distribuição *lognormal* e com os clássicos polinômios



de Stieltjes-Wigert.

O ensemble generalizado de Bertuola-Pato é introduzido e desenvolvido no capítulo 7, através da termodinâmica generalizada de Tsallis aplicada à TMA, e alguns dos resultados obtidos por Alberto Carlos Bertuola em sua tese de doutorado são generalizados também para os ensembles Gaussianos unitário e simplético, além do ortogonal. A forma explícita das grandezas termodinâmicas é, pela primeira vez, calculada para este ensemble. Este ensemble recobre os Gaussianos de uma forma um tanto quanto sutil, apresentando um limite singular para o parâmetro entrópico de Tsallis, onde  $q \rightarrow 1$  faz com que a distribuição de um elemento de matriz aproxime-se tanto de uma gaussiana quanto de uma função de Lévy, dependendo do valor assumido para um parâmetro a ser fixado.

Este trabalho, além de apresentar novas expressões para as grandezas termodinâmicas de espectros, motivando desta forma a busca experimental por novos sistemas, também preenche algumas das várias lacunas existentes neste ramo do conhecimento, como é o caso da verificação da universalidade, sugerida pela referência [4], da termodinâmica dos ensembles relacionados aos polinômios clássicos, feita neste trabalho inteiramente através do formalismo termodinâmico numa abordagem que difere da verificação apresentada em [14]. Como exceção, introduzimos o ensemble de Stieltjes, que também é um ensemble gerado por polinômios ortogonais, porém que apresenta uma termodinâmica diferente. Outro exemplo de como este trabalho contribui para a completeza do conhecimento nesta área, é o tratamento dado aqui para o ensemble generalizado de Bertuola-Pato, que fora introduzido primeiramente em [18, 19] apenas com o *ensemble ortogonal generalizado*. Aqui, extendemos o formalismo para os ensembles *simplético* e *unitário generalizados*.

## Capítulo 2

# Teoria das Matrizes Aleatórias (TMA): Origens, Perspectivas, Motivações

Desde a reveladora descoberta do neutron por James Chadwick (1891-1974) no começo da década de 30, considerada o nascimento da física nuclear, no laboratório Cavendish, Cambridge, reações nucleares envolvendo neutrons assumiram um importante papel para a física mundial. Com partículas carregadas, as reações nucleares são em parte suprimidas pela repulsão coulombiana mútua entre os núcleos do alvo e as partículas do feixe incidente, mas com neutrons (partículas neutras) toda a energia do feixe pode participar da reação, o que aumenta drasticamente as probabilidades, ou seja, as secções de choque.

O estudo da captura de neutros pelos núcleos alvo levou Niels Bohr (1885-1962) a propor em 1936, que um sistema composto de longa vida era formado quando um núcleo capturava um neutron. Por “longa vida” entende-se que a desintegração do sistema não está imediatamente relacionada com o primeiro estágio da colisão, e ocorre em  $10^{-16}s$ , intervalo muito maior que o típico intervalo de  $10^{-21}s$  deduzido a partir das dimensões conhecidas do núcleo.

O que levou Bohr a formular esta hipótese foi a presença de picos finos e bem localizados nos gráficos da seção de choque em função da enenergia dos neutrons incidentes em experiências de transmissão de neutrons através de alvos nucleares. Os picos mostram os valores de energia para os quais os neutrons são capturados de forma que as seqüências de picos formam espectros de energias característicos para cada tipo de alvo utilizado.

Poucos anos depois, a descoberta da fissão nuclear por Hahn e Strassmann colocou a física nuclear e a captura de neutrons num patamar histórico jamais ocupado pela ciência. A fissão nuclear possibilitava a liberação da enorme quantidade de energia contida dentro dos núcleos atômicos, viabilizando a construção das bombas atômicas lançadas em 1945 sobre Hiroshima e Nagasáqui, no Japão, o que antecipou o fim da segunda guerra mundial. A tecnologia desenvolvida para as bombas consistia em produzir uma reação em cadeia *descontrolada* de fissões nucleares via captura de neutrons, onde cada núcleo composto fissionado emitia, além do neutron capturado, um neutron adicional.

Com o término da guerra, e a conseqüente crise energética, criou-se uma necessidade sobre a exploração da energia nuclear, ou seja, o processo de fissão nuclear em cadeia precisava ser *controlado* com a finalidade de construir o reator nuclear, e para isto era fundamental entender as propriedades dos espectros de ressonâncias dos núcleos compostos.

Uma vez que os núcleos capazes de produzir tal reação em cadeia são núcleos muito pesados, e que por sua vez possuem muitos nucleons, o enorme grau de liberdade introduz uma complexidade na estrutura de camadas que torna impossível o tratamento exato dos níveis de energia para estes elementos, surgindo assim, inevitavelmente, a necessidade de uma teoria estatística dos níveis de energia. Foi neste contexto que Eugene Wigner introduziu a *Teoria das Matrizes Aleatórias*, que será amplamente abordada neste trabalho.

Particularmente, sua contribuição para uma conferência sobre espectroscopia de neutron em 1956, “Conference on Neutron Physics by Time of Flight” [1], é de fundamental importância para o presente trabalho, pois foi onde Wigner apresentou a distribuição conjunta dos autovalores das matrizes pertencentes aos ensembles Gaussianos (ortogonal na ocasião), dada por

$$P(E_1, \dots, E_N) = C_{N\beta} \exp\left(-\beta \sum_i E_i^2\right) \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta.$$

Esta distribuição têm um papel central em toda a discussão que será feita ao longo deste trabalho, pois foi partindo dela que a concepção de *termodinâmica de espectros* surgiu, por meio de outra figura central na teoria das matrizes aleatórias, o físico Freeman Dyson <sup>1</sup>. No primeiro de uma série de três impor-

---

<sup>1</sup>Na referência [7], Gabor Szego sugere, brevemente, que foi Stieltjes o primeiro a idealizar a analogia entre autovalores e posições de cargas em um gás de Coulomb.

tantes trabalhos publicados em 1962 [10, 11, 12], Dyson resume em poucas palavras a idéia por trás da teoria das matrizes aleatórias:

*“Análises teóricas recentes têm tido impressionante sucesso ao interpretar a estrutura detalhada dos estados de baixas excitações de núcleos complexos. No entanto, deve haver um ponto além do qual tais análises de níveis individuais não permanecem úteis. Por exemplo, observações de níveis de núcleos pesados, na região de captura de neutron, fornece informação precisa sobre o aumento de níveis partindo de um número  $N$ , até  $(N+n)$ , onde  $N$  é um inteiro da ordem de  $10^6$ . É improvável que uma descrição de níveis baseada na estrutura de camada (Shell structure) e de números quânticos individuais possa ser estendida até o milionésimo nível. É razoável, então, perguntar se os estados altamente excitados podem ser entendidos de um ponto de vista diametralmente oposto, supondo como hipótese de trabalho que toda a estrutura de camada foi perdida e que os únicos bons números quânticos que permanecem são spin e paridade. A resposta a esta questão leva a uma teoria estatística dos níveis de energia. A teoria estatística não previrá a seqüência minuciosa dos níveis em um dado núcleo, mas descreverá a aparência geral e o grau de irregularidade da estrutura dos níveis que esperamos que ocorra em qualquer núcleo que seja complicado demais para ser compreendido em detalhe”.*

*“O que está sendo sugerido é um novo tipo de mecânica estatística, na qual nós renunciemos o conhecimento exato não do estado do sistema, mas da própria natureza do sistema. Nós tomamos um núcleo complexo como sendo uma caixa preta na qual um grande número de partículas estão interagindo de acordo com leis desconhecidas. O problema então é definir de maneira matematicamente precisa um ensemble de sistemas no qual todas as leis de interação possíveis são igualmente prováveis”.*

De forma ainda mais resumida, a essência da Teoria das Matrizes Aleatórias foi descrita por Wigner [3] numa citação de 1961:

*“...o Hamiltoniano que governa o comportamento de um sistema complicado é uma matriz aleatória simétrica com nenhuma propriedade particular exceto por sua natureza simétrica.”*

Os três principais ingredientes dos ensembles de Wigner-Dyson são: i) simetrias do espaço-tempo, ii) isotropia no espaço de Hilbert, iii) independência

estatística dos elementos de matriz. i) e ii) são requerimentos físicos, iii) é uma condição não-essencial introduzida com propósitos de simplicidade matemática.

A seguir estudaremos as conseqüências dos itens i) e iii) para a TMA, que serão abordadas de forma detalhada nos capítulos 3 e 4, respectivamente, completando assim os três capítulos dedicados à introdução da teoria .

## Capítulo 3

# Considerações sobre as simetrias do espaço-tempo e suas conseqüências para o operador Hamiltoniano

Na TMA, como foi dito na declaração de Dyson, acima, assume-se que os únicos bons números quânticos que permanecem ao se estudar sistemas muito complexos são os relativos ao *spin* e à *paridade* da função de onda. Portanto a teoria deve estudar as conseqüências que rotações no espaço-tempo, ou melhor, inversões espaciais e inversão no sentido do tempo, causam nestes números quânticos, bem como no operador Hamiltoniano.

Sabemos que as simetrias quânticas estão ligadas a transformações canônicas representadas por operadores que comutam com o Hamiltoniano, sendo estes operadores unitários para que quantidades observáveis, tais como a probabilidade dada pelo produto de dois estados  $\Phi$  e  $\Psi$ ,  $\langle \phi | \Psi \rangle$ , sejam conservadas.

Começemos estudando a inversão no sentido do tempo. Vamos denotar o operador responsável por esta inversão por  $T$ , não esquecendo da regra de transformação de um operador qualquer, por exemplo um operador genérico  $A$ , dada por  $TAT^{-1}$ .

Quando aplicamos o operador  $T$  ao operador de posição  $q$  e ao operador de momento  $p$ , este sendo linear no tempo ( $p = m \frac{dq}{dt}$ ), obtemos

$$TqT^{-1} = q$$

e

$$TpT^{-1} = -p.$$

Como estes operadores em mecânica quântica correspondem a transformações canônicas, o operador  $T$  não deve alterar a relação de comutação entre  $q$  e  $p$ , de forma que

$$Ti\hbar T^{-1} = T[q, p]T^{-1} = -[q, p],$$

de onde concluímos que

$$TiT^{-1} = -i.$$

Isto mostra explicitamente que a operação de inversão no sentido do tempo e a operação de tomar o complexo conjugado estão intimamente ligadas. Este fato faz com que seja conveniente escrever o operador  $T$  da seguinte forma:

$$T = UC$$

onde  $U$  é um operador unitário, em princípio qualquer, e  $C$  denota a operação de complexo conjugado. Lembrando que os operadores de simetria devem comutar com o operador Hamiltoniano, deve existir uma base comum aos dois operadores formada por autoestados simultâneos de  $H$  e  $T$ . Além disso, duas aplicações consecutivas do operador  $T$  não devem alterar um estado qualquer, denotado aqui por  $|\Psi\rangle$ , pois a inversão no sentido do tempo aplicada a um estado onde o sentido do tempo já foi invertido retoma a situação original, ou seja,

$$T^2|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle,$$

sendo  $\lambda$  uma constante. Por outro lado,

$$T^2 = UCUC$$

e, uma vez que  $C^* = C^{-1}$ , temos:

$$T^2 = UU^* = \lambda \tag{3.1}$$

Isto equivale a dizer que

$$[UU^*]^+ = \lambda^*$$

$$(U^*)^+U^+ = \lambda^*$$

$$U^T U^{-1} = \lambda^* \quad (3.2)$$

onde  $U^T$  denota a transposta de  $U$ .

Da unitariedade de  $U$  ( $U^+ = U^{-1}$ ), temos que  $(U^+)^* = (U^{-1})^*$ , ou seja,  $U^T = (U^{-1})^*$ . Este fato, em conjunto com as relações (3.1) e (3.2), nos leva à seguinte conclusão:

$$\lambda \lambda^* = |\lambda|^2 = U U^* U^T U^{-1}$$

$$|\lambda|^2 = U U^* (U^{-1})^* U^{-1}$$

$$|\lambda|^2 = U U^* (U^*)^{-1} U^{-1} = U U^{-1}$$

$$|\lambda|^2 = 1 \quad (3.3)$$

Além disso,  $\lambda$  deve ser real, pois

$$\lambda^* = (T^2)^* = (UCUC)^* = (UU^*)^* = U^*U = UU^* = T^2 = \lambda, \quad (3.4)$$

o que mostra que  $\lambda$  é real.

Portanto, de (3.3) e (3.4) podemos concluir que

$$T^2 = \pm 1. \quad (3.5)$$

Para determinar a forma do operador  $U$ , analisemos o que o operador de inversão temporal faz com o momento angular total  $\vec{J}$ . O momento angular total é composto pelo momento angular orbital total e pelo momento de *spin* total do sistema. No caso de uma única partícula, o momento angular orbital é

$$\vec{J}_o = \vec{q} \times \vec{p}$$

$$\vec{J}_o = -i\hbar \vec{q} \times \vec{\nabla} \quad (3.6)$$

onde “ $\times$ ” é o símbolo utilizado para produto vetorial.

Em termos das componentes, temos:



$$J_{ox} = q_y(-i\hbar\frac{d}{dz}) - q_z(-i\hbar\frac{d}{dy}) = -i\hbar[q_y\frac{d}{dz} - q_z\frac{d}{dy}]$$

$$J_{oy} = q_z(-i\hbar\frac{d}{dx}) - q_x(-i\hbar\frac{d}{dz}) = -i\hbar[q_z\frac{d}{dx} - q_x\frac{d}{dz}]$$

$$J_{oz} = q_x(-i\hbar\frac{d}{dy}) - q_y(-i\hbar\frac{d}{dx}) = -i\hbar[q_x\frac{d}{dy} - q_y\frac{d}{dx}]$$

Como,

$$T\vec{J}T^{-1} = -\vec{J}, \quad (3.7)$$

olhando para (3.6) concluímos que a operação de complexo conjugado  $C$ , presente no operador  $T$ , já é suficiente para que o momento angular orbital satisfaça (3.7) e, portanto,  $U$  deve conter uma dependência no *spin*.

Consideremos o operador de *spin*,  $\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ , onde as componentes de  $\vec{\sigma}$  são as matrizes de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

que, junto com a matriz identidade, formam uma base completa no espaço das matrizes  $2 \times 2$ .

De acordo com (3.7), devemos impor as seguintes relações para as componentes de  $\vec{\sigma}$ :

$$T\sigma_xT^{-1} = U\sigma_xU^{-1} = -\sigma_x, \quad (3.8)$$

$$T\sigma_yT^{-1} = U\sigma_yU^{-1} = -\sigma_y, \quad (3.9)$$

$$T\sigma_zT^{-1} = U\sigma_zU^{-1} = -\sigma_z. \quad (3.10)$$

Podemos escrever  $U$  como uma matriz  $2 \times 2$  utilizando o fato de que as matrizes de Pauli, em conjunto com a matriz identidade, formam uma base completa. Desta forma podemos escrever

$$U = \vec{\gamma} \cdot \vec{\sigma} + \gamma_0.$$

Sabendo que as matrizes de Pauli obedecem à seguinte regra de multiplicação,

$$\sigma_k \sigma_l = g_{klm} i \sigma_m, \quad (3.11)$$

onde  $g_{klm} = 1$  quando os índices  $klm$  correspondem a permutações cíclicas ( $xyz$ ,  $zxy$  ou  $yzx$ ), e  $g_{klm} = -1$  quando os índices  $klm$  não correspondem a permutações cíclicas (por exemplo  $xzy$ ), podemos utilizar as equações (3.8), (3.9) e (3.10) para obter restrições sobre  $\gamma_x$ ,  $\gamma_y$ ,  $\gamma_z$  e  $\gamma_0$ .

De fato, basta utilizar apenas uma das equações mencionadas para deduzir quais restrições devem ser impostas. Vamos utilizar apenas a equação (3.8) para analisar os coeficientes de  $\vec{\gamma}$ :

$$\begin{aligned} U \sigma_x U^{-1} &= (|\gamma_1|^2 - |\gamma_2|^2 - |\gamma_3|^2 + |\gamma_0|^2) \sigma_x + [(\gamma_1 \gamma_2^* + \gamma_2 \gamma_1^*) + i(\gamma_3 \gamma_0^* + \gamma_0 \gamma_3^*)] \sigma_y \\ &+ [(\gamma_1 \gamma_3^* + \gamma_3 \gamma_1^*) + i(\gamma_0 \gamma_2^* + \gamma_2 \gamma_0^*)] \sigma_z + (\gamma_1 \gamma_0^* + \gamma_0 \gamma_1^*) + i(\gamma_3 \gamma_2^* + \gamma_2 \gamma_3^*) = -\sigma_x \end{aligned}$$

Olhando para a equação acima vemos que os coeficientes de  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ , bem como o número complexo  $(\gamma_1 \gamma_0^* + \gamma_0 \gamma_1^*) + i(\gamma_3 \gamma_2^* + \gamma_2 \gamma_3^*)$ , devem ser iguais a zero. Escolhendo  $\gamma_1 = \gamma_0 = 0$ , anulamos simultaneamente os coeficientes de  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ . A equação torna-se, então:

$$-(|\gamma_2|^2 + |\gamma_3|^2) \sigma_x + i(\gamma_3 \gamma_2^* - \gamma_2 \gamma_3^*) = -\sigma_x.$$

Esta última equação nos mostra que  $\gamma_2$  ou  $\gamma_3$  deve se anular. Tomando  $\gamma_3 = 0$ , temos que

$$-|\gamma_2|^2 \sigma_x = -\sigma_x$$

Isto nos mostra que  $\gamma_2$  deve ser um número de módulo igual a um. Com isto, o operador  $T$  torna-se:

$$T = \gamma_2 \sigma_y C. \quad (3.12)$$

Lembrando que  $T^2 = -1$ , e também que  $\sigma_y^2 = 1$ , concluímos que  $(\gamma_2)^2 = -1$ , sendo, portanto,  $\gamma_2 = i$ . Desta forma, a relação (3.12) torna-se:

$$T = i \sigma_y C. \quad (3.13)$$

No entanto, novamente utilizando o fato de que  $\sigma_y^2 = 1$ , é fácil verificar que

$$i \sigma_y = \exp\left(i \frac{\pi}{2} \sigma_y\right),$$

e finalmente, substituindo este resultado em (3.13), temos que

$$T = \exp\left(i \frac{\pi}{2} \sigma_y\right) C = \exp\left(i \frac{\pi}{\hbar} S_y\right) C \quad (3.14)$$

para um único spin. Notemos que apenas a componente  $y$  do *spin* importa, e que, portanto, para um sistema onde  $j$  denota a  $j$ -ésima partícula, cujo spin total é dado por

$$\vec{S} = \sum_j \vec{S}_x^{(j)} + \sum_j \vec{S}_y^{(j)} + \sum_j \vec{S}_z^{(j)} = \vec{S}_x^T + \vec{S}_y^T + \vec{S}_z^T,$$

obtemos:

$$T = \exp\left(i \frac{\pi}{\hbar} S_y^T\right) C. \quad (3.15)$$

Por simplicidade denotaremos o *spin* total na direção  $y$ , ou seja,  $S_y^T$  do sistema apenas por  $S_y$ , omitindo o índice superior  $T$ .

Notemos que, para sistemas de *spin total inteiro* (um múltiplo inteiro de  $\hbar$ ),  $T^2 = 1$ , enquanto que para sistemas de *spin total semi-inteiro* (um múltiplo semi-inteiro de  $\hbar$ ),  $T^2 = -1$ . Portanto, apenas utilizando considerações sobre a inversão no sentido do tempo, e aplicando o operador responsável por esta inversão no operador momento angular total de um sistema, percebemos que surgem duas classes de sistemas, uma com spin total inteiro e outra com spin total semi-inteiro, que devem ser analisadas separadamente.

Vamos agora estudar a estrutura da matriz que representa o operador Hamiltoniano. Analisemos a classe de Hamiltonianos invariantes à inversão temporal, começando por sistemas com *spin total* igual a um múltiplo inteiro de  $\hbar$ , ou seja, sistemas para os quais  $T^2 = 1$ .

Neste caso, podemos encontrar uma base formada por vetores tais que

$$T|\Psi_k\rangle = |\Psi_k\rangle \quad (3.16)$$

com  $k = 1, 2, 3, 4, \dots, N$ , pois com qualquer vetor  $|\Phi\rangle$  podemos contruir um vetor  $|\Psi\rangle$  tal que

$$|\Psi\rangle = a|\Phi\rangle + T a|\Phi\rangle \quad (3.17)$$

satisfaça a equação (3.16), sendo  $a$  uma constante de normalização, uma vez que  $T^2 = 1$ .

Sendo a base definida de acordo com (3.16), os elementos da matriz hamiltoniana,  $H_{kl} = \langle \Psi_k | H | \Psi_l \rangle$ , podem ser escritos como

$$H_{kl} = (C\Psi_k, CH\Psi_l)^*$$

Multiplicando esta relação pelo operador unitário  $U$ , que como vimos acima contém dependência no *spin* do sistema, temos

$$H_{kl} = (T\Psi_k, TH\Psi_l)^*$$

que também pode ser escrito da seguinte forma:

$$H_{kl} = (T\Psi_k, THT^{-1}T\Psi_l)^* \quad (3.18)$$

Utilizando a definição de  $|\Psi\rangle$  dada por (3.16), e lembrando que estamos estudando a estrutura de Hamiltonianos invariantes a inversões temporais, ou seja,  $THT^{-1} = H$ , concluímos que

$$H_{kl} = H_{kl}^*, \quad (3.19)$$

ou seja, concluímos que para sistemas com *spin* total inteiro e invariantes a reversões no sentido do tempo, a matriz hamiltoniana deve ser *real e simétrica* (a simetria é garantida pelo fato do operador Hamiltoniano ser Hermiteano).

Para casos onde o *spin* total é semi-inteiro, ou seja, sistemas para os quais o operador *inversão temporal*  $T$  obedece à relação  $T^2 = -1$ , não é possível encontrar estados que obedeçam às relações (3.16) e (3.17). Portanto, iremos proceder de forma diferente, porém análoga ao caso onde  $T^2 = 1$ , definindo estados  $|\chi_k\rangle$  que satisfazem à seguinte relação:

$$\exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right)T|\chi_k\rangle = |\chi_k\rangle. \quad (3.20)$$

A construção destes estados é possível pois, dado qualquer estado  $|\phi\rangle$ , a relação

$$|\chi\rangle = a|\phi\rangle + \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right)Ta|\phi\rangle \quad (3.21)$$

satisfaz a equação (3.20). A verificação pode ser feita substituindo (3.21) em (3.20):

$$\exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)Ta|\Phi\rangle + \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)Ta|\Phi\rangle = |\chi\rangle. \quad (3.22)$$

Uma vez que  $J_y = L_y + S_y$ , e  $T = \exp(i\frac{\pi}{\hbar}S_y)C$ , temos que

$$\begin{aligned} & \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T = \\ & \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}L_y) \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}S_y) \exp(i\frac{\pi}{\hbar}S_y)C \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}L_y) \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}S_y) \exp(i\frac{\pi}{\hbar}S_y)C, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T = \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}L_y)C \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}L_y)C.$$

Uma vez que  $C = C^{-1}$ , temos:

$$\exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y)T = \exp(-i\frac{\pi}{\hbar}L_y) \exp(i\frac{\pi}{\hbar}L_y) = 1.$$

Substituindo este resultado em (3.22), concluímos que a relação (3.21) realmente satisfaz a (3.20).

Analogamente ao que foi feito no caso onde  $T^2 = 1$ , começaremos pela identidade:

$$H_{kl} = (C \chi_k, CH \chi_l)^*.$$

Multiplicando pelo operador unitário  $U$  e em seguida pelo operador unitário  $\exp[-i(\pi/\hbar)J_y]$ , ambos multiplicando a equação acima pela esquerda, temos:

$$H_{kl} = \left( \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) T \chi_k, \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) T H \chi_l \right)^*.$$

Utilizando a relação (3.20), obtemos

$$H_{kl} = \left( \chi_k, \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) T H T^{-1} \exp\left(i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) T \chi_l \right)^*.$$

Como por hipótese o operador Hamiltoniano  $H$  é invariante em relação a inversões no sentido do tempo, ou seja,  $THT^{-1} = H$ , temos, novamente através de (3.20), que:

$$H_{kl} = \left( \chi_k, \exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) H \exp\left(i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) \chi_l \right)^*. \quad (3.23)$$

Olhando para (3.23) chegamos a mais um grupo de simetria dos Hamiltonianos. Se  $H$  for invariante a rotações, temos que  $\exp\left(-i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) H \exp\left(i\frac{\pi}{\hbar}J_y\right) = H$  e a equação acima torna-se

$$H_{kl} = H_{kl}^*,$$

o que nos mostra que as matrizes hamiltonianas para sistemas com *spin* total semi-inteiro, invariantes a reversão no sentido do tempo, bem como à rotações no sistema de coordenadas, são matrizes *reais* e *simétricas*, uma vez que o operador Hamiltoniano deve ser Hermiteano.

