

NOTAS DE APOYO A LA INVESTIGACIÓN EN TERMALIZACIÓN DE EIGENESTADOS

Autor:

Irving Iván Gaspar Gregorio

Asesor :

Dr. Miguel Angel Bastarrachea Magnani

Servicio Social

29 de noviembre 2021 al 30 de mayo 2022

Departamento de Física Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Índice

In	Introducción 2				
1.	Geometría y cinemática del espacio fase 1.1. El espacio fase de un sistema mecánico 1.2. Teorema de Liouville 1.3. Teorema de Birkhoff	4 4 6 8			
2.	Problema Ergódico 2.1. Sucesión de sistemas cada vez más aleatorios 2.2. Sistemas Ergódicos 2.3. Sistemas Mezclados (Mixing Systems) 2.3.1. Mezclado Fuerte (Strong Mixing) 2.3.2. Mezclado Débil (Weak Mixing) 2.4. Sistemas Kolmogorov 2.5. Sistemas Bernoulli	 10 12 13 13 14 15 15 15 			
3.	El problema del gas monoatómico 3.1. Termalización	17 20			
4.	Caos Cuántico 4.1. Medidas de caos cuántico	24 25 25 26			
5.	Termalización de Eigenestados (Eigenstates Termalization Hyphotesis, ETH) 5.1. Un nuevo sentido a la Termalización 5.2. Planteamiento de la ETH 5.2.1. Sistemas difusivos en sistemas de una sola partícula 5.2.2. Relación ETH y Termalización 5.2.3. Relación ETH y Teorema Ergódico Cuántico	32 32 34 35 36 37			
Co	onclusión	39			
A.	. Teoría de la medida y su aplicación a sistemas dinámicos	40			
B.	Cálculo de Srednicki	42			

Introducción

El propósito de este texto es exponer el tema de Teoría de Termalización de Eigenestados la cual promete relacionar la dinámica microscópica de sistemas cuánticos con la mecánica estadística. La ETH fue propuesta por Mark Srednicki donde aplicó conceptos de la Teoría de Matrices Aleatorias (Random Matix Theory, RMT) generalizando a un ansatz que llamó Teoría de Termalización de Eigenestados, ETH. Con la finalidad de poder entender esta teoría las presentes notas se dividen en cinco secciones. En la primera sección se introducen los conceptos relacionados con el espacio fase que comúnmente se encuentran en un curso de mecánica teórica, también se exponen dos teoremas muy importantes que sustentarán, en posteriores secciones, al término de termalización, éstos son el Teorema de Liouville y el el teorema de Birkhoff. En la segunda sección se aborda otro concepto clave en la que se sustenta mecánica estadística, la ergodicidad. Dentro de esta sección se hace mención la clasificación de sistemas cada vez más aleatorios, todos ellos contenidos en la jerarquía ergódica, el cual se relaciona de manera estrecha con el término de caos, estos términos están fuertemente cimentados en conceptos matemáticos, específicamente en la teoría de la medida, por tal motivo se ha dedicado una breve introducción a esta teoría en la primera sección del apéndice. En la tercera sección se aborda el problema del gas monoatómico donde se desarrolla el concepto de termalización en su caso clásico y las complicaciones al tratar de describir al gas ideal como un conjunto de partículas puntuales. Posteriormente, en la cuarta sección se exponen las limitaciones de los conceptos previos cuando se trata de aplicarlos a la teoría cuántica. A manera de ejemplo, una limitación es el mismo espacio fase debido al principio de incertidumbre de Heinsenberg. En esta misma sección se amplía el concepto de caos cuántico y se habla sobre dos conjeturas que permiten determinar si un sistema cuántico presenta o no caos, la conjetura de Berry-Tabor y de Bohigas-Giannoni-Schmidt. Además, se dará una breve descripción de una teoría fundamental para entender la ETH, la Teoría de Matrices Aleatorias RTM. Dentro de esta explicación se muestran algunas gráficas donde se comprueban las distribuciones de probabilidad de los dos marcos teóricos de la RTM, el Ensamble Gaussiano Ortogonal y el Ensamble Gaussiano Unitario. En la quinta sección y última está dedicada a la Teoría de Termalización de Eigenestados donde se amplia el término de termalización para englobar a los sistemas cuánticos, se plantean los principios de la teoría y su relación con el ensamble microcanónico, los sistemas difusivos, termalización y la ergodicidad. En la última parte de estas notas se da una breve conclusión donde se mencionan algunos puntos que pretenden ampliar el panorama general de descripción de la ETH.

1. Geometría y cinemática del espacio fase

1.1. El espacio fase de un sistema mecánico

En la mecánica estadística, comúnmente llamada física estadística, es sabido que al describir un sistema termodinámico (como un gas ideal o un gas de Van der Waals) se usa el concepto de microestados, donde a un tiempo arbitrario t, se definen al especificar las posiciones y los momentos de las partículas que lo constituyen. Así, al estado de este sistema lo llamaremos G, el cual tiene 2s grados de libertad (donde s = 3N para un sistema de N partículas en \mathbb{R}^3) que describen los valores de las variables Hamiltonianas $q_1, q_2, ..., q_s; p_1, p_2, ..., p_s$, también llamadas *coordenadas dinámicas* del sistema. Por lo tanto, las ecuaciones de movimiento del sistema en forma canónica son

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$(1)$$

$$(1)$$

Cabe decir que si las ecuaciones que definen a las coordenadas dinámicas no dependen explícitamente del tiempo y si las fuerzas son derivadas de un potencial conservativo, entonces la función Hamiltoniana es igual a la energía del sistema [1]. Además, del sistema de ecuaciones anterior es evidente que

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) = \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$
(2)

Sea ahora un espacio Euclidiano Γ 2s-dimensional cuyos puntos están representados por (q_i, p_i) . A cada estado posible del sistema le corresponderá un único punto del espacio Γ llamado *punto imagen* (que corresponde a un estado microscópico del movimiento del sistema), mientras que al espacio entero Γ lo llamaremos *espacio* fase del sistema, véase la Fig. 1. El movimiento del punto imagen, o conjunto representativo, en un intervalo de tiempo t representa el cambio de estado del sistema, el cual depende de su posición inicial. Además, dicho movimiento del punto imagen describe una curva a lo largo de Γ llamada trayectoria, cuya dirección estará modulada por (\dot{q}_i, \dot{p}_i) , una forma de verlo esquemáticamente es a través de la línea negra de la Fig. 1.

Ahora, si al tiempo t_0 el punto imagen de G está en un punto M_0 del espacio Γ , y a otro tiempo posterior t está en M, entonces M_0 y M están mutuamente determinadas. En el intervalo de tiempo en que el sistema pasa del punto M_0 al M, otro punto distinto del espacio Γ pasa a una nueva posición definida, entonces se dice que todo este espacio es transformado en sí mismo, de manera biyectiva, véase la Fig. 2.



Figura 1: Esta es la representación del espacio fase para el caso de un sólo grado de libertad, su extensión a N grados es un Hiper-espacio 2N dimensional. (a) La línea roja representa una trayectoria cerrada. (b) La línea negra representa una trayectoria cualquiera dentro del espacio fase.



Figura 2: a) Se muestra cómo un punto imagen cambia en el tiempo. b) Se muestra cómo se transforman dos puntos imagen a un t>0. c) Transformación de los puntos del espacio fase de manera biyectiva.

Si se mantiene fijo a t_0 y variamos t arbitrariamente, todo el conjunto de posibles cambios de estado en G estarán representados por una secuencia continua de transformaciones de este espacio hacia sí mismo, generando un movimiento continuo en el espacio Γ , a esto anterior se le conoce como movimiento natural [2]. Se dice que el movimiento natural del espacio fase es estacionario cuando el desplazamiento de algún punto en el espacio Γ en un intervalo Δt sólo depende de la posición inicial y de la longitud del intervalo, y no de la elección de t_0 , lo cual será muy útil en el capítulo dedicado a la ergodicidad. Así, las velocidades de los puntos en Γ en este movimiento sólo dependen de la posición, y no del tiempo, es posible decir que hay un flujo de estados en el espacio fase, que puede ser visto como el campo de velocidades que se estudia en hidrodinámica para el caso estacionario, pero aquí se forman líneas de flujo en el espacio fase.

Un caso muy interesante surge cuando se toma una parte del espacio fase, llámese Γ' contenido en el espacio fase total Γ . Cuando a esta parte primada del espacio fase

se hace variar respecto de t de tal manera que se transforma a sí mismo, esto es, sin cambiar su forma original entonces decimos que Γ' es una parte invariante del espacio fase total. La forma especial del sistema Hamiltoniano (1) tiene como consecuencia el hecho de que no toda transformación continua del espacio fase a sí misma pueda parecer como su movimiento natural, el cual está caracterizado por propiedades especiales formuladas en dos teoremas, tales son el Teorema de Liouville y el de Birkhoff, los cuales se explicarán en las dos secciones siguientes.

1.2. Teorema de Liouville

Decimos que sea M cualquier conjunto medible de Lebesgue (véase Apéndice A) de puntos del espacio fase Γ de un sistema mecánico. Dado un movimiento natural de este espacio, el conjunto M evoluciona a otro conjunto M_t durante un intervalo de tiempo t.

Dicho lo anterior, el teorema de Liouville asegura que la medida del conjunto M_t para cualquier t coincide con la medida del conjunto inicial M, es decir, la medida del conjunto medible de puntos es una invariante del movimiento natural del espacio Γ . Lo cual se reduce a la siguiente expresión.

$$\frac{d\mathfrak{M}M_t}{dt} = 0 \tag{3}$$

donde denotamos la medida de un conjunto A como $\mathfrak{M}A$. Entonces

$$\mathfrak{M}M_t = \int_{M_t} dx_1 \cdots dx_{2s} \tag{4}$$

у

$$x_i = q_i \qquad \qquad x_{s+i} = p_i \tag{5}$$

asegurando que el cambio en el tiempo de la medida a tiempos posteriores de t_0 es cero, lo cual pretende mostrar la invarianza de la medida en el movimiento natural del sistema en el espacio fase Γ .

Demostración La demostración de este teorema se da un muchos libros de mecánica estadística, sin embargo, hay una demostración que es más acorde a los conceptos ocupados en estas notas, para el lector interesado puede consultar [2].

Debido a la alta demanda de conocimiento matemático, específicamente sobre teoría de la medida, es necesario incorporar otra visión de este teorema. Por tal motivo, se considera un volumen arbitrario V en una cierta región relevante del espacio fase, se representa a la superficie del volumen como S. Entonces, la razón en la cual el número representativo de puntos dentro del volumen incrementa en el tiempo es representada por la expresión

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho dV,\tag{6}$$

donde dV muestra la cantidad de número representativos dentro de un elemento de volumen dado por $dV = d^{3N}qd^{3N}p$. Por otro lado, la razón neta a la que los puntos representativos "fluyen" fuera de V es

$$\int_{S} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS,\tag{7}$$

véase que \mathbf{v} es el vector velocidad de los puntos representativos en la región del elemento de volumen dS. Evocando el teorema de Gauss, lo anterior puede expresarse como

$$\int_{V} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV. \tag{8}$$

Recuerde que la forma explícita de la divergencia está dado por

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{3N} \left[\frac{\partial}{\partial q_i} (\rho \dot{q_i}) + \frac{\partial}{\partial p_i} (\rho \dot{p_i}) \right].$$
(9)

Si se asume que en el ensamble no hay miembros nuevos siendo añadidos al volumen ni miembros viejos siendo expulsados, entonces el número total de puntos representativos permanece constante, y dado que las expresiones (6) y (8) son proporcionales, entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho dV = -\int_{V} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV, \qquad (10)$$

al arreglar la expresión anterior se obtiene una ecuación de continuidad para el conjunto de puntos representativos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{11}$$

Ahora, considerando la forma explícita de la divergencia (9) se tiene que la expresión anterior es

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left[\frac{\partial\rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \dot{p}_i + \rho \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) \right] = 0, \tag{12}$$

es fácil ver que los términos entre paréntesis se anulan debido a las ecuaciones de movimiento (1). Además, como $\rho \equiv \rho(q, p; t)$ y al considerar la forma de la derivada total del tiempo, se llega a que

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + [\rho, H]_{q,p}.$$
(13)

A esta expresión se le conoce como el *Teorema de Liouville*, el cual establece que la densidad "local" ρ de puntos representativos, es decir, las coordenadas del espacio fase, vistos por un observador moviéndose con un punto representativo permanece constante en el tiempo. Debe señalarse que el término $[\rho, H]$ es conocido como el corchete de Poisson (*Poisson Bracket*) de las funciones ρ y H. De manera general, el corchete de Poisson de dos funciones continuas cualesquiera F y G que dependen

de las coordenadas dinámicas (q_i, p_i) se define como

$$[F,G]_{q,p} = \sum_{i} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right),$$

esta cantidad nos ayuda a establecer un criterio para saber cuáles funciones son constantes de movimiento [1], el corchete de Poisson también puede ser encontrado en la literatura usando {}. El teorema de Liouville puede compararse con el movimiento de un fluido incompresible que se mueve en el espacio físico, algo muy interesante. En la siguiente referencia se puede ahondar en casos particulares [3].

1.3. Teorema de Birkhoff

Sea V una parte invariante del espacio fase de volumen finito, y $f(p_i, q_i)$ una función del espacio fase Γ sobre V y determinada en todos los puntos $p_i, q_i \in V$. El teorema de Birkhoff dice que el límite

$$\lim_{C \to \infty} \frac{1}{C} \int_0^C f(p_i, q_i, t) dt = \hat{f}(p_i, q_i, t)$$
(14)

existe para todos los puntos $\{p_i, q_i\}$ del conjunto V, exceptuando como máximo a un cierto número de conjuntos de medida cero, o sea, casi en cualquier lugar en V, para conocer lo que sucede en estos puntos es necesario un entendimiento amplio de la teoría de la medida lo cual escapa de los intereses de estas notas, sólo basta con que el límite existe. Véase que el teorema sin el límite nos recuerda al promedio de la función $f(p_i, q_i)$ sobre el intervalo de tiempo (0,C). Al tomar el límite $C \to \infty$, decimos que es el promedio temporal de esta función a lo largo tiempos muy grandes, termodinámicamente hablando, estamos tomando tiempos tales que el sistema logre estar en equilibrio y termalizar.

El teorema de Birkhoff asegura que, para una función del espacio fase Γ , los promedios temporales existen a lo largo de las trayectorias pasando a través de casi todos los puntos de la parte invariante V.

Demostración La demostración de este teorema escapa de los intereses de estas notas. Sin embargo, para el lector más interesado, en la siguiente referencia se aborda una demostración hecha por A.N. Kolmogoroff [2]. Cabe destacar que este teorema está escrito bajo fundamentos matemáticos referentes al campo de la teoría de la medida.

Un caso muy interesante y que ayudará en el entendimiento de las secciones posteriores es la consideración de que, sea V una parte invariante del espacio fase Γ , a esta parte la llamaremos métricamente indescomponible (*metrically indecomposable*) si no puede ser representada de la siguiente manera

$$V = V_1 + V_2, (15)$$

donde V_1 y V_2 son partes invariantes positivas. Esto se basa en la idea de que el conjunto V consta de un conjunto de trayectorias completas (trayectorias periódicas), donde al querer separarlas por cualquier método en dos conjuntos diferentes, se dice que si V es métricamente indescomponible, entonces suceden uno de estos dos casos:

- Uno de los componentes es cero
- Ambos componentes no son medibles

Por lo tanto, si V cumple con lo anterior, el teorema de Birkhoff se vuelve más preciso para nuestros intereses. De esto se sigue el teorema

Teorema Si el conjunto V es métricamente indescomponible, entonces en cualquier parte de V

$$\hat{f}(q_i, p_i) = \frac{1}{\mathfrak{M}V} \int_V f(q_i, p_i) dV.$$
(16)

Donde se puede interpretar al lado derecho como el promedio de la función $f(q_i, p_i)$ en V, a la cual llamaremos promedio fase de f denotada por \overline{f} . Por lo tanto, podemos decir que este teorema asegura que, si V es métricamente indescomponible, el promedio temporal $\hat{f}(q_i, p_i)$ de una función del espacio fase para casi todos los puntos (q_i, p_i) coincide con el promedio fase \overline{f} de la misma función. Recuerde que el término $\mathfrak{M}V$ es el volumen generalizado del espacio fase.

2. Problema Ergódico

Como introducción a esta sección se debe tener en cuenta que las cantidades físicas, termodinámicas en este caso, aparecen clásicamente como funciones de las coordenadas dinámicas del sistema, las cuales asumen valores diferentes para distintos estados del sistema, así que para comparar estos valores con los resultados experimentales deberíamos ser capaces de determinar el estado del sistema al mismo tiempo en que se hace la medición. Traduciendo lo anterior a un gas, esto significa que debemos saber tanto las posiciones y momentos de todas las partículas que lo constituyen, lo cual es imposible. Así que surge la pregunta, ¿qué estados del sistema termodinámico se deben asumir para obtener valores de las funciones fase, tal que sean comparables con los datos experimentales?

Para dar respuesta, se parte mencionando que un experimento da las mediciones de una cantidad termodinámica no se puede realizar de manera instantánea, ya que requiere de un cierto tiempo que, sin importar qué tan corto nos parezca, será muy largo para las partículas que evolucionan. Dentro de este intervalo de tiempo habrá perturbaciones entre las partículas (interacciones entre potenciales, colisiones, entre otros) que pueden cambiar los valores de la función fase. Por lo tanto, los datos experimentales se tienen que comparar con los promedios sobre largos intervalos de tiempo, en lugar cada uno de los valores de la función fase, visto de otra manera, se deben comparar con promedios temporales de las funciones del espacio fase sobre una trayectoria, la cual representa la evolución de nuestro sistema físico. Sin embargo, presentan dos dificultades, una de ellas esta resuelta al tomar en cuenta el teorema de Birkhoff, pero la otra complicación no es muy fácil de comprobar, se dice que

"No podemos determinar qué trayectoria de nuestro sistema en el espacio fase es atravesada por otro sistema, o sea, que la trayectoria se cruce sobre ella misma [2]."

Sin embargo, esto no sucede al evocar el caso de una superficie con energía contante que es métricamente indescomponible, así los promedios temporales son iguales para casi todas las trayectorias y coinciden con el promedio fase de esta función en la superficie de energía constante.

Esto último motivó a la justificación matemática de la física estadística, la cual se apoya mucho en conceptos relacionados a la *Teoría de la medida*, la cual se reduce a dos problemas:

- 1. Investigar bajo qué condiciones y en qué grado el promedio temporal de la función fase puede ser reemplazada por los promedios fase de la función. Este primer problema se le conoce como *el problema ergódico*.
- 2. Crear un método general para aproximar cálculos del promedio fase o superficies de espacio fase. Lo cual permitirá derivar funciones asintóticas que tiendan



Figura 3: Representación esquemática de un gas ideal, considere partículas con un radio nulo

al equilibrio del sistema, considerando el número de grados de libertad ocupados en la teoría del ensamble, desde el punto de vista de la física estadística.

Además, en el desarrollo del problema ergódico se introdujeron conceptos que intentaban justificar el uso de los promedios de funciones fase en superficies de energía constante. justificando la idea de *integrales controlables* como casos donde podemos fijar un valor a cada integral de las ecuaciones de movimiento del sistema, que no depende del tiempo y es diferente de la integral de la energía. Esto permite especificar un espacio reducido de 2s - k del espacio fase, teniendo k integrales controlables y 2s grados de libertad. Sin embargo, en la física estadística la única integral controlable es de la energía [2].

Al resto de integrales que no cumplen las condiciones anteriores se les conoce como *integrales libres*, las cuales si pretenden representar una cantidad física real, tendrán que ser constantes. Con esto se asume que la locación del punto imagen del sistema en variedad (*manifold*) reducida es un evento aleatorio con una probabilidad pequeña.

Entre los intentos de resolver los problemas de conciliación entre los promedios temporales y espaciales del sistema surgieron diferentes propuestas. La más importante entre ellas fue propuesta por L. Boltzmann, donde se plantea que para un sistema cerrado a una energía dada (hipersuperficie de energía constante) corresponde a una trayectoria simple del espacio fase, es decir, no importa cual sea el estado del sistema a un tiempo t, la trayectoria pasará (o habrá pasado) a lo largo de cualquier otro estado con la misma energía total, recorriendo la superficie un gran número de veces, a eso se le conoce como *la hipótesis ergódica*, esto se cumple en el caso del oscilador armónico unidimensional.

Pero al pasar al caso de mayores dimensiones, la trayectoria del espacio fase, en principio no puede cruzarse a sí misma. Por lo tanto, resulta difícil mapear un intervalo de tiempo unidimensional a un elemento de superficie N-dimensional. Así que, para la identidad de los promedios temporales y de fase no es necesario que la trayectoria pase realmente a través de cada punto de la superficie de energía. A este nuevo planteamiento se le denomina como *la hipótesis cuasi-ergódica*.