Portanto, as matrizes *reais* e *simétricas* em mecânica quântica representam duas classes de sistemas, uma com *spin total inteiro* e invariante à reversão no sentido do tempo, e outra com *spin total semi-inteiro* e invariante à reversão no sentido do tempo e à rotações. Átomos e núcleos pertencem a estas classes.

Sendo o operador Hamiltoniano representado por uma matriz *real* e *simétrica*, os operadores correspondentes às transformações canônicas devem ser, portanto, matrizes pertencentes ao grupo das matrizes *reais* e *unitárias*, ou seja, pertencentes ao grupo *ortogonal*.

As duas outras possibilidades de simetria não serão tratadas de forma explícita, porém faremos algumas considerações sobre as mesmas. Sistemas *simétricos* em relação a reversão temporal, com *spin total semi-inteiro* e sem apresentar invariância rotacional, possuem o operador Hamiltoniano representado por matrizes cujos elementos são *quatérnions*, isto é, elementos que podem ser escritos como

$$Q = q_0 - i\vec{q} \cdot \vec{\sigma}$$

sendo  $q_i$ , com  $i = 1, 2, 3, 4$ , números complexos e  $\sigma_i$ , com  $i = 1, 2, 3, 4$ , as matrizes de Pauli em conjunto com a matriz identidade. As transformações canônicas para estes sistemas são transformações pertencentes ao grupo *simplético*.

Por fim, consideremos sistemas que não possuem simetria em relação a reversão temporal. Neste caso a única coisa que podemos dizer a respeito da matriz hamiltoniana é que esta deve ser complexa e hermiteana, e que as transformações canônicas correspondem às matrizes pertencentes ao grupo *unitário*.

# Capítulo 4

## Os Ensembles Gaussianos

Baseado nas simetrias do espaço-tempo discutidas no capítulo 3, Eugene P. Wigner introduziu os Ensembles Gaussianos impondo a condição de estabilidade estatística às matrizes pertencentes a eles. “Estabilidade” neste caso significa simplesmente que se um elemento de matriz possui uma determinada distribuição, a distribuição conjunta de dois elementos de matriz pertence à mesma classe de distribuição, de forma que a distribuição conjunta de todos os elementos de matriz possuirá a mesma forma da distribuição de apenas um de seus elementos.

Uma distribuição que claramente satisfaz este critério de estabilidade é a distribuição gaussiana (ou normal), que devido ao fato de se manifestar em uma quantidade enorme de fenômenos que envolvem o acaso, por motivos históricos foi obviamente a primeira distribuição utilizada para se definir ensembles de matrizes.

Neste capítulo será discutido detalhadamente o Ensemble Gaussiano Ortogonal (EGO), a distribuição dos elementos de matriz, a distribuição conjunta de todos os elementos de matriz, ou seja, a distribuição das próprias matrizes, e a distribuição conjunta de seu autovalores.

Para isto, faremos uso de um *lema* que pode ser encontrado na Ref.[4], e que está intimamente ligado ao critério de estabilidade comentado acima.

Lema 1: Se três funções contínuas e diferenciáveis  $f_k$ , com  $k = 1, 2, 3$ , satisfazem a equação

$$f_1(xy) = f_2(x) + f_3(y), \tag{4.1}$$

então elas são necessariamente da forma  $a \ln(x) + b_k$ , com  $b_1 = b_2 + b_3$ .

Prova: Diferenciando (4.1) com respeito a  $x$ , temos

$$\frac{\partial f_1(xy)}{\partial x} = y f_1'(xy) = f_2'(x),$$

$$f_1'(xy) = \frac{1}{y} f_2'(x),$$

que integrando com respeito a  $y$  nos leva à seguinte equação:

$$\frac{1}{x} f_1(xy) = f_2'(x) \ln(y) + \frac{1}{x} g(x). \quad (4.2)$$

A função  $g(x)$  é arbitrária. Substituindo  $f_1(xy)$  de (4.2) em (4.1), temos:

$$x f_2'(x) \ln(y) + g(x) - f_2(x) = f_3(y). \quad (4.3)$$

Uma vez que o lado direito da equação é uma função apenas da variável  $y$ , concluímos que  $x f_2'(x) = a$  e que  $g(x) - f_2(x) = b_3$ . Isto equivale a dizer que

$$f_2'(x) = \frac{1}{x} a,$$

que por integração nos leva a

$$f_2(x) = a \ln(x) + b_2$$

e

$$g(x) = a \ln(x) + b_2 + b_3.$$

De (4.3) concluímos que:

$$f_3(y) = a \ln(y) + b_3.$$

Somando  $f_2(x)$  com  $f_3(y)$  obtemos

$$f_2(x) + f_3(y) = a \ln(xy) + (b_2 + b_3),$$

como queríamos demonstrar.

Fim da Prova

Considerando a discussão feita no capítulo anterior, sobre as simetrias dos sistemas quânticos em relação a reversão no sentido do tempo e à rotações, e



as implicações dessas simetrias sobre a estrutura do operador Hamiltoniano, agrupamos as matrizes hamiltonianas em três ensembles de matrizes:

1) *Ensemble Gaussiano Ortogonal* (EGO)

Constituido por sistemas cujo Hamiltoniano é representado por uma matriz *real e simétrica*, e as transformações canônicas por matrizes *ortogonais*.

2) *Ensemble Gaussiano Unitário* (EGU)

Constituido por sistemas cujo Hamiltoniano é representado por uma matriz *complexa e hermiteana*, e as transformações canônicas por matrizes *unitárias*.

3) *Ensemble Gaussiano Simplético* (EGS)

Constituido por sistemas cujo Hamiltoniano é representado por uma matriz onde os elementos são *quatérnions*, e as transformações canônicas por matrizes *simpléticas*.

## 4.1 O Ensemble Gaussiano Ortogonal (EGO)

Este ensemble contém o grupo de Hamiltonianos invariantes à inversão temporal e à transformações ortogonais. Da equação de Schrödinger

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

cuja solução, em termos dos autoestados  $\varphi_k$  do operador Hamiltoniano, é

$$\Psi(t) = \sum c_k \exp\left(-\frac{iE_k t}{\hbar}\right) \varphi_k,$$

vemos claramente que uma inversão temporal  $t \rightarrow -t$  está conectada à conjugação complexa, e leva  $\exp(-\frac{i}{\hbar}E_k t)$  em  $\exp(-\frac{i}{\hbar}E_k t)^*$ . Por esta razão, para que haja invariância quanto a inversão temporal, as matrizes que compõem o EGO pertencem ao subgrupo das matrizes hermiteanas formado pelo caso trivial de hermiticidade, ou seja, pelas matrizes reais simétricas.

Consideremos agora uma matriz ortogonal genérica

$$O = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

onde a condição de ortogonalidade  $OO^T = 1$  (ou seja  $O^T = O^{-1}$ ) pode ser facilmente verificada.

Consideremos também a transformação de um operador Hamiltoniano  $H'$ ,

$$H = O^{-1}H'O. \tag{4.4}$$

Se definirmos uma densidade de probabilidade para  $H'$ , dada por  $P(H')$ , e impusermos a condição de invariância na estatística dos autovalores perante uma transformação ortogonal, teremos que  $P(H')dH' = P(H)dH$ , e que a derivada de  $P(H)$  com relação a  $\theta$  deve ser nula.

Vamos começar definindo a densidade de probabilidade  $P(H')$ . Sendo  $H'$  uma matriz real simétrica, contendo  $N + \frac{1}{2}(N^2 - N) = \frac{N}{2}(N + 1)$  elementos independentes que, na teoria das matrizes aleatórias são tidos como elementos estatisticamente independentes, a métrica

$$ds^2 = \text{tr}(dH'dH'^+)$$

reduz-se a

$$ds^2 = \text{tr}(dH'^2)$$

que, por sua vez, pode ser escrito da seguinte forma:

$$ds^2 = \sum_{i=1}^N (dH'_{ii})^2 + 2 \sum_{i<j}^N (dH'_{ij})^2. \quad (4.5)$$

A métrica padrão para um espaço de variáveis  $x_1, x_2, \dots, x_M$ , em termos do tensor de métrica  $g_{\mu\nu}$ , é

$$ds^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^M (g_{\mu\nu} dx_\mu dx_\nu). \quad (4.6)$$

Se  $g_{\mu\nu}$  for diagonal, o espaço é dito ser *Euclidiano*, se não, é chamado de espaço de *Riemann*.

Comparando (4.6) com (4.5), vemos que neste caso  $M = \frac{N}{2}(N+1)$ , e que  $g_{\mu\nu}$  é diagonal, tendo os  $N$  primeiros termos de sua diagonal iguais a 1 e os  $\frac{N}{2}(N-1)$  termos restantes iguais a 2.

A medida induzida pela métrica (4.6) é

$$dV = (\det g)^{\frac{1}{2}} dx_1 dx_2 \dots dx_M,$$

o que nos permite concluir, de (4.5), que

$$dH' = 2^{\frac{N}{4}(N-1)} dH'_{11} dH'_{22} \dots dH'_{NN} dH'_{12} dH'_{13} \dots dH'_{(N-1)N}.$$

Podemos associar à matriz  $H'$  uma função distribuição

$$P(H') = P(H'_{11}, H'_{22}, \dots, H'_{NN}, H'_{12}, H'_{13}, \dots, H'_{(N-1)N}),$$

tal que a probabilidade diferencial  $dP$  de que a variável  $H'_{11}$  esteja entre  $H'_{11}$  e  $H'_{11} + dH'_{11}$ , de que a variável  $H'_{22}$  esteja entre os valores  $H'_{22}$  e  $H'_{22} + dH'_{22}$ , e assim por diante, seja

$$dP = P(H') dH',$$

$$dP = P(H'_{11}, H'_{22}, \dots, H'_{NN}, H'_{12}, H'_{13}, \dots, H'_{(N-1)N}) \times 2^{\frac{N}{4}(N-1)} dH'_{11} dH'_{22} \dots dH'_{(N-1)N}.$$

Uma vez definida a densidade de probabilidade  $P(H')$ , temos que impor a condição de derivada nula para  $P(H)$  (sendo  $H = O^T H' O$ ) com relação ao

ângulo  $\theta$  de rotação da base, para que a distribuição dos autovalores de  $H'$  seja invariante sob transformação ortogonal.

Para facilitar futuros cálculos, calculemos primeiramente a derivada:

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{\partial O^T}{\partial \theta} H' O + O^T H' \frac{\partial O}{\partial \theta}.$$

De (4.4) também é possível extrair as seguintes relações:

$$OH = H'O, \quad (4.7)$$

$$HO^T = O^T H'. \quad (4.8)$$

Portanto,

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{\partial O^T}{\partial \theta} OH + HO^T \frac{\partial O}{\partial \theta}. \quad (4.9)$$

Definindo

$$\frac{\partial O^T}{\partial \theta} O = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \equiv A, \quad (4.10)$$

temos que

$$O^T \frac{\partial O}{\partial \theta} = \left( \frac{\partial O^T}{\partial \theta} O \right)^T = A^T, \quad (4.11)$$

e podemos escrever (4.9) da seguinte forma:

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = AH + HA^T. \quad (4.12)$$

De acordo com (4.10), sabemos que quando  $A$  atua em  $H$  o resultado é uma terceira matriz onde a primeira linha corresponde à segunda linha de  $H$ , multiplicada por  $-1$ , a segunda linha corresponde à primeira linha de  $H$ , e os demais elementos são nulos:

$$AH = \begin{pmatrix} -H_{21} & -H_{22} & -H_{23} & \dots & -H_{2N} \\ H_{11} & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1N} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

A operação  $HA^T$  faz o mesmo, porém com as colunas de  $H$ :

$$HA^T = \begin{pmatrix} -H_{12} & H_{11} & 0 & \dots & 0 \\ -H_{22} & H_{21} & 0 & \dots & 0 \\ -H_{32} & H_{31} & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -H_{N2} & H_{N1} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Sendo assim, temos explicitamente que

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} -H_{12} - H_{21} & H_{11} - H_{22} & -H_{23} & \dots & -H_{2N} \\ H_{11} - H_{22} & H_{12} + H_{21} & H_{13} & \dots & H_{1N} \\ -H_{32} & H_{31} & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -H_{N2} & H_{N1} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Como no EGO os Hamiltonianos são matrizes *reais* e *simétricas*,  $H_{ij} = H_{ji}$ . Aplicando esta condição a (4.13), temos:

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} -2H_{12} & H_{11} - H_{22} & -H_{23} & \dots & -H_{2N} \\ H_{11} - H_{22} & 2H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1N} \\ -H_{23} & H_{13} & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -H_{2N} & H_{1N} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Invocando a condição de independência estatística entre os elementos de matriz, a conseqüente fatoração da densidade de probabilidade  $P(H)$  nos permite escrever

$$P(H) = \prod P_{ij}(H_{ij}), \quad (4.15)$$

onde  $P_{ij}(H_{ij})$  é a densidade de probabilidade de ocorrência do elemento  $H_{ij}$ . Agora estamos aptos a derivar  $P(H)$  com relação a  $\theta$  e impor a condição de invariância à transformação ortogonal:

$$\frac{dP(H)}{d\theta} = 0. \quad (4.16)$$

Convenientemente, com o propósito de simplificação matemática, analisemos a derivada do logaritmo de  $P(H)$ , que nos leva à expressão

$$\frac{1}{P(H)} \frac{dP(H)}{d\theta} = 0, \quad (4.17)$$

ao invés da expressão (4.16). A equação (4.17) pode ser reescrita como

$$\sum_{i \leq j} \frac{1}{P_{ij}(H_{ij})} \frac{\partial P_{ij}(H_{ij})}{\partial H_{ij}} \frac{\partial H_{ij}}{\partial \theta} = 0 \quad (4.18)$$

Para simplificar a notação, façamos  $P_{ij}(H_{ij}) \equiv P_{ij}$ . Ao escrevermos explicitamente os termos de (4.18) utilizando (4.14), obtemos

$$\begin{aligned} & \left[ \left( -\frac{1}{P_{11}} \frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} + \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}} \right) 2H_{12} + \frac{1}{P_{12}} \frac{\partial P_{12}}{\partial H_{12}} (H_{11} - H_{22}) \right] + \\ & + \sum_{j=3}^N \left( -\frac{1}{P_{1j}} \frac{\partial P_{1j}}{\partial H_{1j}} H_{2j} + \frac{1}{P_{2j}} \frac{\partial P_{2j}}{\partial H_{2j}} H_{1j} \right) = 0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Como a expressão que precede o somatório e os termos do somatório dependem de conjuntos de variáveis *independentes*, os próprios termos do somatório também dependem de variáveis independentes aos pares, e a expressão como um todo se anula, concluímos que os termos devem ser constantes. Por exemplo,

$$-\frac{1}{P_{1j}} \frac{\partial P_{1j}}{\partial H_{1j}} H_{2j} + \frac{1}{P_{2j}} \frac{\partial P_{2j}}{\partial H_{2j}} H_{1j} = C_j. \quad (4.20)$$

Dividindo a expressão (4.20) por  $H_{1j}H_{2j}$ , obtemos

$$-\frac{1}{H_{1j}P_{1j}}\frac{\partial P_{1j}}{\partial H_{1j}} + \frac{1}{H_{2j}P_{2j}}\frac{\partial P_{2j}}{\partial H_{2j}} = \frac{C_j}{H_{1j}H_{2j}} \equiv f_1(H_{1j}H_{2j}). \quad (4.21)$$

Definindo

$$f_2(H_{2j}) \equiv \frac{1}{H_{2j}P_{2j}}\frac{\partial P_{2j}}{\partial H_{2j}}, \quad (4.22)$$

$$f_3(H_{1j}) \equiv -\frac{1}{H_{1j}P_{1j}}\frac{\partial P_{1j}}{\partial H_{1j}}, \quad (4.23)$$

temos que

$$f_1(H_{1j}H_{2j}) = f_2(H_{2j}) + f_3(H_{1j})$$

não satisfaz o *Lema 1*, pois  $f_1(H_{1j}H_{2j}) = \frac{C_j}{H_{1j}H_{2j}} \neq a \ln(H_{1j}H_{2j}) + b_1$ , a não ser que  $C_j = 0$ , o que faz com que

$$\frac{1}{H_{1j}P_{1j}}\frac{\partial P_{1j}}{\partial H_{1j}} = \frac{1}{H_{2j}P_{2j}}\frac{\partial P_{2j}}{\partial H_{2j}} = b_2 \equiv -2\beta. \quad (4.24)$$

Por integração, temos que

$$P_{1j}(H_{1j}) = \exp(-\beta H_{1j}^2); j \geq 3, \quad (4.25)$$

e que

$$P_{2j}(H_{2j}) = \exp(-\beta H_{2j}^2); j \geq 3. \quad (4.26)$$

Voltemos nossa atenção agora para o primeiro termo da equação (4.19) :

$$\left(-\frac{1}{P_{11}}\frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} + \frac{1}{P_{22}}\frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}}\right) 2H_{12} + \frac{1}{P_{12}}\frac{\partial P_{12}}{\partial H_{12}}(H_{11} - H_{22}) = C. \quad (4.27)$$

Dividindo esta expressão por  $H_{12}(H_{11} - H_{22})$ , temos que

$$\frac{2}{H_{11} - H_{22}} \left(-\frac{1}{P_{11}}\frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} + \frac{1}{P_{22}}\frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}}\right) + \frac{1}{H_{12}P_{12}}\frac{\partial P_{12}}{\partial H_{12}} = \frac{C}{H_{12}(H_{11} - H_{22})}.$$

Novamente utilizando o *Lema 1*, concluímos que  $C = 0$  e que

$$\frac{1}{H_{12}P_{12}}\frac{\partial P_{12}}{\partial H_{12}} = \frac{2}{H_{11} - H_{22}} \left(\frac{1}{P_{11}}\frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} - \frac{1}{P_{22}}\frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}}\right) = -2\beta. \quad (4.28)$$

Por integração direta, concluímos que

$$P_{12}(H_{12}) = \exp(-\beta H_{12}^2). \quad (4.29)$$

Resta-nos, portanto, calcular a distribuição dos termos da diagonal. De (4.28) temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{P_{11}} \frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} - \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}} &= -\beta(H_{11} - H_{22}), \\ \frac{1}{P_{11}} \frac{\partial P_{11}}{\partial H_{11}} &= -\beta H_{11} + \beta H_{22} + \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}}, \\ \frac{1}{P_{11}} \partial P_{11} &= -\beta H_{11} \partial H_{11} + \left( \beta H_{22} + \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}} \right) \partial H_{11}, \\ \ln(P_{11}) &= -\frac{\beta}{2} H_{11}^2 + \beta H_{22} H_{11} + \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}} H_{11}. \end{aligned}$$

Dividindo a equação acima por  $H_{11}$ , obtemos

$$\frac{1}{H_{11}} \ln(P_{11}) + \frac{\beta}{2} H_{11} - \beta H_{22} = \frac{1}{P_{22}} \frac{\partial P_{22}}{\partial H_{22}}.$$

Integrando a expressão acima com respeito à variável  $H_{22}$ , temos

$$\frac{H_{22}}{H_{11}} \ln(P_{11}) + \frac{\beta}{2} H_{11} H_{22} - \frac{\beta}{2} H_{22}^2 = \ln(P_{22})$$

e dividindo esta expressão por  $H_{22}$ , obtemos

$$\frac{1}{H_{11}} \ln(P_{11}) + \frac{\beta}{2} H_{11} = \frac{1}{H_{22}} \ln(P_{22}) + \frac{\beta}{2} H_{22} = -C_2.$$

Vamos resolver a equação para  $P_{11}$ :

$$\ln(P_{11}) + \frac{\beta}{2} H_{11}^2 = -C_2 H_{11}$$

Definindo,

$$\begin{aligned} f_1(H_{11}) &\equiv -\frac{\beta}{2} H_{11}^2, \\ f_2(H_{11}) &\equiv \ln[P_{11}(H_{11})], \end{aligned}$$

e

$$f_3(H_{11}) \equiv C_2 H_{11},$$



temos que

$$f_1(H_{11}H_{11}) = f_2(H_{11}) + f_3(H_{11}). \quad (4.30)$$

Novamente comparando com a expressão (4.1) do *Lema 1*, vemos que a equação (4.30) corresponde à equação (4.1) no caso em que as duas variáveis são iguais ( $x = y$ ), porém vemos que (4.30) não satisfaz o *Lema 1*, e isto nos mostra que a constante  $C_2$  deve ser nula.

Portanto,

$$\begin{aligned} \ln(P_{11}) &= -\frac{\beta}{2}H_{11}^2, \\ \ln(P_{22}) &= -\frac{\beta}{2}H_{22}^2, \end{aligned}$$

e as respectivas densidades de probabilidade tornam-se

$$P_{11}(H_{11}) = \exp\left(-\frac{\beta}{2}H_{11}^2\right), \quad (4.31)$$

e

$$P_{22}(H_{22}) = \exp\left(-\frac{\beta}{2}H_{22}^2\right). \quad (4.32)$$

Existe uma arbitrariedade com relação à constante de separação de variáveis  $\beta$ , porém convencionou-se  $\beta = 1$  para o ensemble Gaussiano ortogonal. Isto se deve ao fato de que, tomando  $\beta = 1$  para o EGO, as expressões obtidas ficam generalizadas para os demais ensembles Gaussianos, da seguinte forma:  $\beta = 2$  para o ensemble Gaussiano unitário (EGU), e  $\beta = 4$  para o ensemble Gaussiano simplético (EGS). Isto pode ser melhor compreendido analisando o número de elementos independentes para as matrizes de cada um destes ensembles.

As matrizes reais e simétricas  $N \times N$ , pertencentes ao EGO, possuem  $N$  elementos diagonais, *reais*, somados aos  $N(N - 1)/2$  elementos independentes fora da diagonal, também *reais*. Portanto, o grau de liberdade destas matrizes é dado por

$$f(1) = N + \frac{N}{2}(N - 1) = \frac{N}{2}(N + 1). \quad (4.33)$$

Já as matrizes complexas hermiteanas  $N \times N$ , pertencentes ao EGU, possuem  $N$  elementos *reais* na diagonal, somados aos  $N(N - 1)/2$  elementos independentes *complexos* fora da diagonal. Como um número complexo é

caracterizado por dois números (parte real e parte imaginária), o grau de liberdade destas matrizes é

$$f(2) = N + 2\frac{N}{2}(N - 1) = N^2. \quad (4.34)$$

Para as matrizes de quatérnions  $N \times N$ , pertencentes ao EGS, existem  $N$  elementos reais na diagonal e  $N(N - 1)/2$  elementos independentes *quatérnions* fora da diagonal. O quatérnion é caracterizado por quatro números, de modo que o grau de liberdade destas matrizes é

$$f(4) = N + 4\frac{N}{2}(N - 1) = 2N^2 - N. \quad (4.35)$$

A notação  $f(1)$ ,  $f(2)$  e  $f(4)$  deve-se à seguinte expressão para o grau de liberdade das matrizes pertencentes a estes ensembles:

$$f(\beta) = N + \beta\frac{N}{2}(N - 1), \quad (4.36)$$

com  $\beta = 1, 2$  ou  $4$  para os ensembles EGO, EGU e EGS, respectivamente.

## 4.2 A densidade de probabilidade de uma matriz pertencente ao EGO e a distribuição conjunta de seus autovalores

Começamos fazendo uma simples análise do traço de uma matriz  $3 \times 3$  elevada ao quadrado. Seja  $M$  uma matriz  $3 \times 3$ , real e simétrica, dada por

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}.$$

Então, temos que

$$M^2 = \begin{pmatrix} m_{11}^2 + m_{12}^2 + m_{31}^2 & \dots & \dots \\ \dots & m_{12}^2 + m_{22}^2 + m_{32}^2 & \dots \\ \dots & \dots & m_{31}^2 + m_{32}^2 + m_{33}^2 \end{pmatrix},$$

onde apenas os termos da diagonal de  $M^2$  foram calculados devido ao fato de que o traço de uma matriz é a soma dos elementos de sua diagonal.

Portanto, o traço de  $M^2$  é

$$\text{tr}(M^2) = m_{11}^2 + m_{22}^2 + m_{33}^2 + 2m_{12}^2 + 2m_{13}^2 + 2m_{23}^2 = \sum_{i,j=1}^3 (m_{ij}^2).$$

Este exemplo foi tomado apenas para explicitar o fato de que o traço de qualquer matriz real e simétrica elevada ao quadrado é igual a soma do quadrado de todos os elementos da matriz.