Se dieron más intentos por buscar qué parámetros del sistema tomar para conciliar estos promedios, sin embargo no fueron nada satisfactorios. No fue hasta que como consecuencia de la demostración del teorema de Birkhoff, se abrió un nuevo punto de vista para enfatizar la estrecha conexión entre la indescomponibilidad métrica y el problema ergódico.

A manera de resumen, se puede reflexionar que un sistema ergódico es aquel donde los promedios temporales \hat{f} de la función del espacio fase f coincide con el promedio fase (también llamada promedio ensemble en libros de física estadística [4, 3].

2.1. Sucesión de sistemas cada vez más aleatorios

En el estudio de la termalización de sistemas, ya sean clásicos o cuánticos, es fundamental describir el grado de aleatoriedad. Por tal motivo, se introduce la *jerarquía ergódica*[5], que puede ser vista como una clasificación ordenada de los sistemas dinámicos aleatorios. Comúnmente consta de 5 niveles, cada uno describiendo un tipo de comportamiento aleatorio:

$Ergódico \supset Weak \ Mixing \supset Strong \ Mixing \supset Kolmogorov \supset Bernoulli$

Debe destacarse que dentro de esta jerarquía sólo los sistemas Kolmogorov y Bernoulli son caóticos [6], el diagrama previo se aprecia mejor bajo la Fig. 4

Mīxing dēbil (Weak Mixing, WM) λ=0 Mixing Fuerte (Stong Mixing, SM) λ=0 Kolmogorov (K) λ>0 Bernoulli (B) λ>0	Ergōdico λ=0				
Nixing Fuerte (Stary Mixing, SM) λ=0 Kolmogorov (K) λ>0 Bernoulli (B) λ>0	μτχί	y dēbil (Weak Mixiny, WM) ;	λ =0		
		Nixing Fuerte (Stany Mixing , SM) Kolmogorov (K) λ>0 Bernoulli (B) λ>0	λ=0		

Figura 4: Esta figura nos muestra la clasificación de todos los sistemas dinámicos cada uno más aleatorio que el anterior.

A continuación describiremos cada tipo de sistema:

2.2. Sistemas Ergódicos

Este es el primer nivel de la jerarquía, estos sistemas obedecen a lo ya dicho en el tema del *Problema Ergódico*. Pero, ahora usaremos un lenguaje basado en la teoría de la medida (Véase el apéndice de Teoría de la Medida) y de mapas.

"Para una medida invariante ergódica de un sistema dinámico, los promedios del espacio fase son los mismos que el promedio temporal [7]."

Para un sistema continuo en el tiempo, lo anterior significa que

$$\lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\tilde{\mathbf{x}}(t)) dt = \langle f(\tilde{\mathbf{x}}(t)) \rangle.$$

(17)

Figura 5: (a) Es una representación del billar de Sinai con esperas duras que se mueven en una caja con paredes periódicas. (b) Representa al Estadio de Bunimovich, la partícula choca con la frontera de paredes duras y esquinas curveadas

Es válida para casi cualquier condición inicial con respecto a la medida invariante, la cantidad $\tilde{\mathbf{x}}(t)$ representa una trayectoria del espacio fase, y el lado derecho de la ecuación establece el promedio de $f(\tilde{\mathbf{x}}(t))$ sobre Γ pesada por la medida invariante en cuestión. La ergodicidad es la forma más débil de aleatoriedad y no necesariamente implica caos. Algunos ejemplos de sistemas ergódicos son los sistemas llamados billares de Sinai donde tenemos un gas con un número arbitrario de esferas duras en algún volumen. Otro ejemplo son los "Estadios de Bunimovich" que describe el movimiento de una partícula libre dentro de un estadio con paredes duras que tienen los bordes redondeados como se ve en la Fig. 5

2.3. Sistemas Mezclados (Mixing Systems)

Una definición general es cuando en una órbita periódica elíptica hay una mezcla extremadamente intrincada de regiones caóticas y toros Kolmogórov-Arnold-Moser, o por sus siglas KAM. Así, rodeando cada órbita elíptica hay toros, entre los cuales están regiones caóticas y otras órbitas elípticas (que implican integrabilidad), que están en sí mismas rodeadas una a la otra, de manera *ad infinitum* [7].

Otra definición vista desde una perspectiva más formal es la siguiente: Un mapa M de área preservada de una región compacta S está *mezclado (mixing)* si dado



Figura 6: Aquí se muestra un billar de Hongo, o *Mushroom Billiard* que consta de un semicírculo superpuesto encima de un lado del rectángulo.

dos subconjuntos cualquiera σ y σ' de S, donde σ y σ' tienen medida de Lebesgue positivas, eso es, $\mu_L(\sigma) > 0$ y $\mu_L(\sigma') > 0$, entonces

$$\frac{\mu_L(\sigma)}{\mu_L(S)} = \lim_{m \to \infty} \frac{\mu_L[\sigma' \cap \mathbf{M}^m(\sigma)]}{\mu_L(\sigma')}.$$
(18)

Donde podemos interpretar a S como el conjunto de todos los elementos del espacio fase, tal que σ es un estado inicial y σ' es el mismo pero a un tiempo distinto, así que el cociente entre las medidas de un elemento y el conjunto existe, siempre y cuando el límite exista, es decir, que la medida de la intersección de σ' con una m-ésima iteración del mapa evaluado en el estado inicial exista, cuando m tiende a infinito. Es esta la definición de donde se derivan los casos fuerte y débil. Para estos último se usa un lenguaje explícito de teoría de la medida, por ende no es muy intuitiva su relación con los sistemas Hamiltonianos. Un ejemplo donde regiones caóticas e integrables coexisten son los billares de hongo (Mushroom Billiards) que se muestra en la Fig. 6

2.3.1. Mezclado Fuerte (Strong Mixing)

Un sistema es Strongly σ -algebra de subconjuntos medibles de cierto conjunto, en este caso, nuestro conjunto puede ser el espacio fase.

$$\lim_{n \to \infty} \mu_L(T^n(B) \cap A) = \mu_L(B)\mu_L(A)$$
(19)

En vista de nuestra ecuación (18) podemos relacional a $T^n(B)$ con las iteraciones de los mapas mientras que $A \to \sigma' \ y \ B \to \sigma$, bajo la misma idea expresada anteriormente. Cabe destacar que A y B son conjuntos de elementos, que podemos considerar como subconjuntos del espacio fase.

2.3.2. Mezclado Débil (Weak Mixing)

Relajando la condición previa un poco a sólo requerir que el sistema esté "mezclado" en promedio obtendremos un mezclado débil, o un weak mixing. Entonces, un sistema es "weak mixing" si y sólo sí para toda $A, B \in \Sigma$

$$\lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} |\mu_L(T^k(B) \cap A) - \mu_L(B)\mu_L(A)| = 0$$
(20)

Como nota final de esta sección diremos que el mezclado fuerte (strong mixing) implica un mezclado débil (weak mixing), que a su vez, éste último implica ergodicidad. Sin embargo, la relación inversa no es válida.

2.4. Sistemas Kolmogorov

Este tipo de sistemas es el siguiente nivel en la jerarquía ergódica. De una manera intuitiva llamaremos a un sistema Kolmogorov si cada partición tiene entropía métrica positiva, esto es lo mismo que decir que el sistema es caótico, o sea, posee un exponente de Lyapunov positivo en condiciones iniciales típicas.

Para despejar dudas, identificamos a la entropía métrica, también llamada entropía KS (Kolmogorov-Sinai), como un número que mide el rango de tiempo de creación de información a medida que una órbita caótica evoluciona. Es una cantidad parecida al exponente de Lyapunov pero dada su complejidad no es siempre fácil de calcular. Para una definición más amplia de la entropía métrica puede ir a la siguiente referencia [7].

Siguiendo con el lenguaje matemático de [5], un sistema es Kolmogorov si y sólo si es Kolmogorov-Mixing. Un sistema es Kolmogorov-Mixing, es decir, cumple con la condición de un sistema mezclado (mixing) vista en la subsección anterior, y además cumple que para cualquier conjunto A_0 , para cualquier entero positivo r y para cualquier conjunto de subconjuntos medibles $A_1, A_2, ..., A_r \in \Sigma$

$$\lim_{n \to \infty} \sup_{B \in \sigma_{n,r}} |\mu_L(B \cap A_0) - \mu_L(B)\mu_L(A_0)| = 0$$
(21)

2.5. Sistemas Bernoulli

Este tipo de sistemas es menos intuitivo y no es fácil de aterrizar en palabras llanas; por lo tanto, se expondrán dos definiciones que pueden encontrarse en las siguientes referencias [7, 5].

En primer instancia, un sistema es dicho sistema de Bernoulli si puede ser representado como una dinámica simbólica consistente ante un cambio completo de un número finito de símbolos [7]. Mientras que la otra definición inicia con un planteamiento más intuitivo; así, un sistema de Bernoulli es aquel cuyo comportamiento es tan aleatorio como una rueda de ruleta. Más adelante se definen los escenarios Bernoulli, que dan respaldo a la definición de un sistema Bernoulli. Además, estos sistemas se dividen en dos tipos dadas ciertas condiciones: "Bernoulli débil" (Weak Bernoulli) y "Bernoulli muy débil" (Very Weak Bernoulli). Para una descripción más detallada véase [5].

3. El problema del gas monoatómico

Un tratamiento que se da en [8] sobre el gas monoatómico y como describirlo está dado por lo siguiente:

Considere un círculo de diámetro L donde hay N puntos distribuidos de masa unitaria, cada punto se mueve con una velocidad constante v_i , vea la Fig. 7. Ahora, si q_i es la coordenada angular de cierto punto, llámese *i*, las ecuaciones de movimiento estarán dadas por

$$\frac{dq_i}{dt} = v_i$$

$$\frac{dv_i}{dt} = 0$$
(22)

que determinan al sistema Hamiltoniano con base en la función Hamiltoniana





Figura 7: Descripción de un gas monoatómico descrito por Sinai

Sabemos que, de acuerdo con el teorema de Liouville descrito previamente, existe una medida invariante m que podemos escribir en su forma diferencial

$$dm = \prod_{i=1}^{N} dq_i dp_i \tag{24}$$

Así que la superficie de energía constante H = H(N, L) está dada por el producto directo del toro N-dimensional descrito por la mecánica analítica y una esfera de radio $\sqrt{2H}$.

El sistema que estamos analizando, bajo los siguientes datos N,L,H no es ergódico, ya que la velocidad de cada partícula se conserva en el espacio fase, si mantenemos estas velocidades fijas, entonces sucede que tendremos un movimiento periódico en el toro. Por lo tanto, se opta por una transformación que permitirá ganar grados de libertad en la numeración de partículas y pasar al límite de $N \to \infty$ que describe el límite termodinámico. Para ello se considera un espacio fase donde el conjunto de N puntos en el círculo pasa a ser un punto.

El nuevo conjunto $Q_N = Tor^N/S_N$ está descrito por la configuración original Tor^N factorizada por el grupo de permutaciones de N símbolos S_N , dicho conjunto representará un espacio de configuraciones como un pseudo-manifold. Entonces, cada punto $q \in Q_N$ puede ser visto como el conjunto de velocidades de las m partículas como función de q, es decir, ahora consideramos a la medida como una partícula en el nuevo conjunto. Por otro lado, si se identifica que $q_i \in q$, entonces $v(q_i)$ es la velocidad en el punto q_i . Ahora, si tenemos k partículas localizadas en el punto q_i entonces $v(q_i)$ será la k-tupla de las velocidades de las partículas en q_i , esto es posible ya que se considera un espacio fase donde las N partículas se consideran como un punto, así que en q_i es posible tener más de una partícula.

Teniendo lo anterior establecido, pasaremos a la construcción que permite pasar a la consideración de un gas ideal para una línea de partículas infinitas, es decir, para N muy grandes, del orden de 10^{23} partículas que hay en un mol de gas.

Se supondrá que hay una secuencia de círculos que tienen un punto fijo en común y están acomodadas como se muestra en la Fig.8



Figura 8: Representación de la ampliación de la longitud de los círculos propuesto por Sinai

Tomando ahora los siguientes límites $L \to \infty$, $N \to \infty$ y $H \to \infty$ (llamando a esto el límite termodinámico), tal que converjan de la siguiente manera $\frac{N}{L} \to \rho$ y $\frac{H}{N} \to h$ donde identificamos a ρ como la densidad numérica y a h como el promedio de la energía, ambos fijos. Es fácil ver que al tomar el límite $L \to \infty$ los círculos se irán aplastando hasta el punto que tendremos un sistema con infinitas partículas en una línea.

Al tener las bases cualitativas establecidas, es menester construir una medida invariante en el espacio límite como el límite de las medidas invariantes de Liouville y, además, se mostrará que el sistema en el límite es ergódico y que incluso presenta la propiedad de mezclado, o mixing.

Para ello se considera un intervalo Δ arbitrario dentro de la línea y se denota $\eta(\Delta)$ como el número de moléculas que han caído dentro de dicho intervalo. En el caso anterior al límite termodinámico, se tiene que la probabilidad de las partículas presentan la forma siguiente

$$P_{N,L}\{\eta(\Delta) = k\} = C_N^k \left(\frac{\Delta}{L}\right)^k \left(1 - \frac{\Delta}{L}\right)^{N-k}.$$
(25)

Pero al tomar el límite, lo anterior toma la siguiente forma

$$P_{N,L}\{\eta(\Delta) = k\} \to e^{-\rho|\Delta|} \frac{(\rho|\Delta|)^k}{k!}.$$
(26)

Esto se puede identificar como la distribución de Poisson. Debe verse que las variables aleatorias $\eta(\Delta_1) \ge \eta(\Delta_2)$ son independientes en el límite si $\Delta_1 \cap \Delta_2 = \emptyset$, es decir, no hay puntos que tengan en común. La última ecuación nos muestra a la medida de Poisson como la medida límite del espacio de configuraciones. La discusión sobre cómo se ve la distribución de velocidades de este sistema se deja como ejercicio para el lector interesado, que puede verse en la referencia [8].

A continuación, se desarrollará una demostración acerca de que la dinámica del sistema de gas ideal posee la propiedad de mezclado.

Demostración Sea x un punto del espacio fase, así $x = (q, v_q)$, donde q es un conjunto contable de puntos en la línea, y v_q es una función del subconjunto que le asigna una velocidad a cada uno de sus partículas. Además, sea Δ un conjunto medible de la línea. Entonces es posible examinar aquellos subconjuntos del espacio fase Γ que está dado por la posición y velocidad del las partículas en este intervalo.

Para cada conjunto medible Δ los subconjuntos del espacio fase determinados forman una σ -subalgebra de la σ -algebra de todos los subconjuntos medibles denotados por $\gamma(\Delta)$. Cabe destacar que en al final de estas notas se da una breve descripción de lo que son los conjuntos medibles y las propiedades de las σ -algebra ocupadas en este párrafo.

Decir que un sistema posee la propiedad de mezclado es equivalente al decir que para cada función definida en el espacio

$$\int f(S_t x) f(x) d\mu \quad \xrightarrow[t \to \infty]{} \left(\int f d\mu \right)^2 \tag{27}$$

Donde S_t representa un automorfismo o endomorfismo de x. Por lo tanto, es

suficiente con probar que esto se cumple para un conjunto denso para funciones en $\mathscr{L}^2(\Gamma, \mu)$, tal que se comportan de manera estadísticamente parecidas a tiempos grandes. Para ello elegiremos funciones que dependen en la parte de x en un intervalo de Δ y que $\int f d\mu = 0$, entonces la condición anterior se reduce a

$$\int f(S_t x) f(x) d\mu(x) \quad \xrightarrow[t \to \infty]{} 0.$$
(28)

A continuación, se elige la función f que describa el número de partículas de la configuración x que caen dentro del intervalo, a esta función se denota como f_{Δ} . Ahora, se considera un punto x y una partícula q_i dentro de ella. Al cabo de un tiempo t esta partícula estará dentro del intervalo $(q_i + tv_i)$ dado que no hay colisiones con otras moléculas. Como estamos interesados en la probabilidad de que el punto $q_i + tv_i$ esté en Δ , se tiene que si el punto estuviera en este intervalo, entonces bajo la condición siguiente

$$|v_i| \ge \frac{|\Delta|}{t},\tag{29}$$

la partícula dejará el intervalo, y a medida que $t \to \infty$ la probabilidad de recurrencia tenderá a la unidad. Análogamente, la probabilidad de aquella x que tiene partículas que no abandonan el intervalo Δ después de un tiempo t, se aproxima a cero conforme el tiempo tiende al infinito. Así, la función $f(S_t x)$ se comporta de manera asintótica medible con respecto a $\gamma R^1 - \Delta$, donde esta γ representa los subconjuntos del espacio fase que forman una σ -algebra. Así, la independencia entre $\gamma(\Delta) \ge \gamma R^1 - \Delta$ nos llevan a la ecuación (28).

Otra prueba más precisa de este modelo de gas ideal, a través de partículas puntuales, puede encontrarse en la referencia siguiente [8].

Se debe destacar que este tratamiento muestra a un gas ideal con puntos de radio cero, pero en artículos relacionados con la termalización del gas ideal [9, 10] mencionan que estos gases no son caóticos, ya que para que se logre la termalización de un gas es necesario un comportamiento caótico en el espacio fase. Por ende, en estos artículos se menciona que sólo el tratamiento del gas ideal bajo una descripción de esferas duras con radio finito tiene esta propiedad y por lo tanto termaliza. A tales sistemas de esferas duras lo denotan como *Billares de Sinai*.

3.1. Termalización

Un concepto clave para la Hipótesis de Termalización de Eigenestados es el término *termalización*. En esta sección se expondrá en qué consiste la termalización, en su caso clásico, bajo qué condiciones se cumple y se aterrizará con un ejemplo. En la sección acerca de la Hipótesis de Termalización de Eigenestados se hablará sobre su extensión cuántica y sus implicaciones.

En la vida diaria sabemos que, independientemente de cómo preparemos una taza de café, esta se enfriará hasta llegar a un equilibrio térmico con el ambiente. Para que un sistema, como en este caso la taza de café, llegue al equilibrio debe primero termalizar, es decir, llegar a un tipo de equilibrio independientemente de las condiciones iniciales del sistema; véase la Fig. 9.



Figura 9: De manera macroscópica se observa la termalización en las tazas de café, que alcanzan un equilibrio térmico con el ambiente.

Sin embargo, existen sistemas que no logran termalizar, un ejemplo de un sistema no "termalizable" es el siguiente: Consideremos un cristal perfectamente armónico y completamente aislado [9]. Clásicamente modelamos este cristal a través de un sistema de ecuaciones lineales que pueden ser diagonalizadas para dar sus diferentes modos normales, vea la Fig. 10.



Figura 10: Representación de una red cristalina en tres dimensiones modelada como osciladores armónicos acoplados

Estos modos pueden ser cuantizados para dar una descripción cuántica completa del sistema, pero, de momento lo haremos de manera semiclásica. Para ello, primero se considera cómo podríamos esperar que el sistema sea descrito en equilibrio térmico. Si medimos una sola propiedad del fonón, como el número de ocupación n(E)de un modo a cualquier energía E (descrito desde la estadística Bose-Einstein). Entonces, para medir fácilmente n(E) de manera experimental, es mejor considerar su promedio sobre todos los modos con energías similares en magnitud, de los cuales se tienen muchos. Posteriormente, excitamos aquellos modos más cercanos a una cierta energía, sea en este caso E_0 , y volvemos medir n(E) como función de E. Ya que el número de ocupación para cada modo se conserva, la distribución de probabilidad tendrá un pico extra en E_0 que será constante en el tiempo.



Figura 11: En la primera imagen tenemos el número de ocupación de los modos en función de la energía. En la segunda vemos una excitación que no tiende a relajarse, un claro ejemplo de sistema que no tiende a termalizar [11]

Así, la distribución térmica esperada nunca será alcanzada en un tiempo finito (tiempo de relajación), y en este caso, el sistema no "termaliza". Lo anterior también sucede si lo llevamos al caso completamente clásico. Como se podría esperar, ya sea de manera clásica o semi-clásica, en el sistema antes descrito debería de haber un intercambio de energía con otros modos, causando una eventual relajación del sistema tendiendo a un equilibrio térmico, con una temperatura ligeramente superior, vea las gráficas plasmadas en la Fig. 11. Para entender en qué consiste la termalización es necesario centrarse en los promedios temporales iguales de una observable que varía como función del tiempo O(t). Así, para encontrar su promedio temporal sobre un intervalo de tiempo Δ se obtiene al hacer tender el tiempo a infinito. Debe recalcarse que algunas observables son muy difíciles de calcular, y por lo tanto, se espera que su promedio temporal también lo sea. Sin embargo, existe una posibilidad de calcular los promedio temporales, esto es, asumiendo que son sistemas ergódicos (véase la sección dedicada a este tema). Así que, considerando a la observable como función del espacio fase $O(\Gamma)$ tendemos una ecuación como (16), de manera explícita

$$\hat{O} = \frac{\int_{V} O(\Gamma) d\Gamma}{\int_{V} d\Gamma} = \langle O \rangle_{\Gamma}$$
(30)

Sin embargo, hay pocos sistemas de estas características. Otro tipo de sistemas son los *sistemas integrables* donde tenemos N invariantes o constantes de movimiento que en nuestro ejemplo no alcanza a termalizar, debido a estas invariantes adicionales. Pero, tales sistemas no son muy comunes, ya que cualquier perturbación no-armónica le hace perder la integrabilidad. Sin embargo, bajo la teoría KAM es posible tener trayectorias cuasiperiódicas como en el caso integrable, pero tiene sus

limitaciones [9].