Utilizando esta propriedade e combinando a expressão (4.15) com as probabilidades obtidas para os elementos das matrizes pertencentes ao EGO ( $\beta = 1$ ), podemos deduzir uma expressão para a densidade de uma matriz pertencente ao ensemble ortogonal:

$$\begin{aligned} P(H) &= \prod_{ij} P_{ij}(H_{ij}), \\ P(H) &= \prod_i \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}H_{ii}^2\right) \prod_{i<j} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \exp(-H_{ij}^2), \\ P(H) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N H_{ii}^2\right) \left(\frac{1}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp\left(-\sum_{i<j} H_{ij}^2\right), \\ P(H) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\text{tr} H^2\right). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Os fatores  $(2\pi)^{-1/2}$  e  $\pi^{-1/2}$  correspondem às normalizações das densidades de probabilidade dos elementos da diagonal e de fora da diagonal, respectivamente.

Lembrando que uma matriz  $N \times N$ , real e simétrica, possui  $f(1) = N(N+1)/2$  elementos independentes (ver eq.(4.36)), para obtermos a distribuição conjunta dos autovalores a partir da relação (4.37), precisamos descrever os elementos de matriz em termos dos seus  $N$  autovalores e de  $l = N(N-1)/2$  parâmetros adicionais necessários para conservar o grau de liberdade da matriz.

Sendo  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_N$  o conjunto dos autovalores de  $H$ , e  $p_1, p_2, p_3, \dots, p_l$  o conjunto dos  $N(N-1)/2$  parâmetros adicionais, temos as seguintes relações:

$$\text{tr}H^2 = \sum_{j=1}^N \theta_j^2, \quad (4.38)$$

e

$$P(\theta_1, \dots, \theta_N, p_1, \dots, p_l) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{N(N-1)}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \theta_j^2\right) J(\theta, p). \quad (4.39)$$

Na relação acima,  $J(\theta, p)$  denota o determinante Jacobiano da transformação ortogonal sobre a base do sistema que nos forneceu o novo conjunto de variáveis  $\{\theta_j, p_\mu\}$ . A relação (4.38) deve-se ao fato de que o traço de uma matriz não se altera perante rotações na base, ou seja, perante uma transformação ortogonal. Em particular, tomamos a transformação ortogonal que diagonaliza  $H$ .

Se integrarmos a relação (4.39) sobre todo o conjunto de parâmetros  $p_1, p_2, p_3, \dots, p_l$ , obtemos a distribuição conjunta dos autovalores.

Em geral, o Jacobiano presente em (4.39) pode ser escrito como o produto de uma função  $f$  que depende apenas dos autovalores  $\theta_j$  com uma função  $g$  que depende apenas dos parâmetros  $p_\mu$ :

$$J(\theta, p) = f(\theta_1, \dots, \theta_N) g(p_1, \dots, p_l). \quad (4.40)$$

Sendo assim, a relação (4.39) nos leva a uma expressão para a distribuição conjunta dos autovalores da forma

$$P(\theta_1, \dots, \theta_N) = C' \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{N(N-1)}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \theta_j^2\right) f(\theta_1, \dots, \theta_N), \quad (4.41)$$

pois a integral sobre os parâmetros  $p_1, \dots, p_l$  contribui apenas com uma constante, denotada por  $C'$ . Portanto, nosso problema resume-se a calcular o Jacobiano de (4.39). Num procedimento parecido com o desenvolvido na seção anterior, nosso ponto de partida é a relação

$$H = O\Theta O^{-1} = O\Theta O^T, \quad (4.42)$$

sendo  $\Theta$  a matriz diagonal dos autovalores de  $H$ , e  $O$  a matriz ortogonal que diagonaliza  $H$ .

Como  $H$  será escrita em termos dos autovalores  $\theta_j$  e dos parâmetros  $p_\mu$ , a relação (4.42) nos faz concluir que a dependência nos  $p_\mu$  está nas matrizes  $O$  e  $O^T$ . Como

$$OO^T = O^T O = 1,$$

temos que

$$O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu} + \frac{\partial O^T}{\partial p_\mu} O = 0. \quad (4.43)$$

Para o cálculo do Jacobiano, precisamos calcular  $\frac{\partial H}{\partial p_\mu}$ , o que pode ser feito a partir da relação (4.42) da seguinte forma:

$$\frac{\partial H}{\partial p_\mu} = \frac{\partial O}{\partial p_\mu} \Theta O^T + O \Theta \frac{\partial O^T}{\partial p_\mu}.$$

Multiplicando esta relação por  $O^T$  pela esquerda, e por  $O$  pela direita, obtemos

$$O^T \frac{\partial H}{\partial p_\mu} O = O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu} \Theta + \Theta \frac{\partial O^T}{\partial p_\mu} O. \quad (4.44)$$

Através de (4.43), vemos que esta expressão é equivalente à

$$O^T \frac{\partial H}{\partial p_\mu} O = O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu} \Theta - \Theta O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu}, \quad (4.45)$$

e em termos dos componentes das matrizes, temos:

$$\left[ \sum_{j,k} \frac{\partial H_{jk}}{\partial p_\mu} O_{j\alpha} O_{k\beta} \right]_{\alpha\beta} = \left[ O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu} \right]_{\alpha\beta} (\theta_\beta - \theta_\alpha). \quad (4.46)$$

Novamente de maneira semelhante ao que foi feito na seção anterior, devemos diferenciar a relação (4.42) com relação ao autovalor  $\theta_\gamma$ , o que nos leva à

$$\left[ \sum_{j,k} \frac{\partial H_{jk}}{\partial \theta_\gamma} O_{j\alpha} O_{k\beta} \right]_{\alpha\beta} = \frac{\partial O_{\alpha\beta}}{\partial \theta_\gamma} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma}. \quad (4.47)$$

A matriz jacobiana usualmente é representada por

$$[J(\theta, p)] = \begin{bmatrix} \frac{\partial H_{jj}}{\partial \theta_\gamma} & \frac{\partial H_{jk}}{\partial \theta_\gamma} \\ \frac{\partial H_{jj}}{\partial p_\mu} & \frac{\partial H_{jk}}{\partial p_\mu} \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

onde a primeira coluna representa  $N$  colunas e a segunda coluna representa  $N(N-1)/2$  colunas ( $1 \leq j < k \leq N$ ). A primeira linha representa  $N$  linhas e a segunda  $N(N-1)/2$  linhas.

Se tomarmos a matriz

$$[V] = \begin{bmatrix} (O_{j\alpha}O_{k\beta}) \\ (2O_{j\alpha}O_{k\beta}) \end{bmatrix}, \quad (4.49)$$

onde a primeira linha representa  $N$  linhas e a segunda  $N(N-1)/2$  linhas, e a coluna representa  $N(N+1)/2$  colunas, através de (4.46) e (4.47), temos que o produto  $[J][V]$  é dado por

$$[J][V] = \begin{bmatrix} \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\gamma} \\ [O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu}] (\theta_\beta - \theta_\alpha) \end{bmatrix}, \quad (4.50)$$

onde a primeira linha corresponde a  $N$  linhas e a segunda a  $N(N-1)/2$  linhas. A coluna representa  $N(N+1)/2$  colunas ( $1 \leq \alpha \leq \beta \leq N$ ).

Tomando o determinante de (4.50), obtemos

$$J(\theta, p) = \prod_{\alpha < \beta} |\theta_\beta - \theta_\alpha| \det \begin{bmatrix} \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\gamma} \\ [O^T \frac{\partial O}{\partial p_\mu}] \end{bmatrix},$$

ou utilizando a notação de (4.40),

$$J(\theta, p) = \prod_{\alpha < \beta} |\theta_\beta - \theta_\alpha| g(p_1, \dots, p_l), \quad (4.51)$$

onde  $g$  é função apenas dos parâmetros  $p_1, \dots, p_l$ . Identificamos

$$f(\theta_1, \dots, \theta_N) = \prod_{\alpha < \beta} |\theta_\beta - \theta_\alpha|, \quad (4.52)$$

que substituindo na relação (4.41), já integrando sobre os parâmetros  $p_\mu$ , nos leva à distribuição conjunta dos autovalores  $\theta_j$  de uma matriz aleatória real e simétrica:

$$P(\theta_1, \dots, \theta_N) = C_N \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \theta_j^2 \right) \prod_{\alpha < \beta} |\theta_\beta - \theta_\alpha|. \quad (4.53)$$

onde  $C_N$  é dado por

$$C_N = C' \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{N}{2}} \left( \frac{1}{\pi} \right)^{\frac{N(N-1)}{2}}.$$

Uma vez demonstrada a distribuição dos elementos de matriz do EGO e a distribuição das próprias matrizes, podemos reunir os conceitos utilizados até agora, bem como as conclusões às quais chegamos, para definir de maneira precisa o Ensemble Gaussiano Ortogonal.

*Def: Ensemble Gaussiano Ortogonal*

*Este ensemble é constituído por matrizes hamiltonianas invariantes à inversão temporal, ou seja, por matrizes reais simétricas, cujos elementos são estatisticamente independentes e obedecem à leis de distribuição gaussianas, sendo os  $N$  elementos da diagonal de uma matriz  $N \times N$  distribuídos de acordo com*

$$P(H_{ii}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}H_{ii}^2}, \quad (4.54)$$

*e os demais  $\frac{1}{2}N(N-1)$  elementos independentes, distribuídos de acordo com*

$$P(H_{ij}) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} e^{-H_{ij}^2}; \quad i < j. \quad (4.55)$$

*A densidade de probabilidade  $P(H) = \prod_{i \leq j} P_{ij}(H_{ij})$  é, neste ensemble, invariante às rotações da base, ou seja, sendo  $O$  uma matriz ortogonal e  $H$  tal que*

$$H = O^{-1}H'O,$$

*vale a relação:*

$$P(H)dH = P(H')dH'.$$

*Explicitamente, temos*

$$P(H) = 2^{-N/2} \pi^{-N(N+1)/2} e^{-\frac{1}{2}\text{tr}H^2}. \quad (4.56)$$

Nesta definição, tomou-se  $\beta = 1$  pois a constante  $\beta$  originou-se num processo de separação de variáveis, sendo, portanto, completamente arbitrária. Mais adiante, na primeira seção do capítulo seguinte, veremos a vantagem de tomarmos  $\beta = 1$  para o ensemble ortogonal.

A Ref.[4] discute detalhadamente os ensembles Gaussianos simplético (EGS) e unitário (EGU). As expressões gerais da densidade de probabilidade conjunta dos autovalores e das matrizes pertencentes aos ensembles Gaussianos são, respectivamente

$$P(\theta_1, \dots, \theta_N) = C_N \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^N \theta_j^2\right) \prod_{i < j} |\theta_j - \theta_i|^\beta, \quad (4.57)$$

e

$$P(H) = C_N e^{-\frac{\beta}{2} \text{tr} H^2}, \quad (4.58)$$

sendo  $\beta = 1, 2$  ou  $4$  para os ensembles Gaussianos ortogonal, unitário e simplético, respectivamente.

Como o traço de uma matriz é invariante sobre transformações unitárias (ortogonais), a expressão (4.57) é obtida de (4.58) através da transformação dos elementos de matriz  $\{H_{ij}\}$  para os autovalores da matriz  $\{\theta_j\}$ , sendo que o traço de  $H^2$  é descrito em termos da base que diagonaliza  $H$ , permanecendo inalterado pela transformação, e o termo  $\prod_{i < j} |\theta_j - \theta_i|^\beta$  provém do determinante Jacobiano.

Como veremos a seguir, estas duas últimas expressões possibilitam uma abordagem análoga à mecânica estatística para a análise de espectros, idéia atribuída a Wigner e introduzida em 1961 por F. J. Dyson na Ref.[10].



# Capítulo 5

## Termodinâmica de espectros

Podemos dizer que a maior parte dos pesquisadores em física atualmente lidam quase que diariamente com algum problema envolvendo espectros, sejam eles atômicos, nucleares, acústicos, de ressonância, etc...

A análise de espectros se tornou fundamental para o desenvolvimento científico desde o final do século IXX até os dias de hoje. Esta necessidade acabou por criar diversos métodos de análise de espectros, e pretendo desenvolver e discutir alguns aspectos teóricos sobre um dos métodos de análise que vem sendo, cada vez mais, chamado de *termodinâmica de espectros*.

A idéia por trás deste método consiste em criar grandezas que caracterizem um dado espectro, análogas às grandezas termodinâmicas (ver Ref.[10]). Caracterizar um espectro de forma análoga à termodinâmica significa desenvolver um formalismo que nos leve à grandezas mensuráveis e que forneça informações sobre o comportamento do espectro, matematicamente e operacionalmente análogo ao formalismo termodinâmico, reinterpretando o sentido das grandezas termodinâmicas dentro do novo formalismo.

Historicamente, Dyson e Mehta desenvolveram esta termodinâmica e aplicaram-na ao estudo de ressonâncias nucleares, porém o resultado foi inconclusivo devido à baixa qualidade dos dados experimentais da época. Recentemente este problema foi abordado através de simulações numéricas para os espectros GOE e Poisson [13], em particular como as grandezas termodinâmicas são afetadas pelo tamanho do espectro e por perda de níveis ou presença de níveis espúrios.

Podemos começar nosso desenvolvimento encontrando um problema termodinâmico que nos leve à uma distribuição matematicamente idêntica à distribuição dada por (4.53). Esta foi a idéia que Wigner teve ao perceber

que o problema termodinâmico da distribuição espacial de cargas iguais sob um potencial quadrático atrativo em uma dimensão possuía exatamente a mesma solução que o problema da distribuição dos autovalores de matrizes reais e simétricas, e coube a Freeman Dyson desenvolvê-la.

Historicamente, como foi mencionado acima, o primeiro potencial confinador utilizado para a analogia com o gás de Coulomb unidimensional, foi o potencial quadrático. De fato, se considerarmos um sistema de cargas em equilíbrio termodinâmico, sujeitas a um potencial externo atrativo dado por

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2,$$

e que interagem repulsivamente duas a duas de acordo com

$$V(x, y) = -\ln|x - y|,$$

sendo  $x$  e  $y$  as respectivas posições das cargas, a energia do sistema em termos das posições de equilíbrio  $x_1, x_2, \dots, x_N$  de  $N$  partículas é

$$W = \frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{i < j} \ln|x_i - x_j|. \quad (5.1)$$

A função de partição  $Z_N(\beta)$  do sistema é então dada por

$$Z_N(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta W} dx_1 \dots dx_N, \quad (5.2)$$

e através desta função podemos obter as grandezas termodinâmicas para o espectro, tais como energia média, calor específico, energia livre, etc. A densidade de probabilidade para as posições de equilíbrio das  $N$  partículas é

$$P(x_1, \dots, x_N) = \frac{e^{-\beta W}}{Z_N}. \quad (5.3)$$

Substituindo a expressão explícita da energia (equação (5.1)) na expressão (5.3), encontramos:

$$P(x_1, \dots, x_N) = Z_N^{-1} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_i x_i^2\right) \prod_{i < j} |x_i - x_j|^\beta. \quad (5.4)$$

Se compararmos esta expressão com a distribuição dos autovalores de uma matriz aleatória real e simétrica, equação (4.53), vemos que as expressões

são idênticas para o caso em que  $\beta = 1$  (isto explica a conveniente escolha da constante de separação de variáveis, coincidentemente chamada de  $\beta$  na equação (4.24), igual a 1), e a constante  $C_N$  deve ser igual a  $Z_N^{-1}(1)$ .

Esta analogia com sistemas termodinâmicos nos permite definir vários ensembles distintos através de escolhas diferentes para  $W$ , ou mais especificamente, para  $V(x)$ , onde uma “termodinâmica de espectros” baseada na função de partição determinada por (5.2) nos fornece as grandezas termodinâmicas de um sistema onde as posições de equilíbrio  $\{x_i\}$  das partículas são tomadas como sendo os próprios níveis do espectro.

O problema mais geral é então considerar a distribuição

$$P(H) = C_N e^{-\beta \text{tr}[V(H)]}, \quad (5.5)$$

para uma matriz aleatória  $H$ . Como o traço é uma operação invariante por transformações unitárias (rotações na base de  $H$ ), podemos gerar vários ensembles considerando diferentes potenciais atrativos  $V(x)$ . Ao realizarmos a transformação que leva os elementos de matriz  $H_{ij}$  nos autovalores de  $H$ , teremos que

$$\text{tr}[V(H)] = \sum_{i=1}^N V(x_i),$$

onde  $\{x_i\}$  são os autovalores de  $H$ .

O termo de interação logarítmica entre as cargas provém do Jacobiano da transformação, preservando sempre a mesma forma para o potencial repulsivo de interação mútua. Portanto, considerando o caso em que

$$V(x) = sx^2, \quad (5.6)$$

e substituindo em (5.5), teremos

$$P(H) = C_N e^{-\beta s \text{tr}H^2}, \quad (5.7)$$

retomando a situação encontrada anteriormente na expressão (4.58) para os ensembles Gaussianos, quando  $s = 1/2$ . A constante  $s$  vem a ser, quando pensamos no conjunto  $\{x_i\}$  como sendo a posição de equilíbrio das cargas do gás de Coulomb unidimensional, sujeito ao potencial atrativo  $V(x)$ , um fator de escala para as distâncias entre as cargas. Se pensarmos no conjunto  $\{x_i\}$  como sendo autovalores de um dado Hamiltoniano quântico, a constante  $s$  equivale a um fator de escala na energia, se pensarmos em frequências de

ressonância,  $s$  é um fator de escala nas frequências medidas, e assim por diante.

Mais adiante, veremos algumas vantagens em trabalhar com uma escala específica, ou seja, em escolher um valor apropriado para  $s$ , todavia a escolha  $s = 1/2$  possui um valor histórico pois foi a primeira a ser adotada para o potencial quadrático.

Também trataremos de outras escolhas para o potencial de confinamento  $V(x)$ .

## 5.1 Alguns Ensembles Relacionados aos Polinômios Ortogonais

A expressão (5.2) pode determinar uma termodinâmica, em princípio específica, para cada tipo particular de função  $W$ . No caso do espectro de matrizes aleatórias pertencentes aos ensembles Gaussianos, como vimos anteriormente, a função  $W$  é dada pela equação (5.1), porém outros ensembles podem ser criados utilizando formas diferentes para a energia  $W$ .

Como vimos anteriormente, o caso dos ensembles Gaussianos estão relacionados com um potencial de confinamento quadrático, e através de (5.5) e (5.6), temos que

$$Z_N(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \exp(-\beta s x_i^2) \prod_{i<j} |x_i - x_j|^\beta dx_1 \dots dx_N. \quad (5.8)$$

O método apresentado na Ref.[4] para calcular (5.8) consiste em primeiramente considerar apenas valores inteiros, pares e positivos de  $\beta$ , e escrever o produto  $\prod_{i>j} |x_i - x_j|^\beta$  explicitamente como um polinômio de grau  $\beta N(N-1)/2$  e homogêneo em  $x_1, \dots, x_N$ , ou seja,

$$\prod_{i>j} |x_i - x_j|^\beta = \sum_{\{j\}} C_{j_1 \dots j_N} x_1^{j_1} x_2^{j_2} \dots x_N^{j_N}, \quad (5.9)$$

onde  $j_1 + j_2 + \dots + j_N = \beta N(N-1)/2$ . Substituindo em (5.8) obtemos

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{j\}} C_{j_1 \dots j_N} \prod_{m=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} x_m^{j_m} \omega^\beta(x_m) dx_m, \quad (5.10)$$

onde  $\omega(x) = \exp(-sx^2)$ . As integrais correspondem aos momentos dos polinômios de Hermite ortogonais segundo a função pêsso  $\omega^\beta(x)$ . A referência [4] também traz a extensão da validade deste método para qualquer valor complexo de  $\beta$  com  $Re\beta \geq 0$ .

Nesta seção discutiremos a termodiâmica dos ensembles referentes às funções pêsso de vários outros polinômios ortogonais.

As integrais de (5.2) foram inicialmente resolvidas por *Selberg*, através da expressão (5.10), para o caso em que

$$V(y) = -\ln [y_j^\alpha (1 - y_j)^\eta],$$

ou seja,

$$e^{-\beta W} = \prod_{j=1}^N y_j^{\beta\alpha} (1 - y_j)^{\beta\eta} \prod_{j<l} |y_j - y_l|^\beta,$$

sendo mais tarde conhecidas como *integral de Selberg*, e dadas por [4]:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \dots \int_0^1 \prod_{j=1}^N y_j^{\beta\alpha} (1 - y_j)^{\beta\eta} \prod_{j<l} |y_j - y_l|^\beta dy_1 \dots dy_N \\ &= \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2} + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\alpha + 1 + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\eta + 1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2})\Gamma[\beta\alpha + \beta\eta + 2 + (N + j - 1)\frac{\beta}{2}]}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$y_i = \frac{1 - x_i}{2},$$

obtemos a seguinte forma da integral de Selberg:

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 \prod_{j=1}^N (1 - x_j)^{\beta\alpha} (1 + x_j)^{\beta\eta} \prod_{j<l} |x_j - x_l|^\beta dx_1 \dots dx_N = \\ &= 2^{\frac{\beta}{2}N(N-1) + N\beta(\alpha+\eta) + N} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2} + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\alpha + 1 + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\eta + 1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2})\Gamma[\beta\alpha + \beta\eta + 2 + \frac{\beta}{2}(N + j - 1)]}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Deste caso derivaremos vários outros, inclusive o próprio caso dos polinômios de Hermite que, como sabemos, estão relacionados com os ensembles Gaussianos de matrizes aleatórias. Portanto, utilizaremos uma notação mais geral

para a função de partição, dada por

$$Z_N(\beta) = \int_a^b \dots \int_a^b \prod_{j=1}^N \omega^\beta(x_j) \prod_{j<l} |x_j - x_l|^\beta dx_1 \dots dx_N. \quad (5.13)$$

Desta forma vemos que a função  $\omega(x)$  de (5.12) é a função peso dos polinômios de Jacobi  $P_N^{(\alpha,\eta)}(x)$ , dada por

$$\omega(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\eta,$$

e o intervalo de integração  $[a, b]$  neste caso é  $[-1, 1]$ , uma vez que a ortogonalidade dos polinômios de Jacobi é definida por [9]

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\eta P_N^{(\alpha,\eta)} P_M^{(\alpha,\eta)} dx = 0, \quad (5.14)$$

para  $M \neq N$ .

Por isso, trataremos este caso como *Ensemble de Jacobi*, e os outros casos derivados deste serão tratados pelo nome dos polinômios definidos pelo intervalo  $[a, b]$  em conjunto com a função  $\omega(x)$  em questão.

A seguir, será feito um estudo aprofundado da termodinâmica de espectro para o caso de Jacobi. Neste estudo, partiremos da função de partição e obteremos as grandezas características do espectro, tais como *energia interna*, *calor específico* e *energia livre*. Veremos também, que existe uma universalidade termodinâmica para os casos dados pelos polinômios clássicos, obtidos a partir do caso de Jacobi [14].

## 5.2 Grandezas Termodinâmicas

### 5.2.1 Ensemble de Jacobi: $V(x) = -\ln[(1-x)^\alpha (1+x)^\eta]$

Como vemos na equação (5.12), a função de partição para o caso de Jacobi é dada por

$$Z_N(\beta) = 2^{\frac{\beta}{2}N(N-1) + N\beta(\alpha+\eta) + N} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2} + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\alpha + 1 + j\frac{\beta}{2})\Gamma(\beta\eta + 1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2})\Gamma[\beta\alpha + \beta\eta + 2 + \frac{\beta}{2}(N + j - 1)]}, \quad (5.15)$$

e a energia neste caso é

$$W = - \sum_{j=1}^N \ln[(1-x_j)^\alpha(1+x_j)^\eta] - \sum_{j<l} \ln|x_j-x_l|. \quad (5.16)$$

Para obtermos resultados gerais capazes de serem comparados uns com os outros, devemos trabalhar com grandezas intensivas independentes do número  $N$  de níveis do espectro. Portanto, trabalharemos com grandezas como a energia média por nível (análoga à energia média por partícula num sistema termodinâmico), dada por

$$U = \frac{\langle W \rangle - W_0}{N}, \quad (5.17)$$

de forma que  $U$  não dependa do número de níveis do espectro.  $\langle W \rangle$  é a energia média derivada de (5.15) e  $W_0$  é o seu valor mínimo, de forma que  $U = 0$  quando  $T = 0$ .