Otro término relacionado con la ergodicidad es el caos, aunque como vimos no son equivalentes ya que la ergodicidad asegura que el espacio fase está bien agitado, pero eso no asegura que esté mezclado. Sin embargo, se espera que para un gran número de grados de libertad el sistema sea ergódico y caótico. En algunos casos, la termalización implica una acción de mezclado o formalmente mixing . Por lo tanto, la mayoría de sistemas clásicos con números de partículas N grandes de son fuertemente caóticos, así que están muy cerca de ser "strongly mixing" y ergódicos.

4. Caos Cuántico

Este tema es un campo donde hay ciertas cuestiones aún sin esclarecer. De primera cuenta, su definición es algo que aún sigue en tela de juicio. EN primera instancia, puede ser descrito como el intento de encontrar caos desde la perspectiva clásica, es decir, una gran sensibilidad en las condiciones iniciales del sistema ahora aplicadas al régimen cuántico. Sin embargo, dicho intento falló ya que tal sensibilidad no ser considerada de la misma manera que en sistemas clásicos [12]. Un ejemplo se da al considerar la ionización de un átomo de hidrógeno mediante la irradiación de microondas, se espera que al preparar a este átomo en un estado altamente excitado y al considerar que las microondas son lo suficientemente intensas, el proceso hacia la ionización no mostrará una espiral suave, en su defecto se nota un comportamiento errático difusivo, esto es, los campos eléctricos hacen que las órbitas del electrón sean caóticas [13, 14]. Este comportamiento también fue observado en otro experimento [15]. Bajo estos experimentos se puede inferir la evidencia de algún comportamiento caótico cuántico. Sin embargo esto no sucede, dado que el caos es la impredecibilidad que permanece a tiempos infinitos [16], mientras que los experimentos anteriores sólo consideran tiempos cortos. Aunado a lo anterior, se hicieron cálculos sobre estos experimentos y otros sistemas similares para conocer el comportamiento a largos periodos de tiempo. Esto mostró que al preparar al electrón en un estado altamente excitado éste absorbe energía de manera clásica, posteriormente, a largos periodos de tiempo el sistema pasa a una transición a un régimen donde el electrón absorbe energía más lentamente [17, 18, 19, 20]. Los cálculos anteriores mostraron un fenómeno llamado "la supresión cuántica del caos clásico" [21, 22, 23]. Investigaciones posteriores encontraron que el caos en sistemas cuánticos se da de otras maneras, una de ellas se da a través del espectro de energía [12]. Por lo tanto, el caos cuántico afirma que deberíamos ser capaces de recuperar la naturaleza de la dinámica de un sistema clásico, ya sean integrables o caóticos [12]. Por estas razones es que comúnmente se opta por el término "Caología Cuántica", que es el estudio de comportamiento semiclásico, pero no clásico, característico del sistema cuyo movimiento exhibe caos [16], el panorama general de la discusión entre caos cuántico o caología cuántica se da en la siguiente referencia [24]. Por otro lado, debe destacarse que en su análogo clásico, que es clave para la termalización de un sistema, se presentan ciertas características que ya no son válidas, tales son

- Gran cantidad de invariantes de movimiento extra, particularmente cualquier proyector de un eigenestado de energía será una constante de movimiento.
- La función de onda dependiente del tiempo tiene una constante de movimiento asociada a cada eigenvector de la energía.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{E} c_{E} e^{-iEt} |E\rangle \qquad \qquad c_{E} = \langle E|\psi(0)\rangle, \qquad (31)$$

lo cual sugiere que el sistema depende de las condiciones iniciales.

• El espacio fase no funciona, esto debido a que tanto la posición como el momen-

to son variables incompatibles y por ende, no podemos medirlas simultáneamente. Pero, en el caso semiclásico se puede pensar en paquetes de onda lineales Δx y Δp tal que $\Delta x \Delta p > \hbar$, pero este paquete de ondas se esparcirá en el tiempo y sólo será válido a este nivel.

4.1. Medidas de caos cuántico

4.1.1. Conjetura de Berry-Tabor

A diferencia de los sistemas clásicos, en un sistema cuántico un indicador que nos dice si un sistema es integrable o caótico es la estadística que describen los niveles de energía en las cercanías, también conocido como espaciamiento de vecinos más cercanos o de primeros vecinos (NNS, Nearest-Neighbor-Spacing). Para sistemas caóticos los niveles de energía siguen una distribución Wigner-Dyson, como veremos en la siguiente sección. Mientras que un un sistema cuántico integrable, la estadística que siguen fue descrita por Berry y Tabor en 1977, tema central en esta sección.

Se parte la discusión con el caso de una partícula en una dimensión pensando que no sigue una dinámica caótica si el Hamiltoniano no depende del tiempo. Al resolver en la ecuación de Schrödinger es posible encontrar el espectro de los niveles de energía, además, la estadística que sigue el espaciamiento de niveles depende fuertemente del potencial considerado. Por ejemplo, para un potencial armónico se espera que el espaciamiento entre niveles sea equidistante, mientras que si tomamos un potencial de pozo infinito, el espaciamiento entre niveles incrementa conforme la energía aumenta. Para sistemas con muchas partículas esto cambia. Considerando un sistema no-ergódico con muchos grados de libertad tal como un arreglo de osciladores armónicos independientes con incontables frecuencias, de donde se obtienen los modos normales de una cadena armónica. Tomando este caso, es sabido de la mecánica clásica que podemos diagonalizar este sistema, donde la energía del sistema está dado por

$$E = \sum_{j} n_{j} \omega_{j}, \tag{32}$$

donde n_j es el número de ocupación y ω_j es el modo de frecuencia. Para energías muy grandes, cuando los números de ocupación son grandes los niveles de energía en las cercanías (espaciados de manera muy cercana) pueden venir de diferentes conjuntos de $\{n_j\}$, por lo que podemos decir que los niveles de energía E no están correlacionados uno respecto a otro y podemos modelarlos como números aleatorios.

La distribución de estos niveles está descrita por la estadística de Poisson, donde la probabilidad de tener n niveles de energía en un intervalo en particular $[E, E+\delta E]$ será

$$P_n = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} \tag{33}$$

donde λ es el número de niveles promedio en el intervalo. Para sistemas con esta estadística, la distribución en la separación de niveles ω es

$$P_0(\omega) = e^{-\omega} \tag{34}$$

Dicho esto podemos mencionar el planteamiento central de la *conjetura Berry-Tabor* donde se establece que para sistemas cuánticos cuya contra parte clásica correspondiente es integrable, los eigenvalores de la energía generalmente se comportan como una secuencia de variables aleatorias independientes, tal que exhiben una estadística de Poisson. Sin embargo, esta conjetura tiene sus fallas, y recae en, como podría imaginarse, que existen sistemas cuánticos cuya contra parte no existe.

Lo anterior puede ser aplicado a sistemas de muchas partículas dado que la estadística de niveles de energía en Hamiltonianos para sistemas de muchos cuerpos sirve como un principal indicador de caos o integrabilidad cuántica, según sea el caso. En estos sistemas de muchos cuerpos la separación entre los niveles de energía es más pequeña, la distribución que los describe tiende a ser del tipo Poisson para el caso cuántico integrable, y Wigner-Dyson para sistemas caóticos cuánticos [11]. Por otro lado, en sistemas de pocas partículas, como en billares, el espectro de energías se vuelve más denso al tender hacia el límite semiclásico, ya sea mediante el incremento de energía o al reducir la constante de Planck. Pero en sistemas con muchas partículas, se puede lograr lo anterior tendiendo al límite termodinámico, es decir, $N \to \infty$. Estos casos dicen que el indicador de la estadística de niveles puede ser usado para caracterizar si un sistema cuántico es caótico o no, incluso cuando no tiene un límite clásico.

4.1.2. Conjetura de Bohigas-Giannoni-Schmidt

Antes de comenzar con la discusión de la conjetura descrita por Bohigas, Giannoni y Schmidt debemos evocar a la discusión la teoría de matrices aleatorias. A medida que avancen estas notas veremos lo importantes que resultan en el desarrollo de la Teoría de Termalización de Eigenestados.

Teoría de Matrices Aleatorias (RMT, Radom Matrix Theory). Estas ideas surgen a partir de entender el comportamiento estadístico de las resonancias de neutrones lentos en la física nuclear, propuesta alrededor de los años 1950, véase la Fig 12. Estas investigaciones se concentran principalmente en el promedio de las propiedades de los niveles nucleares, tal como el espaciamiento de niveles.



Figura 12: Resonancia la sección transversal de neutrones lentos para átomos de Torio-232 y Uranio-238, para mas información consulte la referencia [25]. Debido a que los picos tienen diferentes anchuras y alturas en diferente lugar, es posible decir que no guardan un patrón definido, lo cual sugiere que el sistema sigue una dinámica completamente aleatoria.

Es bien sabido que los eigenvalores de un Hamiltoniano describen los niveles de energía característicos de un sistema, que puede ser continua o discreta con un gran numero de niveles. Además, dadas la características de un Hamiltoniano, sólo interesa la parte discreta del espectro en la escena de los niveles de energía de varios sistemas cuánticos, por lo cual aproximamos el espacio de Hilbert real del sistema por uno de dimensión finita. Con lo anterior podemos representar a nuestros Hamiltonianos por medio de matrices de dimensión finita, que al resolver

$$H\Psi_i = E_i \Psi_i,\tag{35}$$

obtendremos los eigenvalores y eigenvectores del sistema. Sin embargo, en el caso del núcleo presentamos dos dificultades.

- 1. No se conoce el Hamiltoniano
- 2. Incluso si se conociera, sería muy complicado intentar resolver la ecuación de eigenvalores.

Por lo cual, desde un principio se hace una hipótesis estadística de H compatible con las propiedades generales del sistema. Así, representamos a H por medio de matrices cuyos elementos son variables independientes cuyas distribuciones estás restringidas por las propiedades de simetría. Ahora el problema es obtener la información del comportamiento de los eigenvalores resultantes al diagonalizar estas matrices. Dyson se refería a lo siguiente:

"La teoría estadística no pretende predecir la secuencia detallada de nivel de cualquier núcleo, pero sí puede describir la apariencia general y el grado de irregularidad de la estructura de nivel que se espera que ocurra en cualquier núcleo, el cual es muy complicado entender a detalle [26]". Posteriormente, Wigner fue quien conectó esta idea con la hipótesis de que "el comportamiento estadístico de niveles en una secuencia simple (es decir, todos los niveles tienen el mismo espín, paridad y otras cantidades conservadas, relatado de la simetría) es idéntica con los eigenvalores de una matriz aleatoria [26]". Dado que los requerimientos de simetría son impuestos a la matriz aleatoria y sólo esos, los elementos de matriz son tomados como variables aleatorias con distribución Gaussiana. Lo anterior fue respaldado por el análisis realizado por Porter y Rosenzweig a través de los datos nucleares experimentales de diversos autores [26].

Ellos optaron por el uso de computadoras para generar y diagonalizar un gran número de matrices aleatorias. El análisis Monte Carlo realizado, además de respaldar la hipótesis de Wigner, señaló algo más, la densidad y la distribución de espaciamiento de eigenvalores de matrices simétricas reales son independientes de la distribución de los elementos de matriz individuales. Además, bajo un análisis teórico de grupos, Dyson encontró que un ensamble (ensemble, comúnmente encontrado en la literatura) de matrices, invariantes bajo una simetría de grupo G, que pertenece necesariamente a una de tres clases, qué el denominó ortogonales, unitarias y simplécticas.

Esto dio pie al desarrollo de la *estadística Wigner-Dyson*. Para una descripción más detallada imaginemos lo que pasa con una matriz aleatoria de tamaño 2x2

$$\hat{H} \doteq \begin{bmatrix} \epsilon_1 & \frac{V}{\sqrt{2}} \\ \frac{V*}{\sqrt{2}} & \epsilon_2 \end{bmatrix}$$
(36)

donde las entradas son variables aleatorias con distribución Gaussiana, con promedio cero y varianza σ . Al diagonalizar y calculando la estadística de separación de niveles de un tipo Weyl $P(E_1 - E_2 = \omega) \equiv P(\omega)$

$$P(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\sigma^3} \int d\epsilon_1 \int d\epsilon_2 \int dV \delta(\sqrt{(\epsilon_1\epsilon_2)^2 + 2V^2} - \omega) \exp\left(\frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + V^2}{2\sigma^2}\right)$$
(37)

donde al hacer un cambio de variable $\epsilon_2 = \epsilon_1 + \sqrt{2}\xi$, integrando sobre ϵ_1 y evaluando en coordenadas cilíndricas tendremos las siguientes distribuciones:

Para simetría de inversión temporal (time-reversal)

$$P(\omega) = \frac{\omega}{2\sigma^2} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4\sigma^2}\right) \tag{38}$$

Y para casos sin simetría de inversión temporal

$$P(\omega) = \frac{\omega^2}{2\sqrt{\pi}(\sigma^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4\sigma^2}\right)$$
(39)



(a) Ley semicircular de Wigner. Caso GOE



(c) Ley semicircular de Wigner donde se contrasta la densidad de estados respecto de la energía, caso GUE.



(b) Distribución de espaciamiento de niveles de energía para el caso de una matriz aleatoria ortogonal, GOE.



(d) Distribución de espaciamiento de niveles de energía para el caso de una matriz aleatoria unitaria, GOE.

Figura 13: En esta figura se ocuparon matrices con entradas aleatorias, reales para el caso GOE e imaginarias para el caso GUE, en las figuras 13a y 13c se muestra que ambas cumplen con la ley semi-circular de Wigner. Mientras que para las figuras 13b y 13d, representan la distribución del espaciamiento de niveles de energía. Note que P indica la probabilidad (*probability P*) y s representa al espaciamiento entre niveles (*spacing s*).

Se observa en la Fig. 13, para la subfigura 13b se puede notar que la distribución de espaciamiento de los niveles de energía que más se ajusta a lo obtenido es la ecuación (38), mientras que para la subfigura 13d, la curva que mejor se ajusta está dada por (39), donde las líneas rojas representan las curvas teóricas, las líneas azules representa la distribución de Poisson (33), y las líneas negras son los histogramas obtenidos de las matrices aleatorias.

Observando estas distribuciones se pueden notar dos propiedades

- 1. Hay una repulsión de niveles dado que la probabilidad $P(\omega)$ de tener una separación de energía desaparece a medida que $\omega \to 0$
- 2. La probabilidad decae como una Gaussiana a grandes separaciones de energía

Además, se pueden abreviar ambas expresiones con base en lo siguiente

$$P(\omega) = A_{\alpha}\omega^{\alpha} \exp\left(-B_{\alpha}\omega^{2}\right) \tag{40}$$

donde

 $\alpha = \begin{cases} 1, \text{ con simetría de inversión temporal} \\ 2, \text{ sin simetría de inversión temporal} \end{cases}$

donde para cada valor de α tiene su respectivo valor con base en las dos expresiones previas. La simetría de inversión temporal (time-reversal) corresponde a hacer el cambio $t \rightarrow -t$ [27], y dado que las componentes del Hamiltoniano en la GOE son reales cumplen , mientas que para sistemas que rompen esta simetría, sea el caso GUE, sus componentes son complejas, esto fue demostrado de manera rigurosa por Wigner [28]. La ecuación (40) puede generalizarse para un Hamiltoniano de tamaño mayor al antes expuesto, tal que podemos definir un ensamble de matrices tomadas de una distribución aleatoria Gaussiana

$$P(\hat{H}) \propto \exp\left(\frac{-\alpha}{2a^2} Tr(\hat{H}^2)\right) \equiv \exp\left(\frac{-\alpha}{2a^2} \sum_{i,j} H_{ij} H_{ji}\right)$$
(41)

donde a establece la escala de energía en general y

$$\alpha = \begin{cases} 1, \text{ todas las entradas cumplen con } H_{ij} = H_{ji} \\ 2, \text{ cumplen con } H_{ij} = H_{ji}^* \end{cases}$$

En el primer caso tendremos un Ensamble Gaussiano Ortogonal (GOE) y en segundo tendremos un Ensamble Gaussiano Unitario (GUE). Además, como el ensamble debe ser invariante bajo transformaciones ortogonales o unitarias, la distribución de probabilidad sólo puede depender de la invariante $Tr(\hat{H}^2)$.

Teniendo ya una visión amplia de la teoría de matrices aleatorias, se puede hablar de sus diversas aplicaciones a otros campos de la física tal como en las propiedades elástico-dinámicas de los materiales, la conductividad en materiales desordenados, gravedad cuántica, cromodinámica cuántica, entre otros. Sin embargo, un campo al cual se aplicó esta teoría es al de los sistemas caóticos, que además tendrá una relación muy cercana con la Teoría de Termalización de Eigenestados [26, 11].

En 1984 Bohigas, Giannoni y Schmidt realizaron un par de artículos donde estudiaron una partícula puesta en un pozo de paredes infinitas con la forma de un billar de Sinai, Fig. 14. En el primer artículo explican el por qué ocuparon este tipo de sistemas, calcularon grandes números de eigenvalores del sistema y, usando una fórmula tipo Weyl obtuvieron un número promedio de niveles hasta una energía E

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{4}\pi(S * E - L * \sqrt{E} + K)$$
(42)

donde S indica la superficie, L el perímetro del Billar y K es una constante que proporciona información de las propiedades geométricas y topológicas del dominio. Posteriormente, calcularon diversos espectros donde las fluctuaciones se estudiaron bajo la distribución de vecinos más cercanos NNS y la estadística de Dyson-Mehta, para más detalles se recomienda la siguiente referencia [29].



Figura 14: Representación del billar de Sinai ocupado en el trabajo de Bohigas-Giannoni-Schmidt

Los resultados obtenidos en este primer artículo fueron que la distribución NNS, $\rho(x)$ se ajusta más a las predicciones del Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE, Gaussian Orthogonal Ensemble) que a una distribución de Poisson. De manera similar, la invarianza de $\rho(x)$ para el billar de Sinai es de 0,273 que resultó muy cercana al valor esperado de la GOE 0, 286 ± 0,015 a comparación de la de Poisson 1,0. Al mismo tiempo, todas las demás propiedades de las fluctuaciones en el billar de Sinai investigadas están por mucho muy cercanas a las predichas por la GOE. Así que la pregunta que se abre en este primer articulo es si se cumple o no lo siguiente:

"Los espectros del sistemas invariantes de inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K (sistemas Kolmogorov) muestran las mismas propiedades de fluctuación predichas por la GOE [29]".

Por otro lado, en el segundo artículo [30] se explora otro ejemplo de sistema caótico clásico, un estadio con las esquinas curvadas, y se compara con un sistema integrable, estadio circular. Aquí se refuerzan los primeros resultados. En el caso integrable se observó una estadística de Poisson en el espaciamiento de niveles, mientras que en el caso caótico se observan fluctuaciones de eigenvalores de matrices aleatorias, caso del ensamble Gaussiano Ortogonal. Para más detalles, véase [30]. Con ambos artículos se conjetura que es verdad que para cualquier frontera, tal que el movimiento de una partícula libre reflejada elásticamente por ella es un movimiento fuertemente caótico, es decir, que la estadística de niveles de un sistema cuántico que tiene una contraparte clásicamente caótica están descritas por la RMT, en el caso GOE. Sin embargo, hay casos donde lo anterior no se cumple, tal es el caso de Billares aritméticos [11]. Con ello, la estadística de Wigner-Dyson para el espaciamiento de niveles es a menudo considerada como una propiedad característica de sistemas cuánticos caóticos, aunque tenga un análogo clásico o no. Una última consecuencia de esta conjetura es que si un sistema es caótico, el límite clásico de los eigenestados cuánticos están mal definidos, es decir, no hay función analítica suave que pueda describir los eigenestados de sistemas cuánticos. Lo anterior implica que los eigenestados de un Hamiltoniano caóticos en una base desafinada (non-finetuned), incluyendo un espacio de bases reales, son esencialmente vectores aleatorios sin estructura.