Existem dois métodos para determinar o mínimo  $W_0$ . Podemos utilizar um argumento termodinâmico sobre a monotonicidade da função  $\langle W \rangle$ , que deve ser decrescente, e tomar o limite  $\beta \rightarrow \infty$  para encontrar seu mínimo, o que é equivalente a analisar o limite  $\beta \gg 1$  diretamente sobre a função de partição (5.15), a fim de obter  $Z_0 = C_N^{-1} \exp(-\beta W_0)$ , onde  $C_N$  é uma constante independente de  $\beta$ ; ou podemos encontrar um conjunto  $\{x_i\}$  que minimize a função  $W$  de (5.16). Desenvolveremos o último método, pois historicamente foi o primeiro a ser utilizado para minimizar a função  $W$  do caso de Hermite, além de mostrar de forma bem explícita a relação entre o ensemble e os polinômios ortogonais.

Faremos detalhadamente todo o desenvolvimento para o caso de Jacobi, e estenderemos as conclusões para todos os casos dele derivados. Como veremos a seguir, o valor mínimo de  $W$  dado por (5.16) está relacionado com os zeros de polinômios de Jacobi, existindo portanto uma relação muito íntima entre a energia interna dos ensembles definidos por (5.13) e os respectivos polinômios ortogonais associados à  $\omega(x)$ .

Seja  $\xi_1, \dots, \xi_N$  o conjunto de valores que minimiza o potencial (5.16), tal que

$$\frac{\partial W}{\partial \xi_j} = \frac{\alpha(1-\xi_j)^{\alpha-1}(1+\xi_j)^\eta - \eta(1-\xi_j)^\alpha(1+\xi_j)^{\eta-1}}{(1-\xi_j)^\alpha(1+\xi_j)^\eta} - \sum_{l(\neq j)} \frac{1}{\xi_j - \xi_l} = 0 \quad (5.18)$$

Consideremos um polinômio  $\rho(x)$  de ordem  $N$  cujas raízes coincidem com os elementos  $\xi_1, \dots, \xi_N$ , e que portanto pode ser escrito da seguinte forma:

$$\rho(x) = (x - \xi_1)(x - \xi_2)(x - \xi_3)\dots(x - \xi_N). \quad (5.19)$$

Derivando o logaritmo deste polinômio, temos

$$\frac{d}{dx} \ln[\rho(x)] = \sum_{l=1}^N \frac{1}{x - \xi_l} = \sum_{l(\neq j)} \frac{1}{x - \xi_l} + \frac{1}{x - \xi_j}, \quad (5.20)$$

com  $j$  fixo e pertencente ao intervalo  $(1, 2, 3, \dots, N)$ .

De (5.20), temos:

$$\sum_{l(\neq j)} \frac{1}{x - \xi_l} = \frac{(x - \xi_j)\rho'(x) - \rho(x)}{(x - \xi_j)\rho(x)}.$$

Tomando o limite de  $x \rightarrow \xi_j$ , temos:

$$\sum_{l(\neq j)} \frac{1}{\xi_j - \xi_l} = \frac{\rho''(\xi_j)}{2\rho'(\xi_j)}. \quad (5.21)$$

Substituindo (5.21) em (5.18) obtemos

$$\rho''(\xi_j) - \left[ \frac{\alpha(1 - \xi_j)^{\alpha-1}(1 + \xi_j)^\eta - \eta(1 - \xi_j)^\alpha(1 + \xi_j)^{\eta-1}}{(1 - \xi_j)^\alpha(1 + \xi_j)^\eta} \right] 2\rho'(\xi_j) = 0,$$

$$(1 - \xi_j^2)\rho''(\xi_j) - [\alpha(1 + \xi_j) - \eta(1 - \xi_j)] 2\rho'(\xi_j) = 0. \quad (5.22)$$

Da equação (5.22) podemos ver que a expressão à esquerda da igualdade deve ser proporcional ao polinômio  $\rho(x)$ , uma vez que possui os mesmos zeros. Isto nos permite escrever a seguinte expressão:

$$(1 - x^2)\rho''(x) - [\alpha - \eta + (\alpha + \eta)x] 2\rho'(x) - C\rho(x) = 0, \quad (5.23)$$

onde  $C$  é apenas uma constante de proporcionalidade arbitrária.

Fazendo a mudança

$$\alpha = \frac{\alpha' + 1}{2},$$

$$\eta = \frac{\eta' + 1}{2},$$



a equação (5.23) torna-se

$$(1 - x^2)\rho''(x) - [\alpha' - \eta' + (\alpha' + \eta' + 2)x]\rho'(x) - C\rho(x) = 0, \quad (5.24)$$

de onde, olhando para o coeficiente de  $x^N$ , obtemos

$$C = -N(N + \alpha' + \eta' + 1).$$

Somos então levados à equação de Jacobi [9], dada por

$$(1 - x^2)\rho''(x) - [\alpha' - \eta' + (\alpha' + \eta' + 2)x]\rho'(x) + N(N + \alpha' + \eta' + 1)\rho(x) = 0, \quad (5.25)$$

cujas soluções são os polinômios de Jacobi expressos por  $P_N^{(\alpha', \eta')}(x)$ .

O conjunto  $\xi_1, \dots, \xi_N$  de valores que minimizam o potencial (5.16) é, portanto, formado pelas raízes dos seguintes polinômios de Jacobi:

$$P_N^{(\alpha', \eta')}(x) = P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)}(x) \quad (5.26)$$

Com isto estamos aptos a calcular o valor mínimo da energia dada por (5.16). Este valor é atingido quando o espectro  $x_1, \dots, x_N$  coincide com os zeros dos polinômios de Jacobi dados por (5.26), ou seja,

$$W_0 = -\sum_{j=1}^N \ln[(1 - \xi_j)^\alpha (1 + \xi_j)^\eta] - \sum_{j < l} \ln |\xi_j - \xi_l|, \quad (5.27)$$

que também pode ser escrito como

$$W_0 = -\alpha \ln \left[ \prod_{j=1}^N (1 - \xi_j) \right] - \eta \ln \left[ \prod_{j=1}^N (1 + \xi_j) \right] - \sum_{j < l} \ln |\xi_j - \xi_l|. \quad (5.28)$$

Como (ver Ref.[9])

$$P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)}(x) = \frac{1}{2^N} \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \prod_{j=1}^N (x - \xi_j) \quad (5.29)$$

onde  $\alpha > 0$  e  $\eta > 0$ , temos

$$\prod_{j=1}^N (1 - \xi_j) = P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)}(1) 2^N \left[ \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \right]^{-1}, \quad (5.30)$$

e

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^N (1 + \xi_j) &= (-1)^N \prod_{j=1}^N (-1 - \xi_j) \\ &= (-1)^N P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)} (-1) 2^N \left[ \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

Como (ver [9], pág. 775)

$$P_N^{(\alpha, \eta)}(-x) = (-1)^N P_N^{(\eta, \alpha)}(x),$$

e

$$P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)}(1) = \binom{N + 2\alpha + 2\eta - 1}{N}$$

de (5.30) temos,

$$\prod_{j=1}^N (1 - \xi_j) = 2^N \binom{N + 2\alpha - 1}{N} \left[ \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \right]^{-1}, \quad (5.32)$$

e de (5.31), temos

$$\prod_{j=1}^N (1 + \xi_j) = 2^N \binom{N + 2\eta - 1}{N} \left[ \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \right]^{-1}. \quad (5.33)$$

Da definição de discriminante (Ref. [7])  $D_N$  temos a seguinte expressão:

$$\sum_{j < l} \ln |\xi_j - \xi_l| = \frac{1}{2} \ln \left( D_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)} \right) + (N-1) \ln \left[ 2^N \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N} \right]^{-1}. \quad (5.34)$$

O discriminante para os polinômios de Jacobi da equação (5.26) (Ref.[7]), é dados pela seguinte expressão:

$$D_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)} = 2^{N(1-N)} \prod_{j=1}^N j^{j-2N+2} (2\alpha-1+j)^{j-1} (2\eta-1+j)^{j-1} (N+2\alpha+2\eta-2+j)^{N-j} \quad (5.35)$$

Substituindo (5.35), (5.34), (5.33) e (5.32) em (5.28), obtemos a seguinte expressão para  $W_0$ :

$$\begin{aligned}
W_0 &= (1 - N - \alpha - \eta) \ln \left[ 2^N \binom{2N + 2\alpha + 2\eta - 2}{N}^{-1} \right] \\
&- \alpha \ln \left[ \binom{N + 2\alpha - 1}{N} \right] - \eta \ln \left[ \binom{N + 2\eta - 1}{N} \right] + \frac{1}{2}(N - 1) \ln(2^N) \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left[ j^{j-2N+2} (2\alpha - 1 + j)^{j-1} (2\eta - 1 + j)^{j-1} (N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N-j} \right]
\end{aligned} \tag{5.36}$$

Esta expressão pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
W_0 &= -\frac{1}{2}(N - 1) \ln(2)^N - (\alpha + \eta) \ln(2)^N + \ln \left[ \frac{(N + 2\alpha - 1)!}{(2\alpha - 1)!} \right]^{-\alpha} \\
&+ \ln \left[ \frac{(N + 2\eta - 1)!}{(2\eta - 1)!} \right]^{-\eta} + \ln \left[ \frac{(2N + 2\alpha + 2\eta - 2)!}{(N + 2\alpha + 2\eta - 2)!} \right]^{N+\alpha+\eta-1} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left[ j^j (2\alpha - 1 + j)^{j-1} (2\eta - 1 + j)^{j-1} (N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N-j} \right], \\
W_0 &= -\frac{1}{2}(N - 1) \ln(2)^N - (\alpha + \eta) \ln(2)^N - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(2\alpha - 1 + j)^{2\alpha} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(2\eta - 1 + j)^{2\eta} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{-2N-2\alpha-2\eta+2} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left[ j^j (2\alpha - 1 + j)^{j-1} (2\eta - 1 + j)^{j-1} (N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N-j} \right], \\
W_0 &= -\frac{1}{2}(N - 1) \ln(2)^N - (\alpha + \eta) \ln(2)^N \\
&- \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left[ \frac{j^j (2\alpha - 1 + j)^{2\alpha-1+j} (2\eta - 1 + j)^{2\eta-1+j}}{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N+2\alpha+2\eta-2+j}} \right].
\end{aligned} \tag{5.37}$$

O próximo passo no estudo da termodinâmica do ensemble de Jacobi será encontrar uma expressão para a energia livre no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ . É de se esperar que, quando  $\beta \gg 1$ ,

$$Z_0 = C_N^{-1} e^{-\beta W_0}, \quad (5.38)$$

onde a constante  $C_N$  não depende de  $\beta$  e será determinada mais adiante.

A termodinâmica do ensemble associado aos polinômios de Jacobi pode ser tornar extensiva, uma vez que é possível eliminar a dependência em  $N$  das quantidades termodinâmicas por nível, tais como a definição de energia interna dada por (5.17), no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ . Para trabalharmos com a termodinâmica extensiva introduziremos a função de partição

$$\frac{Z_N(\beta)}{Z_0} = C_N \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 e^{-\beta(W-W_0)} dx_1 \dots dx_N, \quad (5.39)$$

de forma que a energia livre por nível torna-se

$$F_N(\beta) = -\frac{1}{N} \left[ \frac{1}{\beta} \ln[C_N Z_N(\beta)] + W_0 \right]. \quad (5.40)$$

Calculando explicitamente o termo  $-\frac{1}{N\beta} \ln[C_N Z_N(\beta)]$ , temos:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N\beta} \ln[C_N Z_N(\beta)] &= -\frac{1}{N\beta} \ln(C_N) + \left[ \frac{1}{2}(1-N) - \frac{1}{\beta} - (\alpha + \eta) \right] \ln(2) + \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] \\ &- \frac{1}{N\beta} \sum_{j=1}^N \ln \left[ \Gamma \left( 1 + j \frac{\beta}{2} \right) \right] + \ln \left[ \Gamma \left( \beta\alpha + 1 - \frac{\beta}{2} + j \frac{\beta}{2} \right) \right] + \ln \left[ \Gamma \left( \beta\eta + 1 - \frac{\beta}{2} + j \frac{\beta}{2} \right) \right] \\ &- \ln \left[ \Gamma \left( \beta\alpha + \beta\eta + 2 + \frac{\beta}{2}(N + j - 2) \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Para  $N \rightarrow \infty$ , apenas os termos de ordem alta ( $j \gg 1$ ) irão contribuir para a soma, pois todos os termos são proporcionais a  $N^{-1}$ . Podemos então utilizar a aproximação de Stirling

$$\ln[\Gamma(1+z)] \approx z \ln(z) - z + \frac{1}{2} \ln(z) + \frac{1}{2} \ln(2\pi), \quad |z| \rightarrow \infty. \quad (5.42)$$

que quando aplicada à equação (5.41), nos leva à seguinte expressão:

$$-\frac{1}{N\beta} \ln[C_N Z_N(\beta)] \approx \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2}(1-N) \ln(2) - (\alpha + \eta) \ln(2) - \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N \ln \left[ \frac{j^j (2\alpha - 1 + j)^{2\alpha-1+j} (2\eta - 1 + j)^{2\eta-1+j}}{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N+2\alpha+2\eta-2+j}} \right] \\
& - \frac{1}{N\beta} \ln \left[ \prod_{j=1}^N \frac{j^{\frac{1}{2}} (2\alpha - 1 + j)^{\frac{1}{2}} (2\eta - 1 + j)^{\frac{1}{2}} 2^2 \pi e}{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{\frac{3}{2}}} \right] - \frac{1}{N\beta} \ln(C_N). \quad (5.43)
\end{aligned}$$

Como  $C_N$  é uma constante que não depende de  $\beta$ , existe uma arbitrariedade sobre o valor desta constante que irá alterar, como vemos nas equações acima, apenas a origem da energia livre. Portanto, podemos escolher

$$C_N = \prod_{j=1}^N \frac{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{\frac{3}{2}}}{j^{\frac{1}{2}} (2\alpha - 1 + j)^{\frac{1}{2}} (2\eta - 1 + j)^{\frac{1}{2}} 2^2 \pi e}, \quad (5.44)$$

o que nos leva, substituindo (5.43) e (5.37) em (5.40), à seguinte expressão para a energia livre:

$$F(\beta) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right]. \quad (5.45)$$

Esta é uma expressão assintótica da energia livre para  $N \rightarrow \infty$ . Podemos calcular  $C_N$  explicitamente analisando o limite  $\beta \gg 1$  na expressão de  $Z_N$ , porém, ainda assim, no intuito de obtermos exatamente a energia livre dada por (5.45) que corresponde à energia livre do Ensemble Circular de Dyson no limite termodinâmico, teríamos que multiplicar a constante obtida por um fator proporcional a  $\pi^{-N}$ . Este desenvolvimento será omitido pois exige um cálculo entediante e, de qualquer maneira, a expressão (5.45) obtida mostra que a expressão encontrada para  $C_N$  casa perfeitamente os resultados encontrados para o Ensemble de Jacobi com os do Ensemble Circular. No entanto, uma verificação rápida da validade deste método de obter  $C_N$  pode ser feita aplicando-o ao Ensemble de Hermite, onde as contas são muito menos trabalhosas.

As expressões assintóticas para as outras grandezas termodinâmicas podem ser derivadas de (5.45):

*Energia média por nível:*

$$U(\beta) = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right]. \quad (5.46)$$

*Entropia por nível:*

$$S(\beta) = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{\beta}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] - 1 \right] - \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right]. \quad (5.47)$$

*Calor específico por nível:*

$$C(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{\beta^2}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{\beta}{2}. \quad (5.48)$$

**Resumo da termodinâmica do Ensemble de Jacobi:**

A função de partição é dada por

$$\begin{aligned} \frac{Z_N(\beta)}{Z_0} &= C_N \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 e^{-\beta(W-W_0)} dx_1 \dots dx_N, \\ &= \frac{C_N}{e^{-\beta W_0}} 2^{\frac{\beta}{2} N(N-1) + N\beta(\alpha+\eta) + N} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2} + j\frac{\beta}{2}) \Gamma(\beta\alpha + 1 + j\frac{\beta}{2}) \Gamma(\beta\eta + 1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2}) \Gamma[\beta\alpha + \beta\eta + 2 + \frac{\beta}{2}(N + j - 1)]}, \end{aligned} \quad (5.49)$$

onde a energia  $W$  é dada por

$$W = -\sum_{j=1}^N \ln[(1-x_j)^\alpha (1+x_j)^\eta] - \sum_{j<l} \ln|x_j - x_l|, \quad (5.50)$$

e o coeficiente  $C_N$  dado por

$$C_N = \prod_{j=1}^N \frac{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{\frac{3}{2}}}{j^{\frac{1}{2}} (2\alpha - 1 + j)^{\frac{1}{2}} (2\eta - 1 + j)^{\frac{1}{2}} 2^2 \pi e}. \quad (5.51)$$

A energia  $W$  possui um valor mínimo  $W_0$  que é alcançado quando o conjunto  $\{x_1, \dots, x_N\}$  corresponde ao conjunto formado pelos zeros do polinômio de Jacobi  $P_N^{(2\alpha-1, 2\eta-1)}(x)$  (Ref.[4, 14]). A expressão para  $W_0$  é

$$W_0 = -\frac{1}{2}(N-1) \ln(2)^N - (\alpha + \eta) \ln(2)^N$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left[ \frac{j^j (2\alpha - 1 + j)^{2\alpha-1+j} (2\eta - 1 + j)^{2\eta-1+j}}{(N + 2\alpha + 2\eta - 2 + j)^{N+2\alpha+2\eta-2+j}} \right]. \quad (5.52)$$

No limite termodinâmico, ou seja, para  $N \rightarrow \infty$ , a energia livre é dada por:

$$F_N(\beta) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right]. \quad (5.53)$$

### 5.2.2 Ensemble de Hermite: $V(x) = x^2/2$

Para obtermos o Ensemble de Hermite, devemos fazer a mudança  $x_j \rightarrow \frac{x_j}{L}$  e  $\alpha = \eta = \frac{L^2}{2}$ , e tomar o limite  $L \rightarrow \infty$  na expressão (5.49), obtendo assim

$$\begin{aligned} \frac{Z_N(\beta)}{Z_0} &= C_N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(W-W_0)} dx_1 \dots dx_N \\ &= \frac{C_N}{e^{-\beta W_0}} (2\pi)^{\frac{N}{2}} \beta^{-\frac{N}{2} - \frac{\beta}{4} N(N-1)} \prod_{j=1}^N \frac{\Gamma(1 + j\frac{\beta}{2})}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2})}, \end{aligned} \quad (5.54)$$

onde a energia potencial  $W$  é dada por

$$W = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \sum_{j<l} \ln |x_j - x_l|, \quad (5.55)$$

e o coeficiente  $C_N$  convenientemente definido por

$$C_N = \frac{1}{(2\pi^2)^{\frac{N}{2}} (N!)^{\frac{1}{2}}}. \quad (5.56)$$

Se colocarmos a expressão (5.54) no formato da equação (5.13) vemos que a função pêsso neste caso é dada por

$$\omega(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (5.57)$$

ou seja, pela função pêsso dos polinômios de Hermite, justificando portanto o nome dado a este ensemble.

A energia  $W$  possui um valor mínimo  $W_0$  que é alcançado quando o conjunto  $\{x_1, \dots, x_N\}$  corresponde ao conjunto formado pelos zeros do polinômio de Hermite  $H_N(x)$  (Ref.[4, 14]). A expressão para  $W_0$  é

$$W_0 = \frac{N}{4}(N-1)[1 + \ln(2)] - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N j \ln(j). \quad (5.58)$$

Como o limite termodinâmico da energia livre para o caso de Jacobi não depende dos parâmetros  $\alpha$  e  $\eta$  da função pêso de Jacobi, a transformação feita nestes parâmetros não afeta sua expressão, sendo esta, portanto, dada por

$$F(\beta) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right].$$

É interessante considerar o caso onde  $V(x) = sx^2$ , onde  $s$  é o “fator de escala” introduzido anteriormente. Neste caso,

$$Z_N(\beta) = (2\pi)^{N/2} (2\beta s)^{-N/2 - \beta N(N-1)/4} \prod_{j=1}^N \frac{\Gamma \left( 1 + j \frac{\beta}{2} \right)}{\Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right)}, \quad (5.59)$$

que pode ser reescrita como

$$Z_N(\beta) = (2\pi)^{N/2} e^{-\left[\frac{N}{2} + \frac{\beta}{4} N(N-1)\right] \ln(2s\beta) + \sum_{j=1}^N \left\{ \ln \Gamma \left( 1 + j \frac{\beta}{2} \right) - \ln \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right\}}. \quad (5.60)$$

Utilizando a definição (5.38) para  $Z_0$ , é possível utilizar a expansão de Stirling, expressão (5.42), para obter explicitamente

$$Z_0 \equiv \lim_{\beta \gg 1} Z_N = \left( \frac{\pi}{s} \right)^{N/2} \sqrt{N!} e^{-\beta W_0}, \quad (5.61)$$

onde  $W_0$  é dada por

$$W_0 = \frac{N}{4}(N-1)[1 + \ln(4s)] - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N j \ln(j). \quad (5.62)$$

Se tomarmos  $s = 1/2$  na expressão (5.61), vemos o aparecimento da constante  $C_N^{-1}$  multiplicando a exponencial, exceto por um fator  $\pi^{N/2}$  que deve ser multiplicado a  $Z_0$  com a finalidade de obtermos exatamente a relação



(5.56) para  $C_N$ . Porém, não precisamos nos preocupar com este fator extra pois a própria relação (5.56) foi escolhida de forma conveniente para podermos comparar a energia livre do ensemble de Hermite com a do ensemble circular de Dyson.

Lembrando que a constante  $C_N$  altera a energia livre apenas em um fator constante, não alterando grandezas como a energia média por nível e o calor específico, existe uma arbitrariedade na escolha desta constante. Ela deve alterar apenas a origem das grandezas termodinâmicas e não a própria termodinâmica.

Portanto, podemos escolher o fator de escala  $s$  de modo que

$$\ln(4s) = -1 + \frac{2}{N(N-1)} \sum_{j=1}^N j \ln(j), \quad (5.63)$$

a fim de fazer com que a expressão (5.62) se anule, ou seja, com que  $W_0 = 0$ . Isto mostra que encontrar um valor à temperatura zero para a energia equivale a encontrar uma escala apropriada para o espectro. Além do mais, para valores muito grandes de  $N$ ,

$$\frac{2}{N(N-1)} \sum_{j=1}^N j \ln(j) \approx \frac{2}{N^2} \int_1^N j \ln(j) dj = \ln(N) - \frac{1}{2},$$

o que nos mostra que  $s$  se torna proporcional a  $N$  nesse limite. Este limite assintótico mostra como esta maneira de trabalhar se conecta com alguns trabalhos recentes de pesquisadores que, devido à praticidade de se trabalhar com  $s \propto N$ , trabalham com redefinições dos polinômios de Hermite que já incluem o fator  $N$ . Na referência [15], por exemplo, Yan V. Fyodorov define os polinômios de Hermite como

$$h_k(x) = (-1)^k e^{N\frac{x^2}{2}} \frac{d^k}{dx^k} \left( e^{-N\frac{x^2}{2}} \right), \quad (5.64)$$

definição esta que já contém a dependência em  $N$  apropriada para o limite  $N \gg 1$ . Desta forma evita-se trabalhar com  $W_0$  e a convergência das grandezas termodinâmicas no limite termodinâmico fica garantida.

### 5.2.3 Ensemble de Legendre: $V(x) = 0$

Para obtermos o ensemble de Legendre devemos fazer a mudança  $\alpha = \eta = 0$ , na expressão (5.49), obtendo assim

$$\begin{aligned} \frac{Z_N(\beta)}{Z_0} &= C_N \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 e^{-\beta(W-W_0)} dx_1 \dots dx_N \\ &= \frac{C_N}{e^{-\beta W_0}} (2)^{\frac{\beta}{2} N(N-1) + N} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2} + j\frac{\beta}{2}) [\Gamma(1 + j\frac{\beta}{2})]^2}{\Gamma(1 + \frac{\beta}{2}) \Gamma[2 + \frac{\beta}{2}(N + j - 1)]}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

onde a energia  $W$  é dada por

$$W = - \sum_{j < l} \ln |x_j - x_l|, \quad (5.66)$$

e o coeficiente  $C_N$  dado por:

$$C_N = \prod_{j=1}^N \frac{(N + j - 2)^{\frac{3}{2}}}{(j - 1)^{\frac{3}{2}} 2^2 \pi e}. \quad (5.67)$$

Se colocarmos a expressão (5.65) no formato da equação (5.13) vemos que a função pêso neste caso é dada por

$$\omega(x) = 1,$$

ou seja, pela função pêso dos polinômios de Legendre, justificando portanto o nome dado a este ensemble.