5. Termalización de Eigenestados (Eigenstates Termalization Hyphotesis, ETH)

5.1. Un nuevo sentido a la Termalización

Para darle un nuevo sentido al concepto de la termalización, ahora aplicado a los sistemas cuánticos, se parte del redescubrimiento de un artículo publicado por Von Neumann en 1929. En esta publicación se discute cómo el comportamiento mecánico-estadístico podría emerger en sistemas cuánticos que evolucionan bajo una dinámica unitaria, por tal motivo se enunciaron dos teoremas, el "Teorema H cuánticoz "Teorema Ergódico Cuántico [31]". Las ideas expresadas por von Neumann se centraron en las observables macroscópicas, en lugar de considerar la función de onda o la matriz densidad de todo el sistema. Esto llevó a que posteriormente demostrara lo que él denominó como "Teorema ergódico cuántico", enfocado en el comportamiento a tiempos grandes de sistemas cuánticos macroscópicos. Este último teorema ha sido discutido detalladamente por Goldstein et al. [32]. Bajo los términos de estos autores, el teorema ergódico cuántico menciona que

"Para una familia típica finita de observadores macroscópicos que conmutan, cada función de onda inicial de una superficie de energía microcanónica evoluciona de tal manera que para la mayoría de las veces a tiempos muy largos, la distribución de probabilidad común (joint probability distribution) de dichas observables aplicadas a la función de onda evolucionada en el tiempo (Evolución unitaria) está cerca de una distribución microcanónica característica [11]".

Sin embargo, este teorema no menciona qué sucede con sistemas cuánticos integrables, descritos por la estadística de Poisson, y no integrables, descritos por la estadística de Wigner-Dyson. Por lo que debemos hacer ciertos cambios en este teorema. Para empezar, se debe reconsiderar el término de "Termalización" en sistemas cuánticos, cabe decir que dicha modificación no invalida a lo previamente dicho. Para ello, se parte de suponer un sistema aislado previamente preparado en un estado puro no estacionario denotado por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m} C_m \exp\left(\frac{-iE_m t}{\hbar}\right) |m\rangle,$$
(43)

donde $|m\rangle$ y E_m son los eigenvectores y eigenvalores de un Hamiltoniano \hat{H} , con una energía promedio bien definida y fluctuaciones de energía sub-extensivas. Estas cantidades, tanto sub-extensivas como super-extensivas, son observables cuánticas que se relacionan con la desigualdad de Heisenberg donde el incremento crítico de fluctuaciones de una observable A lleva a una supresión en el límite inferior de las fluctuaciones de la observable B, comportamiento conocido como supresión crítica de fluctuaciones [33]. Se ha mostrado que esta supresión es una representación de un punto crítico cuántico (Quantum Critical Point, QCP) que suceden en el estado base de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [33, 34]. Dicho lo anterior, se dice que el sistema va a "termalizar" si durante el tiempo en que evoluciona (tanto el sistema puro como una observable) existe una relajación hacia una descripción microcanónica y permanece cerca de ella en la mayoría del tiempo. Extendiendo al caso de una observable $\hat{\Pi}$ su evolución temporal está dada por

$$\Pi(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{\Pi} | \psi(t) \rangle = \sum_{m,n} C_m^* C_n \exp\left(\frac{-i(E_m - E_n)t}{\hbar}\right) \Pi_{mn}$$
(44)

$$=\sum_{m} |C_m|^2 \Pi_{mm} + \sum_{m,n \neq m} C_m^* C_n \exp\left(\frac{-i(E_m - E_n)t}{\hbar}\right) \Pi_{mn},$$
(45)

donde $\Pi_{mn} = \langle m | \hat{\Pi} | n \rangle$. En vista de lo antes mencionado, la observable termalizará si después de un tiempo de relajación, su valor esperado promedio coincide con el caso microcanónico, y si además, las fluctuaciones temporales del valor esperado microcanónico son pequeños para la mayoría de los tiempos posteriores.

Se opta por la representación microcanónica debido a que el espaciamiento de niveles están cuantizados, y este modelo involucra que el promedio sobre todos los eigenestados son una ventana de energía ΔE , como en la teoría RMT. Así, al tomar el límite termodinámico (N muy grande) sigue siendo mucho menor que cualquier escala de energía en el problema, ya que aún contiene un número de eigenestados extremadamente grande. Así, recordando el promedio microcanónico a una energía W es

$$\langle \hat{\Pi}_{micro} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{E' \in [E, E+\delta E]} \langle E' | \hat{\Pi} | E' \rangle, \tag{46}$$

donde obtendremos el promedio temporal correcto de una observable si calculamos su valor esperado de todos los eigenestados en una cáscara de energía promediada sobre todos los resultados.

Como se puede observar en la ecuación (44), a tiempos muy grandes el término cruzado desaparece y sólo permanecen los elementos en la diagonal multiplicados por $|C_m|^2$. Sin embargo, surgen más preguntas, ya que los términos $|C_m|^2$ se conservan en el tiempo ¿cómo podemos hacer coincidir el primer término de (44) con la distribución canónica? (46). Además, es sabido que en sistemas de muchos cuerpos, las eigenenergías están exponencialmente cerca unas de otras, y al querer promediar el segundo término en la ecuación (44) a cero se debe esperar tiempos de relajación demasiado grandes, a tal grado que pueden exceder la edad del universo ya que a medida que aumentamos el tamaño del sistema el tiempo de "relajación" también lo hace, así que teóricamente sólo tomamos sistemas pequeños.

Otro modelo propuesto es tomar al Hamiltoniano como una matriz aleatoria real, sustentado por el marco RMT para observables, donde podríamos predecir si el sistema termalizará en el nuevo sentido. Visto de esta manera, el primer término de (44) se vuelve independiente del estado inicial, así

$$\sum_{m} |C_m|^2 \Pi_{mm} \approx \bar{\Pi} \sum_{m} |C_m|^2 = \bar{\Pi}, \qquad (47)$$

que coincide con la distribución microcanónica (46). Estudios posteriores hechos por otros autores [35] discutieron la importancia de la RMT en la comprensión de la termalización en sistemas cuánticos de muchos cuerpos, en donde se extendió la conjetura de Berry a sistemas cuánticos arbitrarios asumiendo que los eigenestados del Hamiltoniano ergódico son, esencialmente, vectores aleatorios no correlacionados. Sin embargo, en sistemas reales los valores esperados térmicos de las observables dependen de la densidad de energía al igual que el tiempo de relajación, pero la RMT no consideraba dicha dependencia, por lo tanto, se debe ir más allá de este modelo. Posteriormente, Srednicki en una serie de publicaciones [10, 36, 37] realizó una generalización de la RMT para describir estas observables, estableció un ansatz llamado Hipótesis de Termalización de Eigenestados (Eigenstates Thermalization Hyphotesis, ETH) la cual pareció encajar con ciertas observaciones en sistemas cuánticos reales de tamaño pequeño.

5.2. Planteamiento de la ETH

Como se mencionó, la ETH fue un ansatz propuesto para la matriz de elementos de observables en una base de eigenestados de algún Hamiltoniano [37], y tiene la siguiente forma

$$\Pi_{mn} = \Pi(\bar{E})\delta_{mn} + e^{-S(\bar{E})/2} f_{\Pi}(\bar{E},\omega)R_{mn}, \qquad (48)$$

donde

$$\bar{E} = \frac{E_m + E_n}{2},$$
$$\omega \equiv E_n - E_m.$$

S(E) es la entropía termodinámica a una energía E y tanto $f_{\Pi}(\bar{E}, \omega)$ como $\Pi(\bar{E})$ son funciones suaves, R_{mn} representa los elementos de una matriz aleatoria (Ortogonal o Unitaria) con promedio cero y varianza 1. Debe tenerse presente que aún no hay mucha certeza sobre qué observables satisfacen la ETH y cuáles no; así que se espera que (48) sea válida para todas las observables físicas de las cuales la física estadística aplica. Sin embargo, algunos autores mencionan que la ETH es válida para observables que abarcan hasta un medio del tamaño del sistema [38]. Si ahora se toma el complejo conjugado de la ecuación (48) se nota que tanto la función f_{Π} como R_{mn} satisfacen ciertas relaciones

$$R_{mn} = R_{nm}, \quad f_{\Pi}(\bar{E}, -\omega) = f_{\Pi}(\bar{E}, \omega), \tag{49}$$

$$R_{mn}^* = R_{nm}, \quad f_{\Pi}^*(\bar{E}, -\omega) = f_{\Pi}(\bar{E}, \omega),$$
 (50)

donde en la primera ecuación es fácil ver que se tratan de elementos de matriz reales, mientras que en la segunda son elementos complejos.

Comparando con la ecuación (48) se puede ver que es muy similar a la siguiente ecuación

$$\Pi_{mn} \approx \bar{\Pi} \delta_{mn} + \sqrt{\frac{\bar{\Pi}^2}{D}} R_{mn} \tag{51}$$

que describe los elementos de matriz de cualquier operador evaluado en dos eige-

nestados de una observable, modelada como una matriz aleatoria en un espacio de Hilbert de dimensión D, y reproduce el promedio y la varianza de las variables aleatorias de II. Sin embargo, se notan dos diferencias: Primera, los elementos en la diagonal de la matriz de la observable $\Pi(\bar{E})$ no son las mismas en todos los eigenestados, estas funciones son suaves respecto de la energía de los eigenestados. Segunda, los elementos fuera de la diagonal de la matriz en la cima de las pequeñas fluctuaciones Gaussianas tenemos una función envolvente $f_{\Pi}(\bar{E}, \omega)$ que depende del promedio de la energía y la diferencia de la energía de los eigenestados involucrados. Debe tenerse en cuenta que la ETH se puede reducir a la teoría de las matrices aleatorias si nos centramos en una ventana de energía muy estrecha donde la función envolvente es constante.

Dentro de esta hipótesis surgen dos casos en donde la ETH se divide, estos surgen dado que el espacio de Hilbert en donde se está considerando nuestra observable es exponencialmente grande, por lo cual, el segundo término de (48) no tiene una distribución definida. Pero, aún así, es posible que una fracción exponencialmente pequeña de eigenestados no obedezca la ETH y tengan valores esperados significativamente diferentes del ensamble microcanónico, a este caso se le llama *ETH débil*, un ejemplo son ciertos sistemas integrables. Por otro lado, si decimos que la ecuación (48) está todo el tiempo muy cerca de la descripción microcanónica para todo i, es decir, para todo eigenestado, entonces se dice que se presenta un *ETH fuerte*.