Neste caso não podemos minimizar  $W$  através do mesmo método utilizado para os casos de Jacobi e de Hermite, pois não conseguimos encontrar um polinômio cuja equação diferencial seja proporcional a ele mesmo. De fato, a equação (5.18) para este caso é

$$\frac{\partial W}{\partial \xi_j} = - \sum_{l(\neq j)} \frac{1}{\xi_j - \xi_l} = 0, \quad (5.68)$$

onde, sendo  $\rho(x)$  qualquer polinômio cujos zeros são dados pelo conjunto  $\{\xi_1, \dots, \xi_N\}$ , podemos substituir a expressão (5.21), obtendo assim

$$\sum_{l(\neq j)} \frac{1}{\xi_j - \xi_l} = \frac{\rho''(\xi_j)}{2\rho'(\xi_j)} = 0. \quad (5.69)$$

Notamos que a expressão (5.69) não pode ser a expressão de um polinômio, pois isto implicaria que  $\rho''(\xi_j) = 0$  para todas as  $N$  raízes do polinômio  $\rho(x)$ , porém  $\rho''(x)$  possui duas raízes a menos já que é um polinômio de ordem

$N - 2$ . Portanto, o método que consiste em igualar a derivada parcial de  $W$  (relativa à uma única variável) a zero não leva à equação de um polinômio no caso de Legendre.

Neste caso,  $W_0$  deve ser obtido tomando-se o limite  $\beta \rightarrow \infty$  na expressão da energia média  $\langle W \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z_N(\beta)]$ , ou através do limite  $\beta \gg 1$  na própria expressão da função de partição, tal como fora feito anteriormente. A expressão para  $W_0$  obtida é:

$$W_0 = -\frac{N}{2}(N-1)\ln(2) + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \ln \left[ \frac{(N+j-1)^{N+j-1}}{j^{2j}(1+j)^{1+j}} \right]. \quad (5.70)$$

Como o limite termodinâmico da energia livre para o caso de Jacobi não depende dos parâmetros  $\alpha$  e  $\eta$ , a substituição  $\alpha = \eta = 0$  não afeta sua expressão, sendo esta, portanto, dada por

$$F(\beta) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{\beta}{2} \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \right].$$

Temos ainda os casos dos polinômios ortogonais de **Gegenbauer** e **Tchebichev**, que também podem ser derivados do caso de Jacobi (ref. [4]), e que, portanto, possuem a mesma expressão assintótica para a energia livre, e conseqüentemente as mesmas expressões para a *energia média por nível*, *entropia por nível* e *calor específico por nível*, equações (5.46), (5.47) e (5.48) respectivamente. O caso do ensemble de **Laguerre** também nos leva à mesma termodinâmica dos outros ensembles no limite  $N \rightarrow \infty$ . Todos estes ensembles são discutidos detalhadamente na referência [14].

Uma última observação a ser feita nesta seção é que o estudo apresentado acima para o ensemble de Jacobi demonstra a universalidade das grandezas termodinâmicas para diversos casos, incluindo o ensemble de Hermite que diz respeito aos ensembles Gaussianos. O *Ensemble Circular*, introduzido por Dyson (Ref.[10]), também pertence à classe de ensembles que possuem esta termodinâmica no limite  $N \rightarrow \infty$ .

Mais adiante estudaremos o caso ligado aos polinômios ortogonais de Stieltjes, que leva à uma termodinâmica diferente desta encontrada para todos estes casos abordados e comentados nesta seção.

### 5.3 Espectros do EGO e a termodinâmica do caso de Hermite: valores numéricos

Como vimos, a distribuição dos autovalores de matrizes aleatórias reais e simétricas (equação (4.53)) e a distribuição originada pelo potencial  $W(x_1, \dots, x_N)$  (equação (5.55)), através da função de partição  $Z_N(\beta)$  (equação (5.54)), na termodinâmica do caso de Hermite são idênticas para  $\beta = 1$ .

É possível mostrar que a distribuição dos autovalores de matrizes aleatórias complexas e hermiteanas, pertencentes ao Ensemble Gaussiano Unitário, e de matrizes aleatórias de quatérnions, pertencentes ao Ensemble Gaussiano Simplético, são idênticas à do caso de Hermite para  $\beta = 2$  e  $\beta = 4$ , respectivamente (ref. [4]).

Portanto, utilizaremos o caso de Hermite para calcular os valores numéricos das grandezas termodinâmicas discutidas na seção anterior, lembrando que estes resultados são idênticos para todos os outros casos apresentados acima.

Substituindo a equação (5.56) em (5.54), temos a seguinte expressão para a função de partição do caso de Hermite:

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{(\pi)^{\frac{N}{2}}(N!)^{\frac{1}{2}}} \beta^{-\frac{N}{2} - \frac{\beta}{4}N(N-1)} \left[ \Gamma\left(1 + \frac{\beta}{2}\right) \right]^{-N} \prod_{j=1}^N \Gamma\left(1 + j\frac{\beta}{2}\right). \quad (5.71)$$

Calculemos a energia interna média. Sendo

$$\begin{aligned} \ln[Z_N(\beta)] &= -\ln\left[(\pi)^{\frac{N}{2}}(N!)^{\frac{1}{2}}\right] - \left[\frac{1}{2}N + \frac{1}{4}\beta N(N-1)\right] \ln(\beta) \\ &\quad - N \ln\left[\Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\beta\right)\right] + \sum_{j=1}^N \ln\left[\Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\beta j\right)\right], \end{aligned} \quad (5.72)$$

podemos utilizar a aproximação de Stirling (dada por (5.42)),  $\ln[\Gamma(1+x)] \approx x \ln(x) - x$ , válida para  $x \gg 1$ , para calcular uma expressão assintótica de  $\langle W \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z_N(\beta)]$  quando  $\beta \rightarrow \infty$ , ou seja,  $T \rightarrow 0$ , o que nos leva à

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z_N(\beta)] &= \langle W \rangle \simeq \frac{1}{4}N(N-1) \ln(\beta) + \left[\frac{1}{2}N + \frac{1}{4}\beta N(N-1)\right] \beta^{-1} \\ &\quad + N \frac{\partial}{\partial \beta} \left[ \frac{\beta}{2} \ln\left(\frac{\beta}{2}\right) - \frac{\beta}{2} \right] \end{aligned}$$

$$-\sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial \beta} \left[ \frac{\beta j}{2} \ln \left( \frac{\beta j}{2} \right) - \frac{\beta j}{2} \right]$$

Portanto, para valores muito grandes de  $\beta$ , vale a seguinte aproximação:

$$\begin{aligned} \langle W \rangle = & \frac{1}{4}N(N-1)[1 + \ln(\beta)] + \frac{N}{2\beta} + \frac{N}{2} \ln \left( \frac{\beta}{2} \right) \\ & - \sum_{j=1}^N \frac{j}{2} \ln \left( \frac{\beta j}{2} \right). \end{aligned}$$

Para  $\beta \rightarrow \infty$ , temos,

$$\begin{aligned} \langle W_0 \rangle = & \frac{1}{4}N(N-1)[1 + \ln(\beta)] + \frac{N}{2} \ln(\beta) - \frac{N}{2} \ln(2) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N j \ln(\beta) + j \ln(j) - j \ln(2), \\ \langle W_0 \rangle = & \frac{1}{4}N(N-1)[1 + \ln(\beta)] + \frac{N}{2} \ln(\beta) - \frac{N}{2} \ln(2) \\ & - \frac{1}{2} \ln(\beta)(N+1)\frac{N}{2} + \frac{1}{2} \ln(2)(N+1)\frac{N}{2} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N j \ln(j), \\ \langle W_0 \rangle = & \frac{N}{4}(N-1)[1 + \ln(2)] - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N j \ln(j), \end{aligned} \quad (5.73)$$

provando, desta forma, o resultado (5.58) apresentado anteriormente.

Uma vez calculada a expressão assintótica para  $\langle W_0 \rangle$ , calculemos agora a expressão analítica de  $\langle W \rangle$ . Utilizando a equação (5.72), temos:

$$\begin{aligned} \langle W \rangle = & -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z_N(\beta)] \\ = & \frac{1}{4}N(N-1)[1 + \ln(\beta)] \\ & + \frac{N}{2\beta} + N \frac{d}{d\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right] - \sum_{j=1}^N \frac{d}{d\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta j \right) \right] \end{aligned} \quad (5.74)$$

Para prosseguirmos, precisamos conhecer a derivada da função  $\ln [\Gamma(x)]$ . Sua derivada pode ser encontrada na referência [5] e é dada pela expressão,

$$\frac{d}{dx} \ln [\Gamma(x)] = -\gamma - \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{n} - \frac{1}{x+n} \right), \quad (5.75)$$

onde  $\gamma$  é a constante de Euler,

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln(n) \right),$$

e vale <sup>1</sup>

$$\gamma = 0,5772156649\dots$$

Aplicando a equação (5.75) à equação (5.74), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle W \rangle = & \frac{1}{4}N(N-1)[1 + \ln(\beta)] + \frac{N}{2\beta} \\ & + \frac{N}{2} \left[ -\gamma - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left( \frac{1}{n} - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta + n} \right) \right] \\ & - \sum_{j=1}^N \frac{j}{2} \left[ -\gamma - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta j} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left( \frac{1}{n} - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta j + n} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Para calcular este valor teórico, dado pela equação (5.74) e deduzido a partir da função de partição, equação (5.71), foram desenvolvidos dois programas envolvendo métodos de derivação diferentes com a finalidade de verificar possíveis flutuações na precisão dos valores encontrados, flutuações decorrentes de erros numéricos na derivação.

Para o cálculo da função,

$$f(\beta) = \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right] \quad (5.77)$$

---

<sup>1</sup>Esta constante foi calculada com trinta e duas casas decimais por *Mascheroni* em 1790, porém apenas as primeiras 19 casas decimais estavam corretas. Posteriormente, foi calculada com 40 casas decimais, corretas, por *Soldner* em 1809 e verificada por *Gauss* e *Nicolai* em 1812. O próprio Euler foi quem denotou esta constante pela letra grega  $\gamma$  e calculou seu valor com 16 casas decimais em 1781 (motivo pelo qual a chamamos de constante de Euler), porém é comum chamá-la de constante de Euler-Mascheroni.

foi utilizada uma rotina numérica encontrada na referência [6], que calcula o logaritmo natural da função gama ( $\ln[\Gamma(x)]$ ), a saber a rotina chamada “gammln”, rotina esta que também teve sua precisão testada e comparada com o cálculo feito por diferentes calculadoras. A precisão mostrou-se satisfatória pois os valores encontrados divergem apenas na quinta casa decimal, não influenciando de forma apreciável os valores obtidos no cálculo da energia por nível.

Um dos programas calculou a energia interna utilizando diretamente a expressão (5.74) onde a derivada da função (5.77) foi calculada através da própria definição de derivação, aproximando o limite

$$\frac{d}{d\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right] = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}(\beta + \delta) \right) \right] - \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right]}{\delta}$$

por

$$\frac{d}{d\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right] = \frac{\ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}(\beta + \epsilon) \right) \right] - \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{1}{2}\beta \right) \right]}{\epsilon}. \quad (5.78)$$

com  $\epsilon = 10^{-4}$ .

O segundo método utilizou a expressão (5.76) para o cálculo da energia interna, e o truncamento das somas infinitas foi feito considerando-se aproximadamente 60.000 termos, número a partir do qual a variação no resultado encontrado se mostrou bem lenta (porém sempre presente, dependendo do número de termos acrescentados à série).

Os dois métodos se mostraram equivalentes quanto ao resultado obtido, sendo a divergência entre os resultados obtidos presente em casas decimais insignificantes.

O valor teórico obtido para a energia interna média através destes dois métodos foi

$$U_T = 0,3718 ,$$

onde o sub-índice  $T$  refere-se ao valor teórico.

## 5.4 Simulação Numérica do Ensemble Gaussiano Ortogonal

Para a simulação numérica do Ensemble Gaussiano Ortogonal ( $\beta = 1$ ), foi desenvolvido um programa que gera uma matriz  $n \times n$  (particularmente para

esta simulação, uma matriz 100 x 100) real e simétrica, cujos elementos são gerados aleatoriamente, porém possuindo uma distribuição gaussiana.

Isto foi feito utilizando o comando *randomize* da biblioteca *math.h* do compilador Borland C++. Este comando gera números aleatórios com uma distribuição uniforme que são utilizados para gerar os números aleatórios com distribuição gaussiana através do método de Box-Müller (ver apêndice A).

Seus autovalores foram calculados utilizando algumas rotinas encontradas na referência [6], a saber, “tred2”, que transforma uma matriz  $n \times n$  real e simétrica numa matriz tridiagonal simétrica, “tqli”, que encontra os autovalores de uma matriz tridiagonal simétrica, e “shell”, que ordena os autovalores armazenados num vetor coluna em ordem crescente.

Após encontrados os autovalores da matriz 100 x 100, estes são ordenados em ordem crescente e em seguida calcula-se a energia potencial do sistema,

$$W = \frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{i < j} \ln |x_i - x_j|,$$

onde  $x_i$  representa os autovalores da matriz hamiltoniana, ou seja, os níveis de energia do sistema. Desta grandeza, subtrai-se o valor mínimo de  $W$ , denotado por  $W_0$ , que corresponde ao valor da energia a uma temperatura igual a zero, ou seja,  $\beta \rightarrow \infty$ , dividindo esta subtração pela dimensão da matriz considerada (neste caso  $N = 100$ ), obtendo desta forma valores independentes da dimensão da matriz.

É a média desta grandeza que chamaremos de energia média,

$$\langle U \rangle = \frac{\langle W \rangle - \langle W_0 \rangle}{N}. \quad (5.79)$$

De acordo com o que foi desenvolvido nas seções anteriores, também podemos definir, analogamente ao que é feito em física estatística, um calor específico proporcional à variância da energia interna. Temos que

$$C = \frac{\beta^2}{N} \langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle,$$

sendo  $\langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle$  a variância de  $W$ .

Como já estamos trabalhando com uma definição de energia por nível dada por  $U$ , a expressão utilizada para o calor específico foi

$$C = \beta^2 N \langle (U - \langle U \rangle)^2 \rangle. \quad (5.80)$$



A estatística realizada envolveu 1000 matrizes 100 x 100, reais e simétricas, e a média obtida para os 1000 valores de energia interna encontrados, denotada por  $U_S$ , foi

$$U_S = 0,369 ,$$

com um desvio padrão (sd) de 0,0514, o que nos fornece, através da equação (5.80), e tomando  $\beta = 1$ , o seguinte valor para o calor específico do ensemble Gaussiano ortogonal:

$$C_S = 0,26 .$$

Estes resultados para a energia interna média estão em perfeito acordo com os obtidos a partir do *Ensemble Circular* de Dyson [10], onde foram obtidos os seguintes valores:

$$U_C = 0,365$$

e

$$C_C = 0,26 ,$$

onde o sub-índice  $C$  indica que os valores são referentes ao ensemble circular.

## Capítulo 6

### O Ensemble de Stieltjes:

$$V(x) = (1/s) \ln^2(x)$$

Como vimos anteriormente, existem vários ensembles relacionados aos polinômios ortogonais clássicos que possuem a mesma expressão para a energia livre por partícula no limite  $N \rightarrow \infty$ . Conseqüentemente, a energia interna, a entropia e o calor específico, por partícula, são os mesmos neste limite e iguais às grandezas termodinâmicas estabelecidas para o Ensemble Circular [4, 10, 14].

Um ensemble que também está relacionado com polinômios ortogonais, mas que contém uma termodinâmica diferente, é gerado substituindo a função pêso dos polinômios de Stieltjes (ver Ref.[8]), também conhecida como “log-normal distribution”, dada por

$$\omega(x) = (\pi s)^{-1/2} e^{-\frac{1}{s} \ln^2(x)}, \quad (6.1)$$

na equação (5.10)

Neste caso, a equação (5.10) torna-se

$$Z_N(\beta) = \left[ \frac{(\pi s)^{1-\beta}}{\beta} \right]^{\frac{N}{2}} \sum_{\{j\}} C_{j_1 \dots j_N} \prod_{m=1}^N \mu_{j_m}^{1/\beta}, \quad (6.2)$$

onde  $\mu_{j_m}$  são os momentos dos polinômios de Stieltjes [7, 8], determinados por

$$\mu_{j_m} = \int_0^\infty x^{j_m} \omega(x) dx = e^{s \left( \frac{j_m+1}{2} \right)^2}. \quad (6.3)$$

Não existe nenhuma transformação (ao menos não conhecemos nenhuma) das funções pêsos dos polinômios abordados e mencionados anteriormente (polinômios de Jacobi, Hermite, Legendre, Laguerre, Tchebichev e Gegenbauer, mais precisamente) que nos leve à função pêsos dos polinômios de Stieltjes, portanto nós não somos capazes de utilizar os resultados relacionados a eles para obter as grandezas termodinâmicas deste ensemble, tal como fizemos no capítulo anterior com os ensembles de Hermite e Legendre, obtidos a partir de transformações sobre a função pêsos dos polinômios de Jacobi.

Pode-se demonstrar que o pêsos dado por (6.1) está associado ao problema do *momento inverso indeterminado* [8, 17], ao contrário dos outros polinômios que estudamos até agora para os quais o total conhecimento sobre os momentos equivale ao conhecimento da função pêsos. Sendo assim, determinar os coeficientes  $C_{j_1 \dots j_N}$  de (5.10) torna-se uma tarefa muito difícil, ou quem sabe, até mesmo impossível.

Para estudar este ensemble, vamos calcular explicitamente a função de partição, utilizando o pêsos de Stieltjes na seguinte forma simetrizada<sup>1</sup>,

$$\omega(x) = (\pi s)^{-1/2} e^{-\frac{1}{s} \ln^2 |x|} \quad (6.4)$$

o que nos leva à seguinte função de partição,

$$Z_N(\beta) = (\pi s)^{-N\beta/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N e^{-\frac{\beta}{s} \ln^2 |x_j|} dx_j \prod_{i>j} |x_i - x_j|^\beta. \quad (6.5)$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$x_j = \operatorname{sgn}(\xi_j) e^{s|\xi_j|}, \quad (6.6)$$

na equação (6.5), onde  $\operatorname{sgn}$  é a função sinal, obtemos

$$Z_N(\beta) = (\pi s)^{-N\beta/2} s^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N e^{-\beta s \xi_j^2} e^{s|\xi_j|} d\xi_j \prod_{i>j} |x(\xi_i) - x(\xi_j)|^\beta, \quad (6.7)$$

onde as funções  $x(\xi_j)$  são definidas pela relação (6.6).

Devido à existência de termos Gaussianos na integral acima, a contribuição para a integração sobre o conjunto  $\{\xi_j\}$  provém predominantemente da região  $\xi_j \leq \xi_c = 1/\sqrt{s\beta}$ , e conseqüentemente se  $s\xi_c \ll 1$ , ou seja, se  $s \ll \beta$ , as

---

<sup>1</sup>Note que esta forma simetrizada possui apenas os momentos pares.

exponencias podem ser linearmente aproximadas por  $e^{s|\xi_j|} \simeq 1 + \text{sgn}(\xi_j)s\xi_j$  no produto das diferenças, fazendo com que

$$\prod_{i>j} |x(\xi_i) - x(\xi_j)|^\beta \simeq s^{\beta N(N-1)/2} \prod_{i>j} |\xi_i - \xi_j|^\beta,$$

enquanto as exponencias fora do produto podem ser aproximadas por um. Imediatamente percebemos que, neste domínio do parâmetro  $s$ , a termodinâmica do caso Gaussiano é retomada<sup>2</sup> e  $s$  volta a ser um parâmetro de escala, porém agora para as variáveis  $\xi_j$ <sup>3</sup>.

Assumindo agora que  $s\xi_c \gg 1$  e que  $s$  seja grande o suficiente para que  $s|\xi_j| \gg 1$  para qualquer  $\xi_j$ , o potencial de confinamento torna-se o potencial que dá origem ao pêso dos polinômios de Stieltjes. Podemos fazer a aproximação

$$e^{s(|\xi_j|+\delta)} - e^{s|\xi_j|} = e^{s|\xi_j|} (e^{s\delta} - 1) \simeq e^{s(|\xi_j|+\delta)},$$

válida até mesmo para valores muito pequenos de  $\delta$ . Para cada diferença  $|x(\xi_i) - x(\xi_j)|$  apenas o termo com o maior  $|\xi|$  sobrevive. Então, supondo  $|\xi_1| > |\xi_2| > |\xi_3| > \dots > |\xi_N|$ , podemos escrever

$$\prod_{i>j} |x(\xi_i) - x(\xi_j)|^\beta = \exp \left[ s\beta \sum_{i=1}^N (N-j)|\xi_j| \right]. \quad (6.8)$$

Substituindo (6.8) na equação (6.7), obtemos

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= N!(\pi s)^{-N\beta/2} s^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N e^{-\beta s \xi_j^2 + \beta s [1/\beta + (N-j)] |\xi_j|} d\xi_j, \\ &= N! \frac{s^{N(1-\beta/2)}}{\pi^{N\beta/2}} \prod_{j=1}^N e^{\beta s [1/\beta + (N-j)]^2 / 4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta s \{|\xi_j| - (1/2)[1/\beta + (N-j)]\}^2} d\xi_j, \end{aligned} \quad (6.9)$$

onde  $N!$  corresponde ao número total de possibilidades para o ordenamento  $|\xi_1| > |\xi_2| > |\xi_3| > \dots > |\xi_N|$ .

Sendo assim, as integrais se separam umas das outras porque a variância de cada gaussiana é muito menor que a distância entre seus valores médios, ou seja,

$$\frac{1}{\sqrt{\beta s}} \ll \frac{1}{2}, \quad (6.10)$$

---

<sup>2</sup>Ver expressão (5.8)

<sup>3</sup>Ver expressões (5.62) e (5.63)

e as integrais de (6.9) tornam-se equivalentes ao produto de  $N$  integrais gaussianas idênticas. Finalmente concluímos que, para grandes valores de  $s$ , a função de partição do ensemble é dada por

$$Z_N = N! \left[ \frac{(\pi s)^{1-\beta}}{\beta} \right]^{\frac{N}{2}} \prod_{j=0}^{N-1} \mu_{j\beta}^{1/\beta}, \quad (6.11)$$

onde  $\mu_{j\beta}$  está definida de acordo com (6.3).

Para  $\beta \gg 1$ , a função de partição torna-se

$$\begin{aligned} Z_0 &= N! \exp \left\{ -\beta \left[ \frac{N}{2\beta} \ln(\beta) - \frac{s}{4} \sum_{j=0}^{N-1} \left( \frac{1}{\beta^2} + \frac{2j}{\beta} + j^2 \right) + \frac{N}{2} \left( 1 - \frac{1}{\beta} \right) \ln(\pi s) \right] \right\} \\ &\approx N! \exp \left[ -\beta \left( -\frac{s}{4} \sum_{j=0}^{N-1} j^2 + \frac{N}{2} \ln(\pi s) \right) \right] \equiv N! e^{-\beta W_0}. \end{aligned}$$

Com isto estamos aptos a definir precisamente a termodinâmica do ensemble de Stieltjes no limite  $s \gg 1$ .

A energia, dada por

$$W = \frac{1}{s} \sum_{j=1}^N \ln^2(x_j) - \sum_{i>j} \ln |x_i - x_j|, \quad (6.12)$$

atinge um valor mínimo à temperatura zero dado por

$$W_0 = \frac{N}{2} \ln(\pi s) - \frac{s}{4} \sum_{j=0}^{N-1} j^2, \quad (6.13)$$

e para incorporarmos este fato no cálculo da energia livre *por partícula*, temos que considerar a função de partição dada por

$$\frac{C_N}{N!(\pi s)^{-N\beta/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(W-W_0)} dx_1 \dots dx_N = C_N \frac{Z_N(\beta)}{Z_0} \quad (6.14)$$

onde o coeficiente  $C_N$  é dado por

$$C_N = e^{-sN^2/4}.$$

Explicitamente,

$$C_N \frac{Z_N(\beta)}{Z_0} = \left( \frac{\pi s}{\beta} \right)^{N/2} \exp \left[ \frac{Ns}{4} \left( \frac{1}{\beta} - 1 \right) \right]. \quad (6.15)$$

A energia livre por partícula é então dada por

$$F(\beta) = -\frac{1}{N\beta} \ln \left( C_N \frac{Z_N}{Z_0} \right) = \frac{s}{4\beta} \left( 1 - \frac{1}{\beta} \right) - \frac{1}{2\beta} \ln \left( \frac{\pi s}{\beta} \right), \quad (6.16)$$

a entropia por partícula, por

$$S(\beta) = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{s}{2} \left( \frac{1}{\beta} - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \left[ \ln \left( \frac{\pi s}{\beta} \right) + 1 \right], \quad (6.17)$$

a energia média por partícula, por

$$U(\beta) = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta} \left( \frac{s}{2\beta} + 1 \right), \quad (6.18)$$

e o calor específico por partícula, por

$$C(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{s}{\beta} + 1 \right). \quad (6.19)$$

Apesar de termos sido capazes de definir uma termodinâmica extensiva, as expressões para as grandezas termodinâmicas do ensemble de Stieltjes são completamente diferentes das obtidas anteriormente para os ensembles relacionados aos polinômios ortogonais comentados na seção 5.2, que como vimos, possuem a mesma termodinâmica do ensemble circular de Dyson, e dos ensembles Gaussianos, no limite termodinâmico ( $N \gg 1$ ).

A principal diferença é o aparecimento do parâmetro  $s$  nas expressões acima, o que revela a falta de universalidade do ensemble relacionado à distribuição de Stieltjes. Neste regime,  $s$  não pode mais ser visto como um parâmetro de escala, uma vez que ele não tem a capacidade de confinar os autovalores numa região limitada. De fato, a densidade neste caso é independente de  $N$  [17], uma propriedade característica de um líquido incompressível.

O ensemble definido pela função peso de (6.4), no limite  $s \gg 1$ , recobre o ensemble de Stieltjes e segue a termodinâmica estabelecida acima, e no limite  $s \ll 1$ , recobre os ensembles Gaussianos (ou de Hermite), e segue a bem conhecida termodinâmica apresentada na seção 5.2 .

## Capítulo 7

# O Ensemble Generalizado de Bertuola-Pato

Em 1962, R. Balian [21] propôs um método alternativo para a obtenção da densidade de probabilidade de matrizes pertencentes aos ensembles Gaussianos. Ele obteve os ensembles de Wigner maximizando a entropia<sup>1</sup> de Boltzman-Gibbs-Shannon e sujeitando-a à condição de normalização e a um vínculo dado pela norma média das matrizes.

Faremos um desenvolvimento análogo ao de Balian, porém utilizando a entropia não-extensiva de Tsallis, que em nosso caso de matrizes aleatórias é dada por

$$S_q = \frac{1 - \int dH P^q(H)}{q - 1}, \quad (7.1)$$

onde  $H$  é uma matriz aleatória  $N \times N$  distribuída de acordo com  $P(H)$  e onde  $dH$  é o mesmo diferencial introduzido nas seções anteriores e corresponde ao produto dos diferenciais de todos os elementos independentes da matriz. A definição usual de entropia é obtida tomando-se o limite  $q \rightarrow 1$  sobre o parâmetro não-extensivo  $q$ , e toda a termodinâmica proveniente desta definição para a entropia pode ser encontrada na referência [20].

Aplicaremos, portanto, o princípio de máxima entropia através de um método variacional utilizado para a maximização da relação (7.1) que, de

---

<sup>1</sup>Na realidade Balian utilizou o formalismo da Teoria da Informação em seu trabalho, utilizando o equivalente da entropia termodinâmica neste contexto, ou seja, a *Quantidade de Informação*, que difere da definição da mecânica estatística apenas por uma convenção a respeito do sinal que determina a convexidade da função. Sendo  $S$  a entropia e  $I$  a quantidade de informação, temos, respectivamente:  $S = -\sum_m P_m \ln P_m$  e  $I = \sum_m P_m \ln P_m$ .

acordo com o trabalho de Balian, estará sujeito a dois vínculos. O primeiro é simplesmente a condição de normalização

$$\int dHP(H) = 1, \quad (7.2)$$

e o segundo fixa um valor para a *média-q* da norma definida como o traço do quadrado da matriz,

$$\int dHP^q(H) \text{tr} H^2 = \mu \int dHP^q(H). \quad (7.3)$$

Para levarmos adiante o método variacional, introduzimos uma função auxiliar  $F$ , dada por

$$F = \frac{1 - \int dHP^q(H)}{q-1} + \lambda \left[ \int dHP(H) - 1 \right] - \alpha \left[ \int dHP^q(H) \text{tr} H^2 - \mu \int dHP^q(H) \right], \quad (7.4)$$

onde  $\lambda$  e  $\alpha$  são os multiplicadores de Lagrange.

Após algumas manipulações algébricas, concluímos que a expressão (7.4) pode ser escrita na seguinte forma:

$$F = \left( \frac{1}{q-1} - \lambda \right) + \int dHP(H) \left\{ \frac{1}{q-1} P^{q-1}(H) \left[ -1 + (1-q)\alpha (\text{tr} H^2 - \mu) \right] + \lambda \right\}. \quad (7.5)$$

Quando a entropia é máxima, dizemos que possui um valor estacionário com relação às variações  $\delta P$ , ou seja,  $\delta F = 0$  para qualquer variação infinitesimal  $\delta P$ . Sendo assim,

$$\delta F = \int dH \delta P(H) \left\{ \frac{1}{q-1} P^{q-1}(H) \left[ -1 + (1-q)\alpha (\text{tr} H^2 - \mu) \right] + \lambda \right\} = 0.$$

Como a equação acima é verdadeira para *qualquer* variação infinitesimal  $\delta P(H)$ , concluímos que

$$\frac{1}{q-1} P^{q-1}(H) \left[ -1 + (1-q)\alpha (\text{tr} H^2 - \mu) \right] = -\lambda,$$

e que, portanto,

$$P(H) = [(q-1)\lambda]^{-\frac{1}{q-1}} \left[ 1 + (q-1)\alpha (\text{tr} H^2 - \mu) \right]^{\frac{1}{1-q}},$$



ou seja,

$$P(H) = \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{\frac{1}{1-q}} \left(\frac{1}{(q-1)} - \alpha\mu + \alpha \operatorname{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}}.$$

Podemos escrever a equação acima numa forma mais conveniente fazendo

$$\lambda = \frac{1}{(q-1)} - \alpha\mu, \quad (7.6)$$

o que nos leva à

$$P(H; \lambda, \alpha) = \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda} \operatorname{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}}. \quad (7.7)$$

As formas generalizadas dos ensembles Gaussianos Unitário e Simplético podem ser obtidas a partir de uma generalização trivial da equação (7.7), dada por

$$P(H; \lambda, s) = K_N^{-1} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} \operatorname{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}}. \quad (7.8)$$

Na expressão acima,  $K_N$  é a constante que normaliza a distribuição e  $\beta$  faz o papel da grandeza termodinâmica relacionada com o inverso da temperatura. O parâmetro  $s$  é o mesmo parâmetro de escala discutido no capítulo 5.

Na seção 4.2, discutimos a transformação que leva a distribuição  $P(H)$ , para uma matriz aleatória  $H$ ,  $N \times N$ , real e simétrica, na distribuição conjunta  $P(E_1, \dots, E_N)$  de seus  $N$  autovalores.

A independência do traço de uma matriz sobre a base na qual ela é descrita nos permitiu substituir diretamente o traço de  $H^2$  pela soma  $\sum E_k^2$ , e o determinante Jacobiano da transformação nos forneceu a relação<sup>2</sup>

$$dH = 2^{\beta N(N-1)/4} \prod_{i < j} |E_j - E_i|^\beta \prod_{i=1}^N dE_i. \quad (7.9)$$

Esta mesma transformação aplicada à (7.8) nos leva à forma generalizada da distribuição conjunta dos autovalores das matrizes pertencentes aos ensembles Gaussianos:

$$P(E_1, \dots, E_N; \lambda, s) = Z_N^{-1} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} \sum_{k=1}^N E_k^2\right)^{\frac{1}{1-q}} \prod_{i > j} |E_i - E_j|^\beta. \quad (7.10)$$

---

<sup>2</sup>Ver equações (4.51), (4.52) e a definição (7.18)

Substituindo (7.7) em (7.3), e resolvendo para  $\alpha$ , concluímos que <sup>3</sup>

$$\alpha = \frac{f(\beta)}{2\mu}, \quad (7.11)$$

onde  $f(\beta) = N + \frac{\beta N}{2}(N-1)$  é o número de elementos independentes da matriz. A expressão para o outro multiplicador de Lagrange é obtida substituindo a expressão acima em (7.6), o que nos leva à

$$\lambda = \frac{1}{q-1} - \frac{f(\beta)}{2}. \quad (7.12)$$

Esta expressão para o parâmetro  $\lambda$  possui uma singularidade em  $q = 1$  que divide o domínio das funções de partição em duas regiões com relação ao parâmetro entrópico  $q$ :  $q < 1$  e  $q > 1$ .

## 7.1 O domínio $q < 1$

Neste domínio do parâmetro entrópico  $q$ , a potência  $1/(1-q)$  de (7.10) pertence ao intervalo positivo  $0 < 1/(1-q) < \infty$ . A condição

$$\text{tr}H^2 = \sum E_k^2 < -\frac{\lambda}{s\beta}, \quad (7.13)$$

é necessária para que as densidades de probabilidade  $P(H)$  e  $P(E_1, \dots, E_N, \lambda, s)$  sejam sempre positivas e reais. Para  $q \rightarrow -\infty$ ,  $\lambda \rightarrow -\frac{f(\beta)}{2}$ , tal que

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow -\infty} P(E_1, \dots, E_N, \lambda, s) &= \lim_{q \rightarrow -\infty} Z_N^{-1} \left( 1 + \frac{s\beta}{\lambda} \sum_{k=1}^N E_k^2 \right)^{\frac{1}{1-q}} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta, \\ &= Z_N^{-1} \left( 1 - \frac{2s\beta}{f(\beta)} \sum_{k=1}^N E_k^2 \right)^{+0} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta, \\ &= Z_N^{-1} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta, \end{aligned}$$

que corresponderia justamente à distribuição do ensemble de Legendre<sup>4</sup>, se não fosse pelo fato dos autovalores não estarem mais confinados no intervalo  $-1 < E_k < 1$  (ver eq.(5.65)).

---

<sup>3</sup>Para mais detalhes, ver ref.[18].

<sup>4</sup>Ver seção 5.2.3 .

A referência [18] mostra que este limite leva o ensemble generalizado no chamado “bounded trace ensemble” que segue a estatística de Wigner-Dyson no limite  $N \rightarrow \infty$ . Não entraremos em detalhe quanto a este limite.

Para  $q \rightarrow 1$  temos que  $1/(1-q) \rightarrow +\infty$  e  $\lambda \rightarrow -\infty$ , de forma que

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} P(E_1, \dots, E_N, \lambda, s) &= \lim_{q \rightarrow 1} Z_N^{-1} \left( 1 + \frac{s\beta}{\lambda} \sum_{k=1}^N E_k^2 \right)^{\frac{1}{1-q}} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta, \\ &= Z_N^{-1} e^{-s\beta \sum E_k^2} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta. \end{aligned}$$

Como vimos, esta é justamente a distribuição conjunta para os autovalores dos ensembles Gaussianos, ou na versão polinomial, do ensemble de Hermite<sup>5</sup>. Portanto, o ensemble generalizado retoma os ensembles Gaussianos neste limite recuperando a estatística de Wigner-Dyson. O limite  $q \rightarrow 1$ , na região  $-\infty < q < 1$ , mostra a consistência entre o ensemble generalizado e o formalismo de Tsallis [20], que requer a recuperação da termodinâmica convencional neste limite.

### 7.1.1 A distribuição de um elemento de matriz para $q < 1$

A constante de normalização  $K_N$  para a distribuição das matrizes (expressão (7.8)) pode ser calculada no domínio  $q < 1$  com o auxílio da representação integral da função

$$f(x) = \begin{cases} x^\nu, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad \nu > 0 \quad (7.14)$$

com  $x \in \Re$ , através de sua transformada de Fourier (ver apêndice C)

$$F(\sigma) = \frac{\Gamma(\nu+1)}{(-i)^{\nu+1}} \frac{1}{\sigma^{\nu+1}}. \quad (7.15)$$

Isto nos permite representar a função  $f(x)$  da seguinte forma:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma(\nu+1)}{(-i)^{\nu+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\sigma x}}{\sigma^{\nu+1}} d\sigma. \quad (7.16)$$

---

<sup>5</sup>Ver seção 5.2.2.

Notando que a distribuição (7.8) no domínio  $q < 1$  é uma função que obedece aos critérios de (7.14), podemos representá-la na seguinte forma integral:

$$\left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\sigma(1+\frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2)}}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} d\sigma. \quad (7.17)$$

Com isto estamos aptos a calcular a constante de normalização  $K_N$ :

$$\begin{aligned} K_N &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int dH \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\sigma(1+\frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2)}}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} d\sigma, \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} \int e^{-i\sigma(1+\frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2)} dH, \\ &= 2^{\beta N(N-1)/4} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} \prod_{i,j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dH_{ij} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{ij}^2}, \end{aligned}$$

onde foi utilizada a conveniente definição

$$dH = 2^{\beta N(N-1)/4} \prod_{i,j=1}^N dH_{ij}. \quad (7.18)$$

Calculando o produto de integrais gaussianas,

$$\begin{aligned} \prod_{i,j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dH_{ij} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{ij}^2} &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dH_{11} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{11}^2} \right]^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dH_{12} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} 2H_{12}^2} \right]^{\beta N(N-1)/2}, \\ &= \left( \frac{\pi\lambda}{i\sigma s\beta} \right)^{\frac{N}{2}} \left( \frac{\pi\lambda}{2i\sigma s\beta} \right)^{\frac{\beta N(N-1)}{4}}, \\ &= 2^{-\beta N(N-1)/4} \left( \frac{\pi\lambda}{i\sigma s\beta} \right)^{\frac{f(\beta)}{2}}, \end{aligned}$$

e substituindo na expressão para  $K_N$ , obtemos

$$K_N = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \left( \frac{-\pi\lambda}{-is\beta} \right)^{\frac{f(\beta)}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{-\left(\frac{1}{1-q} - \frac{f(\beta)}{2}\right)+1}}.$$

Como  $\lambda = \frac{1}{q-1} - \frac{f(\beta)}{2} < 0$ , podemos reescrever a expressão acima como

$$\begin{aligned} K_N &= \Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right) \left(-\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(-i)^{-\lambda+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{-\lambda+1}}, \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{\Gamma(1-\lambda)} \left(-\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma(1-\lambda)}{(-i)^{-\lambda+1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma \frac{e^{-i\sigma}}{\sigma^{-\lambda+1}}. \end{aligned}$$

Ao compararmos esta expressão com (7.16), notamos que

$$\frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma(1-\lambda)}{(-i)^{-\lambda+1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma \frac{e^{-i\sigma}}{\sigma^{-\lambda+1}} = f(1) = 1,$$

onde  $f(x)$  é dada pela expressão (7.14), com  $\nu = -\lambda$ . Portanto,

$$K_N = \left(-\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{\Gamma(1-\lambda)} \quad (7.19)$$

Para calcular a distribuição de um elemento de matriz devemos integrar a distribuição dada por (7.8) com relação a todos os elementos de matriz exceto um, que tomaremos como sendo  $H_{11}$ , isto é

$$P(H_{11}; \lambda, s) = \int dH' P(H; \lambda, s) = K_N^{-1} \int dH' \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}},$$

onde

$$dH' = 2^{\beta N(N-1)/4} \prod_{i,j \neq 1,1} dH_{ij}. \quad (7.20)$$

Utilizando a representação integral (7.17), temos

$$P(H_{11}; \lambda, s) = K_N^{-1} 2^{\beta N(N-1)/4} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma(1+\frac{s\beta}{\lambda}H_{11}^2)}}{\sigma^{1/(1-q)+1}} \prod_{i,j \neq 1,1} \int_{-\infty}^{\infty} dH_{ij} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{ij}^2},$$

onde

$$\begin{aligned} \prod_{i,j \neq 1,1} \int_{-\infty}^{\infty} dH_{ij} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{ij}^2} &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dH_{22} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} H_{22}^2} \right]^{N-1} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dH_{12} e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} 2H_{12}^2} \right]^{\beta N(N-1)/2}, \\ &= 2^{-\beta N(N-1)/4} \left(\frac{\pi\lambda}{i\sigma s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
P(H_{11}; \lambda, s) &= K_N^{-1} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma\left(1+\frac{s\beta}{\lambda}H_{11}^2\right)}}{\sigma^{1/(1-q)+1}} \left(\frac{-\pi\lambda}{-i\sigma s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}}, \\
&= K_N^{-1} \Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right) \left(\frac{-\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}} \frac{1}{2\pi(-i)^{-\lambda-1/2+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma\left(1+\frac{s\beta}{\lambda}H_{11}^2\right)}}{\sigma^{-\lambda-1/2+1}}.
\end{aligned}$$

Substituindo a expressão (7.19) para  $K_N$  e utilizando (7.14) e (7.16), concluímos que

$$P(H_{11}; \lambda, s) = \begin{cases} \sqrt{-\frac{s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\lambda)} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} H_{11}^2\right)^{-\lambda-1/2}, & |H_{11}| < \sqrt{-\frac{\lambda}{s\beta}} \\ 0 & , \quad |H_{11}| > \sqrt{-\frac{\lambda}{s\beta}} \end{cases}, \quad (7.21)$$

e repetindo todo o procedimento para um elemento de matriz fora da diagonal, por exemplo  $H_{12}$ , obtemos

$$P(H_{12}; \lambda, s) = \begin{cases} \sqrt{-\frac{2s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\lambda)} \left(1 + \frac{2s\beta}{\lambda} H_{12}^2\right)^{-\lambda-1/2}, & |H_{12}| < \sqrt{-\frac{\lambda}{2s\beta}} \\ 0 & , \quad |H_{12}| > \sqrt{-\frac{\lambda}{2s\beta}} \end{cases}. \quad (7.22)$$

### 7.1.2 A função de partição para o domínio $q < 1$

Para calcular a função de partição devemos impor a normalização da distribuição conjunta dos autovalores, dada pela relação (7.10). Para isto, utilizaremos novamente a representação integral (7.17), substituindo  $tr H^2 = \sum E_k^2$ , o que nos leva à

$$Z_N = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} \int \dots \int e^{-\frac{i\sigma s\beta}{\lambda} \sum E_k^2} \prod_{i>j} |E_i - E_j|^\beta dE_1 \dots dE_N.$$

Fazendo a mudança de variável

$$E_k = \sqrt{\frac{-i\lambda}{\sigma}} z_k,$$

temos que

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{2\pi(-i)^{\frac{1}{1-q}+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{\frac{1}{1-q}+1}} \left(\frac{\sigma}{-i\lambda}\right)^{-\frac{f(\beta)}{2}} \int \dots \int e^{-s\beta \sum z_k^2} \prod_{i>j} |z_i - z_j|^\beta dz_1 \dots dz_N \\ &= \Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right) (-\lambda)^{\frac{f(\beta)}{2}} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(-i)^{-\lambda+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma e^{-i\sigma}}{\sigma^{-\lambda+1}} Z_N^{(G)}. \end{aligned}$$

onde  $Z_N^{(G)}$  é a função de partição dos ensembles Gaussianos. Como  $-\lambda > 0$ , podemos novamente utilizar as relações (7.14) e (7.16) para concluir que

$$Z_N = (-\lambda)^{\frac{f(\beta)}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)}{\Gamma(1-\lambda)} Z_N^{(G)}. \quad (7.23)$$

Assim como nos ensembles Gaussianos, com o objetivo de obter uma termodinâmica extensiva, devemos introduzir uma constante  $C_N$  que multiplica a função de partição e que altera apenas a origem da energia livre, uma vez que não depende de  $\beta$ . Devemos também ajustar a origem da energia do sistema subtraindo seu valor mínimo  $W_0$ , que corresponde ao valor assintótico para  $\langle W \rangle$  no limite  $\beta \rightarrow \infty$ , segundo as relações (5.38) e (5.39).

A energia livre resultante para o sistema extensivo é então dada pela relação (5.40), reproduzida abaixo:

$$F_N(\beta) = -\frac{1}{N} \left[ \frac{1}{\beta} \ln[C_N Z_N(\beta)] + W_0 \right].$$

Podemos calcular a energia mínima  $W_0$  substituindo o termo não Gaussiano de (7.23) na expressão acima, tomando o limite  $\beta \rightarrow \infty$  e igualando a zero. Portanto,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} F_N^q(\beta) = -\frac{1}{N} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[ \frac{\ln(C_N)}{\beta} + \frac{\ln[Z_N^q(\beta)]}{\beta} + W_0 \right] = 0,$$

onde o sobre-índice  $q$  indica que apenas a parte não gaussiana de (7.23) está sendo considerada.

O termo dependente de  $C_N$  vai a zero, uma vez que  $C_N$  não depende de  $\beta$ , e

$$\ln[Z_N^q(\beta)] \approx \frac{f(\beta)}{2} \ln(-\lambda) - \ln[\Gamma(1-\lambda)],$$

para valores de  $\beta$  muito grandes, lembrando que o parâmetro  $q$  sempre é mantido fixo neste domínio. Temos ainda que

$$-\lambda \rightarrow \frac{\beta N}{4}(N-1)$$

quando  $\beta \rightarrow \infty$ .

Sendo assim,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \left[ \frac{N}{2} + \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] \ln \left[ \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] - \ln \Gamma \left[ 1 + \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] \right\} + W_0 = 0.$$

Utilizando a expansão de Stirling (relação (5.42)), temos que

$$\begin{aligned} W_0 &= - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ \left[ \frac{N}{2} + \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] \ln \left[ \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta N}{4}(N-1) \ln \left[ \frac{\beta N}{4}(N-1) \right] + \frac{\beta N}{4}(N-1) \right\} \\ W_0 &= - \frac{N(N-1)}{4}. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Tomemos agora o limite  $N \rightarrow \infty$  para a função de partição por nível (expressão (5.40)). Neste limite,  $-\lambda \approx f(\beta)/2$  e

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} F_N^q(\beta) &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\ln(C_N)}{N\beta} + \frac{\ln[Z_N^q(\beta)]}{N\beta} - \frac{(N-1)}{4} \right\} \\ &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\ln(C_N)}{N\beta} + \frac{f(\beta)}{2N\beta} \ln \left( \frac{f(\beta)}{2} \right) - \frac{1}{N\beta} \ln \left[ \Gamma \left( 1 + \frac{f(\beta)}{2} \right) \right] - \frac{(N-1)}{4} \right\}, \end{aligned}$$

de onde, novamente expandindo de acordo com a fórmula de Stirling, concluímos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F_N^q(\beta) = \frac{\ln(C_N)}{N\beta} + \frac{N}{2N\beta},$$

e que a escolha conveniente para  $C_N$ , que nos leva a uma termodinâmica extensiva, deve ser

$$C_N = e^{-\frac{N}{2}}. \quad (7.25)$$

Esta escolha não apenas elimina a dependência em  $N$  do limite termodinâmico, da parte não gaussiana da energia livre por nível, mas também



faz com que a termodinâmica do domínio  $q < 1$  seja idêntica à dos ensembles Gaussianos, ou seja,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F_N(\beta) = -\frac{1}{N\beta} \ln [Z_N^{(G)}(\beta)] \equiv F^{(G)}(\beta).$$

Portanto, neste domínio do parâmetro entrópico de Tsallis, o ensemble generalizado de Pertuola-Pato possui um espectro com as mesmas propriedades termodinâmicas dos ensembles Gaussianos.

## 7.2 O domínio $q > 1$

Neste domínio do parâmetro entrópico  $q$ , a potência  $1/(1 - q)$  de (7.10) assume apenas valores negativos, ou seja,  $1/(1 - q) < 0$ . De acordo com a expressão (7.12),  $\lambda$  tende a  $+\infty$  quando  $q \rightarrow 1$  e uma inversão de sinal deve ocorrer à medida que  $q$  torna-se cada vez maior. Da mesma forma que a restrição (7.13) faz-se necessária no domínio  $q < 1$  para que as expressões das densidades de probabilidade mantenham-se reais, no domínio  $q > 1$ , como veremos, a restrição  $\lambda > 0$  deverá ser imposta com a finalidade de manter as expressões para as distribuições sempre definidas. Isto implica em um valor de corte para o parâmetro entrópico, que denotaremos por  $q_{max}$ .

Portanto, o parâmetro a ser fixado neste domínio deve ser  $\lambda$  e não  $q$ , uma vez que, de acordo com (7.12),  $\lambda$  depende tanto de  $q$  quanto de  $N$ . Todos os limites termodinâmicos devem ser tomados com  $\lambda$  fixo, permitindo que  $q$  aproxime-se de um enquanto  $N \rightarrow \infty$  de modo a manter a expressão (7.12) constante.

### 7.2.1 A distribuição de um elemento de matriz para $q > 1$

A constante de normalização de (7.8) pode ser calculada neste domínio com o auxílio da função Gama, se notarmos que através dela temos a seguinte representação integral

$$\left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2\right)^{\frac{1}{1-q}} = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} \text{tr} H^2}, \quad (7.26)$$

o que nos leva à seguinte expressão para a constante de normalização:

$$K_N = \int dH \left( 1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2 \right)^{\frac{1}{1-q}} = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int dH \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} \text{tr} H^2}.$$

Novamente utilizando a conveniente definição (7.18) para o diferencial  $dH$ , obtemos

$$K_N = \frac{2^{\beta N(N-1)/4}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} \prod_{i,j} \int dH_{ij} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} H_{ij}^2}.$$

Como as matrizes possuem  $f(\beta) = N + \frac{\beta N}{2}(N-1)$  elementos independentes, as integrais gaussianas se separam em  $N$  integrais referentes aos elementos da diagonal, com as gaussianas dadas por  $\exp[(-s\beta\xi/\lambda)H_{ii}^2]$ , e  $\frac{\beta N}{2}(N-1)$  integrais referentes aos elementos de fora da diagonal, com as gaussianas dadas por  $\exp[(-s\beta\xi/\lambda)2H_{ij}^2]$ , com  $i \leq j$ . Desta forma, temos que

$$\begin{aligned} K_N &= \frac{2^{\beta N(N-1)/4}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} \left( \frac{\pi\lambda}{s\beta\xi} \right)^{\frac{f(\beta)}{2}} 2^{-\beta N(N-1)/4}, \\ K_N &= \frac{\left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} \left( \frac{1}{\xi} \right)^{\frac{f(\beta)}{2}}, \\ K_N &= \frac{\left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-\frac{f(\beta)}{2}-1}. \end{aligned}$$

Substituindo a forma explícita de  $\lambda$ , dada pela relação (7.12), concluímos que

$$K_N = \frac{\left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\lambda-1},$$

ou seja,

$$K_N = \int dH \left( 1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2 \right)^{\frac{1}{q-1}} = \left( \frac{\pi\lambda}{s\beta} \right)^{f(\beta)/2} \frac{\Gamma(\lambda)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}. \quad (7.27)$$

O limite superior para o parâmetro entrópico  $q$ , neste domínio, está vinculado à dimensão  $N$  da matriz devido à relação (7.27), que devido à função Gama, impõe que  $\lambda > 0$ . De acordo com (7.12), isto implica na desigualdade

$$\frac{1}{q-1} > \frac{f(\beta)}{2},$$

ou seja,

$$q < q_{max} \equiv 1 + \frac{2}{f(\beta)}. \quad (7.28)$$

Portanto, o domínio  $q > 1$  está restrito ao intervalo  $]1, q_{max}[$ .

A distribuição para um único elemento de matriz pode ser calculada neste domínio através do mesmo método utilizado para o cálculo da normalização  $K_N$ , com o auxílio da representação integral da distribuição generalizada, dada por (7.26), integrando-se sobre todos os elementos de matriz exceto um, que tomaremos como sendo o elemento  $H_{11}$ . Sendo assim,

$$P(H_{11}) = K_N^{-1} \int dH' \left( 1 + \frac{s\beta}{\lambda} \text{tr} H^2 \right)^{\frac{1}{1-q}},$$

onde

$$dH' = 2^{\beta N(N-1)/4} \prod_{i,j \neq 1,1} dH_{ij}.$$

Utilizando (7.26), reescrevemos a distribuição na seguinte forma,

$$\begin{aligned} P(H_{11}) &= \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int dH' \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} \sum H_{ij}^2}, \\ &= 2^{\beta N(N-1)/4} \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} H_{11}^2} \prod_{i=2}^N \int dH_{ii} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} H_{ii}^2} \prod_{i < j} \int dH_{ij} e^{-\frac{2s\beta\xi}{\lambda} H_{ij}^2}, \end{aligned}$$

e como existem  $\beta N(N-1)/2$  elementos independentes fora da diagonal, temos

$$\begin{aligned} P(H_{11}) &= 2^{\beta N(N-1)/4} \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} H_{11}^2} \prod_{i=1}^{N-1} \left( \frac{\pi\lambda}{s\beta\xi} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{i=1}^{\beta N(N-1)/2} \left( \frac{\pi\lambda}{2s\beta\xi} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ &= \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} e^{-\frac{s\beta\xi}{\lambda} H_{11}^2} \left( \frac{\pi\lambda}{s\beta\xi} \right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}}, \end{aligned}$$

lembrando que  $f(\beta) = N + \beta N(N - 1)/2$  é o número de elementos estatisticamente independentes da matriz. Com isto,

$$P(H_{11}) = \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi\left(1+\frac{s\beta}{\lambda}H_{11}^2\right)} \xi^{\frac{1}{q-1}-\frac{f(\beta)}{2}+\frac{1}{2}-1},$$

e utilizando a relação (7.12), temos que

$$P(H_{11}) = \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi\left(1+\frac{s\beta}{\lambda}H_{11}^2\right)} \xi^{\lambda+\frac{1}{2}-1}.$$

Fazendo a mudança de variável

$$\eta = \xi \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} H_{11}^2\right),$$

obtemos

$$\begin{aligned} P(H_{11}) &= \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} H_{11}^2\right)^{-\lambda-\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\eta e^{-\eta} \eta^{\lambda+\frac{1}{2}-1}, \\ &= \frac{K_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(\frac{\pi\lambda}{s\beta}\right)^{\frac{f(\beta)-1}{2}} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} H_{11}^2\right)^{-\lambda-\frac{1}{2}} \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

Substituindo a expressão (7.27) para a normalização  $K_N$ , chegamos finalmente à distribuição de um único elemento de matriz do ensemble generalizado em termos dos parâmetros  $\lambda$  e  $s$ :

$$P(H_{11}; \lambda, s) = \sqrt{\frac{s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} H_{11}^2\right)^{-\lambda-\frac{1}{2}}. \quad (7.29)$$

Repetindo o procedimento para um elemento fora da diagonal, digamos, para  $H_{12}$ , obtemos

$$P(H_{12}; \lambda, s) = \sqrt{\frac{2s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)} \left(1 + \frac{2s\beta}{\lambda} H_{12}^2\right)^{-\lambda-\frac{1}{2}}. \quad (7.30)$$

## 7.2.2 A função de partição para o domínio $q > 1$

Utilizando o mesmo procedimento anterior para a densidade de probabilidade conjunta dos autovalores, com o auxílio da função Gama podemos obter uma representação integral para a expressão (7.10), dada por

$$P(E_1, \dots, E_N; \lambda, s) = \frac{Z_N^{-1}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1}} e^{-\frac{s\xi\beta}{\lambda} \sum E_k^2} \prod_{i \leq j} |E_j - E_i|^\beta, \quad (7.31)$$

permitindo que a função de partição seja escrita na seguinte forma:

$$Z_N = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1}} \int_{-\infty}^\infty \dots \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{s\xi\beta}{\lambda} \sum E_k^2} \prod_{i \leq j} |E_j - E_i|^\beta dE_1 \dots dE_N. \quad (7.32)$$

Novamente seguindo os passos de Dyson [10], podemos fazer a analogia entre a relação (7.32) com a função de partição de um gás de Coulomb submetido ao potencial externo (agora variante), dado por

$$W_e = \frac{s\xi}{\lambda} \sum_{k=1}^N x_k^2, \quad (7.33)$$

que depende da posição  $x_i$  de cada carga, e onde o potencial harmônico responsável pelo confinamento flutua de acordo com a distribuição Gama para  $\xi$ , dada por

$$P(\xi) = \frac{e^{-\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1}}}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}. \quad (7.34)$$

O potencial interno de interação entre as cargas não se altera e a energia total do gás é

$$W = \frac{s\xi}{\lambda} \sum_{k=1}^N x_k^2 - \sum_{i < j} \ln |x_i - x_j|. \quad (7.35)$$

Fazendo a mudança de variáveis  $E_k = \sqrt{\frac{\lambda}{\xi}} x_k$  em (7.32), obtemos a expressão fatorada da função de partição

$$Z_N = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi \xi^{\frac{1}{q-1}-1}} \left(\frac{\xi}{\lambda}\right)^{-\frac{f(\beta)}{2}} \int_{-\infty}^\infty \dots \int_{-\infty}^\infty e^{-s\beta \sum x_k^2} \prod_{i \leq j} |x_j - x_i|^\beta dx_1 \dots dx_N, \quad (7.36)$$

de onde identificamos a função de partição dos ensembles Gaussianos (equação (5.8)),

$$Z_N^{(G)} = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-s\beta \sum x_k^2} \prod_{i \leq j} |x_j - x_i|^\beta dx_1 \dots dx_N,$$

(ensemble de Hermite), multiplicada por uma nova parte introduzida pela média sobre a flutuação do potencial de confinamento, dada por

$$Z_N^{(\lambda)} = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^{\frac{1}{q-1}-1} \left(\frac{\xi}{\lambda}\right)^{-\frac{f(\beta)}{2}} = \lambda^{f(\beta)/2} \frac{\Gamma(\lambda)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}. \quad (7.37)$$

$Z_N$  neste domínio é, portanto, dado por

$$Z_N = \lambda^{f(\beta)/2} \frac{\Gamma(\lambda)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} Z_N^{(G)}.$$

É importante ressaltar que a constante  $Z_N$  calculada acima provém da relação (7.10), e que até agora a chamamos de função de partição, porém, tecnicamente o correto seria chamar o conjunto  $Z_N \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)$  de função de partição, uma vez que é este conjunto como um todo que normaliza a distribuição (7.31), como podemos ver facilmente isolando os termos integrais de (7.32).

Sendo assim, redefiniremos a função de partição como sendo simplesmente

$$Z_N = \lambda^{f(\beta)/2} \Gamma(\lambda) Z_N^{(G)}, \quad (7.38)$$

sendo a parte generalizada simplesmente

$$Z_N = \lambda^{f(\beta)/2} \Gamma(\lambda). \quad (7.39)$$

Como vimos anteriormente, deve existir um valor mínimo para a energia, que corresponde à energia do estado fundamental. Para a parte generalizada da função de partição, temos:

$$\begin{aligned} W^{(\lambda)} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( Z_N^{(\lambda)} \right), \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[ \lambda^{\frac{f(\beta)}{2}} \Gamma(\lambda) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \frac{f(\beta)}{2} \ln(\lambda) \right\}, \\
&= -\frac{N(N-1)}{4} \ln(\lambda).
\end{aligned}$$

Portanto, a energia à temperatura zero é

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} W^{(\lambda)} = W_0^{(\lambda)} = -\frac{N(N-1)}{4} \ln(\lambda). \quad (7.40)$$

Para a parte gaussiana, de acordo com o que já discutimos, existe um valor mínimo para a energia dos ensembles<sup>6</sup> associado à temperatura zero do sistema, e vimos que podemos escolher um valor conveniente para o fator de escala  $s$ , tal que  $W_0^{(G)} = 0$ <sup>7</sup>.

Seguindo a mesma metodologia dos ensembles tratados anteriormente, utilizaremos, mais adiante, esta energia mínima para tornar as grandezas termodinâmicas extensivas, evitando divergências no limite  $N \rightarrow \infty$ .

### 7.2.3 A conexão entre o ensemble generalizado Bertuola-Pato e o de Lévy

A conexão com o Ensemble de Matrizes Aleatórias de Lévy é obtido na região  $\frac{2}{2+f(\beta)} + 1 < q < \frac{2}{f(\beta)} + 1$ , para a qual  $0 < \lambda < 1$ , e a distribuição de probabilidades para um elemento de matriz qualquer é dada pela relação (7.29), reescrita abaixo:

$$P(x; \lambda, s) = \sqrt{\frac{s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(\lambda)} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} x^2\right)^{-\lambda - \frac{1}{2}}. \quad (7.41)$$

As funções de Lévy são obtidas a partir da transformada de Fourier de (7.41), convenientemente definida da seguinte forma:

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} P(x) e^{-i2kx} dx. \quad (7.42)$$

Substituindo a forma explícita da distribuição dada por (7.41) na transformada, obtemos

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(\lambda)} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \frac{s\beta}{\lambda} x^2\right)^{-\lambda - \frac{1}{2}} e^{-i2kx} dx,$$

---

<sup>6</sup>Ver seção 5.2, equação (5.62)

<sup>7</sup>Ver equação (5.63)

e, uma vez que a distribuição é uma função par, tomamos apenas a parte cosseno da transformação, reduzindo a expressão acima a

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{s\beta}{\pi\lambda}} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(\lambda)} 2 \int_0^\infty \frac{\cos(2kx)}{\left(1 + \frac{s\beta}{\lambda}x^2\right)^{\lambda + \frac{1}{2}}} dx.$$

Com um pouco de álgebra elementar, podemos reescrever a expressão acima de uma forma mais conveniente:

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\left(k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^\lambda}{\Gamma(\lambda)} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\pi^{\frac{1}{2}}k^\lambda} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^\lambda \int_0^\infty \frac{\cos(2kx)}{\left(\frac{\lambda}{s\beta} + x^2\right)^{\lambda + \frac{1}{2}}} dx.$$

Desta maneira, podemos identificar uma das funções de Bessel modificadas através da seguinte representação integral (ver ref. [9]):

$$K_\lambda\left(2k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right) = \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\pi^{\frac{1}{2}}k^\lambda} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^\lambda \int_0^\infty \frac{\cos(2kx)}{\left(\frac{\lambda}{s\beta} + x^2\right)^{\lambda + \frac{1}{2}}} dx. \quad (7.43)$$

Portanto, em termos da função de Bessel modificada, a transformada de Fourier da distribuição é dada por

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\left(k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^\lambda}{\Gamma(\lambda)} K_\lambda\left(2k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right). \quad (7.44)$$

Como já foi mencionado anteriormente, para  $q > 1$  o parâmetro a ser fixado deve ser  $\lambda$  e, ao tomarmos o limite  $q \rightarrow 1$ ,  $N$  deve crescer a fim de manter  $\lambda$  fixo. No caso dos ensembles gaussianos, vimos que o parâmetro de escala  $s$  deve ser proporcional a  $N$  a fim de manter a escala do espectro independente do tamanho das matrizes. Com essa mesma finalidade, tomaremos  $s \propto N$  também no ensemble generalizado, e isto faz com que  $s \rightarrow \infty$  quando  $q \rightarrow 1$ .

Com  $\lambda$  fixo, ao estudarmos o limite  $q \rightarrow 1$  estaremos lidando com argumentos muito pequenos das funções de Bessel modificadas, ou seja,  $2k\sqrt{\lambda/s\beta} \ll 1$ . Para argumentos pequenos, utilizaremos a expansão da função de Bessel modificada até o segundo termo. A forma da expansão depende do valor de  $\lambda$  da seguinte forma (ver apêndice D):

$$K_\lambda(z) \approx \frac{\Gamma(\lambda)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\lambda} \left[1 - \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2\lambda}\right]$$



$$\approx \frac{\Gamma(\lambda)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\lambda} e^{-\frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)}\left(\frac{z}{2}\right)^{2\lambda}}, \text{ para } 0 < \lambda < 1, \quad (7.45)$$

$$\begin{aligned} K_\lambda(z) &\approx \frac{\Gamma(\lambda)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\lambda} \left[1 - \frac{\Gamma(\lambda-1)}{\Gamma(\lambda+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^2\right] \\ &\approx \frac{\Gamma(\lambda)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\lambda} e^{-\frac{\Gamma(\lambda-1)}{\Gamma(\lambda+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^2}, \text{ para } 1 < \lambda < \infty. \end{aligned} \quad (7.46)$$

Com isto, vemos que o limite  $q \rightarrow 1$  da transformada de Fourier da distribuição de um elemento de matriz do ensemble generalizado é na verdade um limite singular que depende do parâmetro  $\lambda$ . No caso em que  $\lambda > 1$ , através da expressão (7.46), vemos que a transformada aproxima-se de uma gaussiana à medida que  $q$  aproxima-se de 1, ou seja,

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Gamma(\lambda-1)}{\Gamma(\lambda+1)}\left(k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^2}, \quad (7.47)$$

e uma vez que a transformada de Fourier de uma função gaussiana gera uma nova função também gaussiana, concluímos que a própria distribuição assume um comportamento normal. Isto quer dizer que o comportamento de (7.29) aproxima-se do comportamento normal das distribuições dos ensembles Gaussianos, ou seja, a termodinâmica do espectro aproxima-se da termodinâmica convencional, como comumente espera-se da termodinâmica de Tsallis neste limite.

No entanto, no outro domínio do parâmetro  $\lambda$ , o limite  $q \rightarrow 1$  não faz com que a transformada de Fourier da distribuição recaia sobre uma gaussiana, mas sim sobre a função (ver (7.45))

$$\mathcal{F}\{P(x; \lambda, s)\}(k) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)}\left(k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^{2\lambda}}. \quad (7.48)$$

A distribuição de um elemento de matriz que encontramos para  $q \rightarrow 1$ , neste domínio do parâmetro  $\lambda$ , é expressa em termos da transformada inversa de Fourier, dada por

$$P(x; \lambda, s) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)}\left(k\sqrt{\frac{\lambda}{s\beta}}\right)^{2\lambda}} \cos(2kx) dk,$$

onde fazendo a mudança de variáveis  $t = k\sqrt{s\beta/\lambda}$ , obtemos

$$P(x; \lambda, s) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{s\beta}{\lambda}} \int_0^\infty e^{-\frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)} t^{2\lambda}} \cos\left(2\sqrt{\frac{s\beta}{\lambda}} xt\right) dt. \quad (7.49)$$

Ao compararmos com a função de Lévy,

$$L_\sigma(y, \sigma, \Lambda) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\Lambda t^\sigma} \cos(yt) dt, \quad (7.50)$$

podemos concluir que

$$P(x; \lambda, s) = \sqrt{\frac{s\beta}{\lambda}} L_{2\lambda}\left(2\sqrt{\frac{s\beta}{\lambda}} x, 2\lambda, \frac{\Gamma(1-\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)}\right). \quad (7.51)$$

Mostramos desta forma que o ensemble generalizado de Bertuola-Pato, criado a partir da utilização do formalismo de Tsallis para a termodinâmica de espectros, pode ser utilizado para estudar a transição entre os regimes Gaussiano e de Lévy das matrizes aleatórias, através da variação do parâmetro fixo  $\lambda$ .

Assim como no ensemble estudado no capítulo anterior, cuja termodinâmica transita entre a termodinâmica convencional dos ensembles Gaussianos e uma nova oriunda da função de partição calculada com a função pêso de Stieltjes, numa espécie de *transição de fase*, no ensemble generalizado presenciamos o mesmo tipo de *transição*, porém evidente do ponto de vista das próprias matrizes aleatórias, e não apenas do ponto de vista das respectivas grandezas termodinâmicas, como no caso anterior.

## 7.2.4 Grandezas termodinâmicas

Uma vez que a função de partição é a dada pela função de partição dos ensembles Gaussianos vezes a contribuição da flutuação do potencial de confinamento, ou seja, a parte generalizada da função de partição denotada por  $Z_N^{(\lambda)}$ , todas as grandezas termodinâmicas possuirão dois termos; um referente aos ensembles Gaussianos que se somará a outro referente ao termo generalizado. As expressões para as partes gaussianas são as mesmas apresentadas em (5.45), (5.46), (5.47) e (5.48), e as denotaremos por  $F^{(G)}(\beta)$  (energia livre por nível),  $U^{(G)}(\beta)$  (energia média por nível),  $S^{(G)}(\beta)$  (entropia por nível) e  $C^{(G)}(\beta)$  (calor específico por nível), respectivamente.

Portanto, podemos ignorar a parte gaussiana por enquanto e nos concentrar apenas em  $Z_N^{(\lambda)}$ , dado pela relação (7.39). A parte generalizada da energia livre por nível é obtida a partir de

$$F_N^{(\lambda)}(\beta) = -\frac{1}{N\beta} \ln [Z_N^{(\lambda)}] - \frac{W_0^{(\lambda)}}{N}, \quad (7.52)$$

considerando o limite termodinâmico  $N \gg 1$ . Portanto,

$$\begin{aligned} F_N^{(\lambda)}(\beta) &= -\frac{f(\beta)}{2N\beta} \ln(\lambda) - \frac{1}{N\beta} \ln[\Gamma(\lambda)] + \frac{N-1}{4} \ln(\lambda), \\ &= -\frac{1}{2N\beta} \left( N + \frac{\beta N(N-1)}{2} \right) \ln(\lambda) - \frac{1}{N\beta} \ln[\Gamma(\lambda)] + \frac{N-1}{4} \ln(\lambda), \\ &= -\frac{1}{2\beta} \ln(\lambda) - \frac{1}{N\beta} \ln[\Gamma(\lambda)]. \end{aligned}$$

A energia livre por partícula, no limite  $N \rightarrow \infty$ , é então dada por

$$F(\beta) = -\frac{1}{2\beta} \ln(\lambda) + F^{(G)}(\beta). \quad (7.53)$$

A energia interna por nível é dada por

$$\begin{aligned} U(\beta) &= F(\beta) + \beta \frac{\partial F(\beta)}{\partial \beta}, \\ &= -\frac{1}{2\beta} \ln(\lambda) - \frac{1}{N\beta} \ln[\Gamma(\lambda)] + \beta \left\{ \frac{1}{2\beta^2} \ln(\lambda) + \frac{1}{N\beta^2} \ln[\Gamma(\lambda)] \right\} + U^{(G)}(\beta), \\ &= U^{(G)}(\beta), \end{aligned} \quad (7.54)$$

a entropia por nível, por

$$\begin{aligned} S(\beta) &= \beta^2 \frac{\partial F(\beta)}{\partial \beta} \\ &= \beta^2 \left\{ \frac{1}{2\beta^2} \ln(\lambda) + \frac{1}{N\beta^2} \ln[\Gamma(\lambda)] \right\} + S^{(G)}(\beta), \\ &= \frac{1}{2} \ln(\lambda) + \frac{1}{N} \ln[\Gamma(\lambda)] + S^{(G)}(\beta), \end{aligned}$$

que no limite  $N \rightarrow \infty$  torna-se

$$S(\beta) = \frac{1}{2} \ln(\lambda) + S^{(G)}(\beta), \quad (7.55)$$

e o calor específico por nível, por

$$C(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = C^{(G)}. \quad (7.56)$$

O limite singular do parâmetro de Tsallis comentado na seção anterior, quando  $N \rightarrow \infty$  e  $q \rightarrow 1$ , manifesta-se nas grandezas termodinâmicas através do termo  $\log(\lambda)$  que aparece nas expressões da energia livre e da entropia. Na região das matrizes de Lévy, onde  $0 < \lambda < 1$ , a constante  $\log(\lambda)$  assume um sinal negativo, ao passo que na região gaussiana  $\lambda > 1$  o sinal é positivo. Esta é a principal diferença das grandezas termodinâmicas das duas regiões.

Podemos interpretar  $\lambda = 1$  como um ponto crítico de uma transição de fase, onde o regime de Lévy e o regime Gaussiano se sobrepõem e todas as grandezas termodinâmicas se igualam às do ensemble Gaussiano.

# Capítulo 8

## Conclusões

Ao longo de todo este trabalho, a preocupação com uma exposição auto-consistente da teoria e dos métodos empregados nos cálculos fez-se presente devido, em grande parte, à falta de livros e outros materiais didáticos a respeito deste assunto. Grande parte do conhecimento a respeito dos assuntos abordados nesta tese não se encontra reunida ou colecionada em nenhum livro, estando dispersa nas mais variadas revistas científicas, o que traz uma certa dificuldade para a leitura deste trabalho.

A escolha por uma redação tão auto-consistente quanto possível trouxe a este trabalho uma riqueza matemática que se estende a domínios não diretamente relacionado ao tema principal, mas cujos resultados são tão valiosos quanto os obtidos especificamente para o projeto de pesquisa. Muitos tópicos relacionados à matemática aplicada foram desenvolvidos ou reproduzidos neste trabalho com a finalidade de mantê-lo auto-consistente. Isto engloba, principalmente, todos os apêndices e todo o conhecimento a respeito dos polinômios ortogonais contido no capítulo 5.

Uma das principais fontes de conhecimento utilizadas neste projeto, citada como referência [4], é o clássico (e mais completo) livro sobre matrizes aleatórias de Madan Lal Mehta, “Random Matrices”. Em sua última edição (3ª ed., Elsevier academic press, 2004), o livro traz uma atualização extremamente relevante para termodinâmica de espectros, o capítulo 17, cuja tradução do título é “Integral de Selberg e Suas Conseqüências”. A integral de Selberg possibilitou o cálculo analítico da função de partição dos ensembles Gaussianos, o que nas edições anteriores era feito de forma intuitiva. Com a integral de Selberg original, Mehta traz, ainda no capítulo 17, várias formas alternativas da integral obtidas através de escolhas conveniente para

alguns parâmetros e mudanças de variáveis, introduzindo assim os ensembles relacionados aos polinômios ortogonais clássicos ao calcular as funções de partição para os pesos de Jacobi, Gegenbauer, Legendre, Tchebichev, Laguerre e Hermite, este último estando diretamente relacionado com os ensembles Gaussianos.

A referência [4] mostra que todas estas funções de partição são obtidas a partir da função de partição do ensemble de Jacobi e sugere que a termodinâmica deve ser a mesma para todos estes ensembles no limite termodinâmico. A verificação deste fato pode ser encontrada na referência [14], onde o formalismo e a metodologia empregados por Mehta são estendidos explicitamente para cada ensemble citado acima. Com o objetivo de tornar a termodinâmica extensiva, calcula-se o valor mínimo da função de partição e divide-se a função de partição por este valor a fim de obter a normalização correta.

No capítulo 5 desta tese, alguns resultados são reproduzidos com o propósito de comparação, e a termodinâmica do ensemble de Jacobi é inteiramente desenvolvida, utilizando o método apresentado em [4, 14] para minimizar a energia do sistema. Os resultados obtidos para os valores mínimos das energias referentes os ensembles de Jacobi e Hermite, mais especificamente, as expressões (5.37) e (5.58) respectivamente, foram calculados da maneira tradicional apresentada por Mehta, encontrando o conjunto de valores para o espectro que minimiza a energia (ver seção 5.2), e também diretamente através do formalismo termodinâmico, que requer que este mínimo seja igual ao valor da energia média no limite  $\beta \rightarrow \infty$ , ou seja,  $W_0 = -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z_N(\beta)]$  (ver seção 5.3). Todos os valores coincidiram com os apresentados por [14] e por isso o cálculo explícito do limite para o caso de Jacobi foi omitido da tese. Detalhes do cálculo para o caso de Hermite pode ser encontrado na seção 5.3.

No entanto, a metodologia empregada por [4] e, posteriormente, por [14], e também empregada neste trabalho para o cálculo de  $W_0$ , falha para o ensemble de Legendre. Este fato é discutido na seção 5.2.3, onde concluímos que, para o ensemble de Legendre, não é possível encontrar um conjunto de valores para o espectro que minimize a função de partição, sendo o procedimento termodinâmico a única maneira de tornar a o ensemble de Legendre extensivo. A forma explícita do valor mínimo da energia do ensemble de Legendre, calculado através do procedimento termodinâmico, é dada pela relação (5.70). Do mais, verificou-se que a termodinâmica do ensemble de

Jacobi é, de fato, universal para todos os outros ensembles relacionados aos polinômios ortogonais clássicos, inclusive para o ensemble de Hermite, ou seja, para os ensembles Gaussianos, exceto para uma classe de polinômios ortogonais, também considerados clássicos de acordo com Szegö e Shohat nas referências [7] e [8], respectivamente, cujo peso é dado pela distribuição lognormal: os chamados polinômios de Stieltjes-Wigert.

O ensemble gerado através da função peso de Stieltjes é o tema do capítulo 6, onde foi introduzido um ensemble que depende de um certo parâmetro  $s$  que, se tomado como sendo muito pequeno, faz com que a termodinâmica recaia na termodinâmica dos ensembles Gaussianos ( $s$  volta a ser o parâmetro de escala do espectro), e que, se tomado muito grande (tomamos sempre  $s \propto N$  no limite termodinâmico), faz com que o ensemble recaia exatamente sobre o ensemble de Stieltjes. Um resultado interessante é o fato do espectro do ensemble de Stieltjes ser composto por valores que flutuam de acordo com uma distribuição gaussiana em torno de pontos igualmente espaçados, porém com variância muito menor que a distância média entre dois valores consecutivos do espectro. Esta é uma propriedade característica dos cristais, que arranjam seus átomos de forma organizada, flutuando em torno de posições de equilíbrio rígidas do ponto de vista de sua estrutura geométrica. É uma analogia muito interessante para este tipo de análise, introduzida primeiramente por Dyson [10, 11, 12], que comparou o espectro dos ensembles Gaussianos de Wigner ao gás de Coulomb. No ensemble de Stieltjes, a analogia correta se faz com um “cristal” ao invés de um gás, de acordo com a expressão (6.9) e com a discussão subsequente.

Novas expressões para as grandezas termodinâmicas foram encontradas para o ensemble de Stieltjes, compondo desta forma o contra-exemplo da universalidade da termodinâmica provinda dos polinômios ortogonais, no limite termodinâmico. Este resultado é uma novidade pois rompe com o resultado intuitivo de que todos os polinômios ortogonais geram ensembles com a mesma termodinâmica no limite de espectros muito grandes. Além do mais, a função peso destes polinômios é, como já foi dito, uma distribuição bem conhecida, a chamada distribuição *lognormal*.

Estas novas expressões para as grandezas termodinâmicas levantam a seguinte questão: “será possível encontrar algum sistema físico real que obedeça à esta termodinâmica”? Na realidade, o ensemble lognormal tem propriedades estatísticas similares às do ensemble proposto na referência [23]. Esse tipo de ensemble pertence a uma classe de ensembles que reproduzem propriedades observadas em sistemas desordenados, em particular as

estatísticas intermediárias universais observadas no ponto crítico da transição metal-isolante [24].

Nesta tese, o ensemble de Stieltjes foi concebido inteiramente do ponto de vista termodinâmico, calculando-se diretamente a função de partição. Isto faz com que não tenhamos nenhuma intuição a respeito de que tipo de distribuição os elementos das matrizes aleatórias devem obedecer para que gerem espectros que possuam esta termodinâmica, assim como acontece para todos os ensembles relacionados aos polinômios ortogonais, exceto para o ensemble de Hermite que está evidentemente relacionado aos ensembles de matrizes gaussianas. Este problema, para o ensemble de Stieltjes, foi abordado na referência [25], onde foi mostrado que a distribuição pouco uniforme destes elementos de matriz dão origem à uma quebra espontânea da invariância rotacional do ensemble.

No capítulo 7, o ensemble generalizado de Bertuola-Pato, introduzido anteriormente em [18, 19], foi estendido para os casos *unitário* e *simplético generalizados*. Este ensemble é fruto da aplicação da termodinâmica generalizada de Tsallis à termodinâmica de espectros, que conseqüentemente passou a depender do parâmetro entrópico de Tsallis  $q$ . Para o domínio  $q < 1$ , verificou-se que a termodinâmica deste ensemble de fato recai sobre a dos ensembles Gaussianos no limite termodinâmico, como sugerido por Bertuola, Pato e Bohigas na referência [18].

Para o domínio  $q > 1$ , mostrou-se que o parâmetro correto a ser fixado para a análise do ensemble é o parâmetro  $\lambda$ , dado pela relação (7.12), ao invés do próprio parâmetro  $q$ . Neste domínio, o gás de Coulomb introduzido à termodinâmica de espectros por Dyson é retomado, porém a convexidade de potencial de confinamento parabólico flutua de acordo com a distribuição Gama, dada por (7.34). A analogia com um sistema termodinâmico real é feita, portanto, com este “super gás de Coulomb” de potencial variante, e os métodos empregados para o desenvolvimento da termodinâmica são essencialmente os mesmos do sistema de Dyson.

As grandezas termodinâmicas permanecem extensivas, porém a energia livre e a entropia por nível passam a depender do parâmetro  $\lambda$ . As expressões da energia interna e do calor específico são exatamente as mesmas dos ensembles Gaussianos.

O parâmetro  $\lambda$  também é crucial no estudo da transição entre a termodinâmica dos ensembles generalizados e dos ensembles Gaussianos. De acordo com o formalismo de Tsallis, a termodinâmica convencional é recuperada quando  $q \rightarrow 1$ , porém para o ensemble generalizado este limite leva



à termodinâmica dos ensembles Gaussianos apenas quando  $\lambda > 1$ . Trata-se de um limite singular que, no caso em que  $0 < \lambda < 1$ , aproxima o ensemble generalizado do ensemble de matrizes aleatórias de Lévy. Todos os detalhes matemáticos desta discussão podem ser encontrados na subseção 7.2.3 .

Por fim, novas expressões para as grandezas termodinâmicas são apresentadas na última subseção do capítulo 7, duas delas compostas por somas de dois termos, um que coincide com as expressões dos ensembles Gaussianos, e outro provindo da flutuação do potencial de confinamento. É de se esperar que as partes não gaussianas das expressões tendam a zero quando  $\lambda > 1$  ao tomarmos o limite  $q \rightarrow 1$ , de acordo com a discussão do parágrafo anterior. Para  $0 < \lambda < 1$ , o limite  $q \rightarrow 1$  deve nos fornecer as expressões para as grandezas termodinâmicas do ensemble de Lévy, porém isto não foi feito de forma explícita neste trabalho.

Todas estas análises sobre a termodinâmica de espectros relacionados aos vários sistemas abordados nesta tese, em comparação com a análise já bem conhecida dos ensembles Gaussianos, contribuíram não somente para o enriquecimento deste segmento da TMA, mas também abriram espaço para a busca de novos sistemas físicos com espectros que se caracterizem através destas novas grandezas termodinâmicas apresentadas.

# Apêndice A

## O método de Box-Müller

Este método é utilizado para gerar números aleatórios com distribuição gaussiana.

Seja  $x_1, x_2, x_3, \dots$ , números que possuem uma distribuição probabilística  $p(x_1, x_2, x_3, \dots)dx_1dx_2dx_3\dots$ , e  $y_1, y_2, y_3, \dots$ , cada um individualmente, funções do conjunto de números  $x_1, x_2, x_3, \dots$ . Então, a distribuição probabilística dos  $y$ 's é:

$$P(y_1, y_2, \dots)dy_1dy_2\dots = P(x_1, x_2, \dots) \left| \frac{\partial(x_1, x_2, \dots)}{\partial(y_1, y_2, \dots)} \right| dy_1dy_2\dots \quad (\text{A.1})$$

Consideremos agora uma transformação entre dois números aleatórios uniformes no intervalo entre 0 e 1, denotados por  $x_1$  e  $x_2$ , da seguinte forma:

$$y_1 = \sqrt{-\frac{1}{\alpha} \ln(x_1)} \cos\left(\frac{\pi}{\alpha} x_2\right) \quad (\text{A.2})$$

$$y_2 = \sqrt{-\frac{1}{\alpha} \ln(x_1)} \sin\left(\frac{\pi}{\alpha} x_2\right) \quad (\text{A.3})$$

onde  $\alpha$  é um número real positivo.

Para obtermos a recíproca desta transformação, basta dividir a equação (A.3) pela (A.2), obtendo assim  $x_2(y_1, y_2)$ , e somar os quadrados destas mesmas equações para obter  $x_1(y_1, y_2)$ :

$$x_1 = e^{-\alpha(y_1^2 + y_2^2)} \quad (\text{A.4})$$

$$x_2 = \frac{\alpha}{\pi} \arctan\left(\frac{y_2}{y_1}\right) \quad (\text{A.5})$$

Como  $x_1$  e  $x_2$  são dois números pertencentes ao intervalo de 0 a 1 conhecidos, utilizando a equação (A.1), temos diretamente que

$$P(y_1, y_2) dy_1 dy_2 = P(x_1, x_2) \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| dy_1 dy_2 \quad (\text{A.6})$$

ou seja, a densidade de probabilidade de  $y_1$  e  $y_2$  é o determinante Jacobiano da transformação recíproca:

$$J = \frac{\partial x_1}{\partial y_1} \frac{\partial x_2}{\partial y_2} - \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \frac{\partial x_2}{\partial y_1}$$

Desenvolvendo a expressão acima, após uma certa álgebra, chegamos ao seguinte resultado:

$$J = - \left( \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha y_1^2} \right) \left( \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha y_2^2} \right) \quad (\text{A.7})$$

O método obtém êxito por ser possível escrever o Jacobiano como o produto de uma função gaussiana que depende somente de  $y_1$  com uma que depende somente de  $y_2$ .

# Apêndice B

## Derivadas de ordem não inteira

Podemos estender a derivada  $n$ -ésima de uma função para valores não inteiros de  $n$  utilizando a representação integral da derivada, obtida através da transformada de Fourier que possui a seguinte propriedade,

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^n f(z)}{dz^n}\right\}(\xi) = (-i\xi)^n \mathcal{F}\{f(z)\}(\xi), \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\mathcal{F}\{f(z)\}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi z} f(z) dz.$$

Aplicando a transformada inversa em (B.1), obtemos a representação integral da  $n$ -ésima derivada de  $f(z)$ :

$$\frac{d^n f(z)}{dz^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-i\xi z} (-i\xi)^n \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\xi z} f(z) \quad (\text{B.2})$$

Como o lado direito da igualdade não impõe nenhuma restrição a  $n$ , podemos tomar  $n = \nu$ , com  $\nu$  não inteiro, definindo a derivada  $\nu$ -ésima de  $f(z)$  através de

$$\frac{d^\nu f(z)}{dz^\nu} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-i\xi z} (-i\xi)^\nu \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\xi z} f(z), \quad (\text{B.3})$$

que vale para toda  $f(z)$  que possua transformada de Fourier.

## Apêndice C

### A transformada de Fourier de (7.14)

Considere a função

$$G(z) = \frac{e^{-izx}}{(z + i\varepsilon)^{\nu+1}}, \quad (\text{C.1})$$

onde  $x \in \mathfrak{R}$ ,  $z \in \mathfrak{S}$ ,  $\nu \in \mathfrak{R}^+$  e  $\varepsilon$  é apenas um parâmetro real necessário para eliminar indeterminações, como veremos a seguir.

Para  $\nu$  inteiro, pela fórmula integral de Cauchy temos que

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} G(z) dz = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} \frac{e^{-izx} dz}{(z + i\varepsilon)^{\nu+1}} = \frac{i}{\nu!} \frac{d^{\nu}}{dz^{\nu}} \left\{ e^{-ixz} \right\}_{z=-i\varepsilon}, \quad (\text{C.2})$$

onde  $\gamma$  pode ser *qualquer* curva fechada no plano complexo que contenha a singularidade  $-i\varepsilon$ .

Em particular, podemos tomar  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ , onde  $\gamma_1 : \{z = \sigma \in \mathfrak{R} \mid -R \leq \sigma \leq R\}$  e  $\gamma_2 : \{z = Re^{-i\theta}, R \in \mathfrak{R} \mid 0 \leq \theta \leq \pi\}$ . Neste contorno,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} G(z) dz &= \frac{1}{2\pi} \int_{-R}^R \frac{e^{-i\sigma x} d\sigma}{(\sigma + i\varepsilon)^{\nu+1}} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{e^{-iRe^{-i\theta}x} (-i)Re^{-i\theta} d\theta}{(Re^{-i\theta} + i\varepsilon)^{\nu+1}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-R}^R \frac{e^{-i\sigma x} d\sigma}{(\sigma + i\varepsilon)^{\nu+1}} - \frac{i}{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{e^{-i(R \cos \theta x + \theta)} e^{-R \sin \theta x} R d\theta}{(Re^{-i\theta} + i\varepsilon)^{\nu+1}} \end{aligned}$$

Para  $x > 0$ , a segunda integral se anula quando  $R \rightarrow \infty$  e

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} G(z) dz = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\sigma x} d\sigma}{(\sigma + i\varepsilon)^{\nu+1}} \equiv f(x).$$

Repare que  $f(x)$  é a transformada inversa de Fourier da função

$$F(\sigma) = \frac{1}{(\sigma + i\varepsilon)^{\nu+1}}, \quad (\text{C.3})$$

e que, pela fórmula integral de Cauchy,

$$f(x) = \frac{-i}{\nu!} \left[ \frac{d^\nu}{dz^\nu} e^{-ixz} \right]_{z=-i\varepsilon}, \quad x > 0, \quad (\text{C.4})$$

$$= \frac{-i}{\nu!} (-ix)^\nu e^{-\varepsilon x}, \quad x > 0. \quad (\text{C.5})$$

A extensão para valores não inteiros de  $\nu$  pode ser feita utilizando a representação integral da derivada (expressão (B.3)), através da qual temos

$$\frac{d^\nu}{dz^\nu} e^{-ixz} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-i\xi z} (-i\xi)^\nu \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\xi z} e^{-ixz}.$$

Utilizando a representação de Fourier da função  $\delta$  de Dirac,

$$\delta(\xi - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i(\xi-x)z},$$

temos que

$$\frac{d^\nu}{dz^\nu} e^{-ixz} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-i\xi z} (-i\xi)^\nu \delta(\xi - x) = e^{-ixz} (-ix)^\nu,$$

que substituindo em (C.4), e generalizando  $\nu!$  através da função gama (ou seja, por  $\Gamma(\nu + 1)$ ), nos leva à

$$f(x) = \frac{-i}{\Gamma(\nu + 1)} (-ix)^\nu e^{-\varepsilon x}, \quad x > 0, \quad (\text{C.6})$$

$$= \frac{(-i)^{\nu+1}}{\Gamma(\nu + 1)} x^\nu e^{-\varepsilon x}, \quad x > 0. \quad (\text{C.7})$$

Tomando o limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , podemos redefinir  $f(x)$  e  $F(\sigma)$  da seguinte forma:

$$f(x) = \begin{cases} x^\nu, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad \nu > 0, \quad (\text{C.8})$$

e

$$F(\sigma) = \frac{\Gamma(\nu + 1)}{(-i)^{\nu+1}} \frac{1}{\sigma^{\nu+1}}, \quad (\text{C.9})$$

onde

$$F(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\sigma x} dx.$$

## Apêndice D

# A expansão das Funções de Bessel Modificadas para pequenos argumentos

A equação diferencial de Bessel é dada por

$$z^2 \frac{d^2 w}{dz^2} + z \frac{dw}{dz} - (z^2 + \nu^2)w = 0. \quad (\text{D.1})$$

As soluções serão denotadas por  $I_{\pm\nu}(z)$  e  $K_\nu(z)$ . A representação em série crescente das soluções  $I_\nu(z)$  é (ver ref.[9])

$$I_\nu(z) = \left(\frac{1}{2}z\right)^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{4}z^2\right)^k}{k! \Gamma(\nu + k + 1)}, \quad (\text{D.2})$$

e  $I_\nu(z)$  e  $I_{-\nu}(z)$  são linearmente independentes, exceto quando  $\nu$  é um inteiro.

A relação entre as soluções  $I_\nu(z)$  e  $K_\nu(z)$  pode ser escrita através da seguinte expressão (ver ref.[9]):

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin(\nu\pi)}, \quad (\text{D.3})$$

e  $K_\nu(z)$  e  $I_\nu(z)$  são linearmente independentes para qualquer valor de  $\nu$ . O lado direito de (D.3) é substituído por seu valor limite quando  $\nu$  é um inteiro ou igual a zero.



Utilizando a relação (D.3), podemos encontrar uma expressão  $K_\nu(z)$  válida para pequenos argumentos através da representação em série das soluções  $I_\nu(z)$ , relação (D.2).

Explicitamente, temos que os primeiros termos de (D.2) são:

$$I_{-\nu}(z) = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}}{\Gamma(1-\nu)} + \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{2-\nu}}{\Gamma(2-\nu)} + \dots ,$$

$$I_\nu(z) = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\Gamma(1+\nu)} + \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{2+\nu}}{\Gamma(2+\nu)} + \dots .$$

Para valores de  $z$  suficientemente pequenos, tais que  $(z/2)^{2+\nu} \approx 0$ , temos que

$$I_{-\nu}(z) - I_\nu(z) \approx \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}}{\Gamma(1-\nu)} + \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{2-\nu}}{\Gamma(2-\nu)} - \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\Gamma(1+\nu)} . \quad (\text{D.4})$$

Se  $2 - \nu > \nu$ , ou seja, para  $0 < \nu < 1$ , desprezaremos  $(z/2)^{2-\nu}$  e

$$I_{-\nu}(z) - I_\nu(z) \approx \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}}{\Gamma(1-\nu)} - \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\Gamma(1+\nu)} = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}}{\Gamma(1-\nu)} \left[ 1 - \frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2\nu} \right] .$$

Utilizando a identidade,

$$\Gamma(1-\nu)\Gamma(\nu) = \frac{\pi}{\sin(\nu\pi)} , \quad (\text{D.5})$$

em conjunto com (D.3), concluímos que

$$K_\nu(z) \approx \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} e^{-\frac{\Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2\nu}} , \text{ para } 0 < \nu < 1 . \quad (\text{D.6})$$

Se  $2 - \nu < \nu$ , ou seja, para  $\nu > 1$ , o termo a ser desprezado em (D.4) deve ser  $(z/2)^\nu$  e

$$I_{-\nu}(z) - I_\nu(z) \approx \frac{\sin(\nu\pi)}{\pi} \Gamma(\nu) \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} + \frac{\sin[(\nu-1)\pi]}{\pi} \Gamma(\nu-1) \left(\frac{z}{2}\right)^{2-\nu}$$

$$\approx \frac{\sin(\nu\pi)}{\pi} \Gamma(\nu) \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} \left[ 1 - \frac{\Gamma(\nu-1)}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^2 \right]$$

Através de (D.3), concluímos que

$$K_\nu(z) \approx \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} e^{-\frac{\Gamma(\nu-1)}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^2} , \text{ para } 1 < \nu < \infty . \quad (\text{D.7})$$

# Referências Bibliográficas

- [1] E. P. Wigner, “Results an Theory of Resonance Absorption”, Conference on Neutron Physics by Time of Flyght, Gatlinburg, 1-2 Nov. 1956.
- [2] E. P. Wigner, “Interpretation of low energy neutron spectroscopy”, International Conference on Neutrons Interactions with the Nucleous, Columbia University, 9-13 Sept. 1957.
- [3] E. P. Wigner, “The probability of the Existence of a Self-Reproducing Unit”, *The Logic of Personal Knowledge: Essays in Honor of Michael Polanyi*, London, Routledge and Kegan Paul Ltd. 1961, reproduced in E. P. Wigner, “Symmetries and Reflections”, Indiana University Press, 1961, reedited by OxBow Press 1979.
- [4] M.L.Mehta, “Random Matrices and Statistical Theory of Energy Levels”.
- [5] Eric W. Weisstein. “Logarithmic Derivative”. From MathWorld—A Wolfram Web Resource.
- [6] William H. Press ... [et al.], “Numerical recipes in C: the art of scientific computing”.
- [7] G. Szegö, “Orthogonal Polynomials”, American Mathematical Society Colloquium Publications **XXIII**, American Mathematical Society (1939).
- [8] J. A. Shohat and J. D. Tamarkin, “The Problem of Moments”, Am. Math. Soc. (1943).
- [9] M. Abramowitz and I. A. Stegun, “Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables”, Wiley-Interscience Publication, John Wiley and Sons (1972).

- [10] F. J. Dyson, “Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems I”, *J. Math. Phys.* **3** 140-156 (1962).
- [11] Freeman J. Dyson, “Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems.II”, *J. Math. Phys.* **3** 157-165 (1962).
- [12] Freeman J. Dyson, “Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems.III”, *J. Math. Phys.* **3** 166-175 (1962).
- [13] J. F. Shriner Jr, M. P. Pato, G. E. Mitchell, A. P. B. Tufaile, “A thermodynamic analysis of energy eigenvalues”, *Nucl. Instr. and Meth. A* **581** (2007) 831.
- [14] T. Nagao and M. Wadati, “Thermodynamics of Particle Systems Related to Random Matrices”, *J. Phys. Soc. Japan* **60** (1991) 1943.
- [15] Y. V. Fyodorov, “Introduction to the Random Matrix Theory: Gaussian Unitary Ensemble and Beyond”, *Recent Perspectives in Random Matrix Theory and Number Theory*, London Mathematical Society, Lecture Note Series 322, Cambridge Univ. Press (2005).
- [16] P. Cizeau and J. P. Bouchaud, “Levy matrices”, *Phys. Rev. E* **50** (1994) 1810.
- [17] E. Bogomolny, O. Bohigas and M. P. Pato, “Distribution of eigenvalues of certain matrix ensembles”, *Phys. Rev. E* **55** (1997) 6707.
- [18] A. C. Bertuola, O. Bohigas and M. P. Pato, “Family of generalized random matrix ensembles”, *Phys. Rev. E* **70** (2004).
- [19] A. C. Bertuola, “Teoria das Matrizes Aleatórias e o Formalismo da Entropia Generalizada”, tese de doutoramento defendida no Instituto de Física da USP, São Paulo (2004).
- [20] E. M. F. Curado and C. Tsallis, “Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics”, *J. Phys. A: Math Gen.* **24** (1991).
- [21] R. Balian, “Random Matrices and Information Theory”, *Nuovo Cimento B* **57** (1968) 183.
- [22] D. Fox and P. B. Kahn, “Higher order spacing distributions for a class of matrix ensembles”, *Phys. Rev. B* **134** (1964) 1151.

- [23] K. A. Muttalib, Y. Chen, M. E. H. Ismail, and V. N. Nocopoulos, “New family of unitary random matrices”, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 471.
- [24] V. E. Kravtsov and K. A. Muttalib, “New class of random matrix ensembles with multifractal eigenvectors”, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1913.
- [25] M. P. Pato, “Spontaneous symmetry breaking in U(N) ensembles with a soft confinement potential”, Phys. Rev. E. **61** (2000) R3291.