5.2.1. Sistemas difusivos en sistemas de una sola partícula

Este es un claro ejemplo en donde la ETH se reduce a una descripción de RMT. Esto se sitúa en una superficie de energía $\omega < E_T$ donde $E_T = \frac{\hbar D}{L^2}$ es la energía de Thouless en este caso la función envolvente $f_{\Pi}(\bar{E}, \omega) \approx constante$, lo cual se dice que no hay estructura en los eigenestados de Hamiltonianos ergódicos en una ventana de energía más estrecha que la energía de Thouless. Entiéndase a la energía de Thouless como una escala de energía característica de conductores desordenados difusivos, este concepto fue introducido como una medida de la sensibilidad que tienen los niveles de energía a un cambio en las condiciones de frontera del sistema, aunque comenzó como un concepto clásico ha demostrado ser muy útil en sistemas cuánticos desordenados [39, 40]. Por otro lado, mientras más nos acercamos al límite termodinámico, la RMT pierde validez; sin embargo, el nivel de espaciamiento se desvanece más rápido con el tamaño del sistema, por lo que hay más cantidad de niveles de energía en la región donde la RMT es válida.

Para el caso de sistemas subdifusivos se esperaría que $f(\omega)$ se saturara en $\omega < \hbar/\tau^*$, donde τ^* es la escala de tiempo física más pequeña del sistema. Así que, a medida que la ventana de energía contiene exponencialmente más niveles de energía, se puede esperar que la ETH siga siendo válida. Un punto a favor del ansatz ETH es que no tiene algunas limitaciones presentes en la RMT y se cree que pueda aplicarse a energías arbitrarias, exceptuando en los extremos del espectro.

5.2.2. Relación ETH y Termalización

La ecuación (48) tiene implicaciones inmediatas para entender la termalización en sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Primero, al centrarse en periodos de tiempo muy largos de observables, y asumiendo que no hay degeneraciones en el espectro de energía se tiene

$$\bar{\Pi} \equiv \lim_{t_0 \to \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt \Pi(t) = \sum_m |C_m|^2 \Pi_{mn} = Tr[\hat{\rho}_{DE}\hat{\Pi}],$$
(52)

donde $\hat{\rho}_{DE}$ es la matriz de densidades del ensamble diagonal. Por otro lado, la física estadística predice que

$$\Pi_{FE} = Tr[\hat{\rho}_{FE}\hat{\Pi}],\tag{53}$$

donde $\hat{\rho}_{FE}$ es la matriz de densidades del ensamble microcanónico. Por lo tanto, independiente a los valores reales de C_m , a medida que las fluctuaciones de la energía en el ensamble diagonal

$$\delta E = \sqrt{\langle \Psi_I | \hat{H}^2 | \Psi_I \rangle - \langle \Psi_I | \hat{H} | \Psi_I \rangle^2},\tag{54}$$

son suficientemente pequeñas, $\overline{\Pi}$ coincidirá con la predicción de la física estadística Π_{FE} dada por

$$Tr[\hat{\rho}_{FE}\hat{\Pi}] = \langle \Psi_I | \hat{H} | \Psi_I \rangle \equiv \langle E \rangle, \tag{55}$$

ya que al usar el ansatz de ETH se llega a que $\bar{\pi} \simeq \Pi(\langle E \rangle) \simeq \Pi_{FE}$ que al expandir la observable en una serie de Taylor alrededor de la energía promedio $\langle E \rangle$

$$\Pi_{mm} \approx \Pi(\langle E \rangle) + (E_m - \langle E \rangle) \frac{d\Pi}{dE} \bigg|_{\langle E \rangle} + \frac{1}{2} (E_m - \langle E \rangle)^2 \frac{d^2 \Pi}{dE^2} \bigg|_{\langle E \rangle},$$
(56)

que sustituyendo este resultado en la ecuación (52) se obtiene

$$\bar{\Pi} \approx \Pi(\langle E \rangle) + \frac{1}{2} [(\delta E)^2 - (\delta E)^2 \Pi''(\langle E \rangle) \approx \Pi_{FE} + \frac{1}{2} [(\delta E)^2 - (\delta E_{ME})^2] \Pi''(\langle E \rangle), \quad (57)$$

donde (δE_{ME}) son las fluctuaciones de energía del ensamble microcanónico. Por otro lado, es posible usar este mismo ansatz para calcular promedios a tiempos grandes sobre las fluctuaciones temporales del valor esperado de alguna observable, la cuál estará dada por

$$\hat{\sigma_{\Pi}} = \lim_{t_0 \to \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt \sum_{m,n,p,q} \Pi_{mn} \Pi_{pq} C_m^* C_n C_p^* C_q \exp\left[i(E_m - E_n + E_p - E_q)t\right] - (\bar{\Pi})^2,$$
(58)

donde podemos igualas m = q y n = p, entonces

$$\sum_{m,n\neq m} |C_m|^2 |C_n|^2 |\Pi_{mn}|^2 \le \max[|\Pi_{mn}|^2 \sum_{m,n} |C_m|^2 |C_n|^2] = \max |\Pi_{mn}|^2, \tag{59}$$

que es proporcional a la entropía del sistema en función de la energía promedio $\exp\left[-S(\bar{E})\right]$, la cual describe que la diferencia entre el equilibrio canónico y los valores esperados de la observable si en lugar de (δE^2) usamos las fluctuaciones de energía del ensamble canónico. Por otro lado, también es conveniente comparar este resultado con las fluctuaciones de la observable vista en los experimentos

$$\delta \Pi^2 = \lim_{t_0 \to \infty} \frac{1}{t_O} \int_0^{t_0} dt \langle \psi(t) | (\hat{\Pi} - \bar{\Pi}^2 | \psi(t) \rangle, \tag{60}$$

$$=\sum_{m} |C_{m}|^{2} (\Pi^{2})_{mm} - \bar{\Pi}^{2}, \qquad (61)$$

que es distinto de cero incluso si el estado inicial es un eigenestado puro del Hamiltoniano, mientras que en caso anterior $\hat{\sigma}_{\Pi}$ sí es cero. Por último, si asumimos que las fluctuaciones de la energía son lo suficientemente pequeñas, y uniendo esto con la ETH tenemos que el promedio de las fluctuaciones de la observable al cuadrado es

$$\delta \bar{\Pi}^2 \approx \delta \Pi_{FE} + \frac{1}{2} [\Pi''^2(\langle E \rangle) - 2\Pi(\langle E \rangle)\Pi''(\langle E \rangle)] [\delta E^2 - (\delta E_{FE})^2]$$
(62)

donde se describe la diferencia entre las fluctuaciones canónicas y microcanónicas de la observable ocupando el modelo del ensamble canónico, es decir, correcciones del mismo orden para fluctuaciones también ocurren en el equilibrio de la física estadística.

Sin embargo, de entre todo el análisis de las fluctuaciones para distintos casos, se dejó de lado la cuestión sobre de los tiempos de relajación del sistema, es decir, cuánto tiempo tarda para que una observable logre alcanzar el resultado de un ensamble diagonal, y para esto debemos incluir en nuestra discusión a la observable misma, el estado inicial en cuestión y las características del Hamiltoniano. Lo cual, también se ha visto que el concepto de termalización en el caso cuántico cambia respecto del caso clásico. Por otro lado, los términos como caos, ergodicidad y termalización se encuentran dentro de los eigenestados del Hamiltoniano. Por lo cual, la relajación de la observable al equilibrio se basa en el desfasamiento en la ecuación (45). Para entender más a detalle acerca del tiempo de relajación de un sistema cuántico se debe tomar en cuenta a las ecuaciones cinéticas cuánticas, pero este tema excede los propósitos de estas notas.

5.2.3. Relación ETH y Teorema Ergódico Cuántico

En el inicio de la esta sección se mencionó el teorema de von Neumann, así que ahora nos daremos a la tarea de profundizar un poco más sobre este teorema, posteriormente lo relacionaremos con la ETH. Retomando, von Neumann se centró en entender qué es lo que sucede con las observables durante una evolución temporal unitaria de todos los estados posibles extraídos de una superficie microcanónica. Su teorema se centró en el comportamiento de observables típicas en la mayoría de tiempos. Von Neumman consideró un Hamiltoniano \hat{H} con eigenestados $|m\rangle$ y eigenenergías E_n , concentrándose en una ventana de energía microcanónica de anchura δE alrededor de una energía E. Dicha ventana define un espacio de Hilbert \mathbb{H} de dimensión D que es generada por D eigenestados con eigenenergías $E_m \in (E - \delta E/2, (E + \delta E/2))$. Von Neumann descompuso el espacio de Hilbert en subespacios mutuamente ortogonales \mathbb{H}_{β} de dimensión d_{β} tal que $\mathbb{H} = \bigoplus_{\beta} \mathbb{H}_{\beta}$ y $D = \sum_{\beta} d_{\beta}$. Las observables pueden ser escritas como

$$\hat{\Pi} = \sum_{\beta} \Pi_{\beta} \hat{P}_{\beta}, \tag{63}$$

donde \hat{P}_{β} en un subespacio de Hilbert para dimensiones y subdimensiones grandes. Se sabe que el valor esperado de la observable a un tiempo t cualquiera será

$$\hat{\Pi} = \left\langle \psi \left| \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{\Pi} \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \right| \psi \right\rangle,\tag{64}$$

mientras que el promedio microcanónico es

$$\langle \hat{\Pi} \rangle_{ME} = \sum_{m \in \mathbb{H}} \frac{\langle m | \Pi | m \rangle}{D}.$$
 (65)

El teorema ergódico de von Neumann establece que "En ausencia de resonancias en \hat{H} , principalmente si $E_m - E_n \neq E'_m - E'_n$ a menos que m = m' y n = n' para cualquier ν

$$\max_{m} \left(\langle m | \hat{P}_{\nu} | m \rangle - \frac{d_{v}}{D} \right)^{2} + \max_{m \neq n} \left| \langle m | \hat{P}_{\nu} | m \rangle \right|^{2}$$
(66)

es exponencialmente pequeña, por lo cual

$$|\Pi(t) - \langle \hat{\Pi} \rangle_{ME}|^2 < \epsilon \langle \hat{\Pi}^2 \rangle_{ME}$$
(67)

excepto una fracción δ de tiempors t, donde ϵ y δ son números pequeños [11]". Se puede notar que la expresión (66) garantiza que el valor esperado del eigenestado de $\hat{\Pi}$ es idéntico al comportamiento microcanónico, es decir, sólo al centrarse en un estado posible donde las fluctuaciones son demasiado pequeñas. De hecho, esto deriva en lo siguiente

$$\langle m|\hat{\Pi}|m\rangle = \sum_{\nu} \Pi_{\nu} \langle m|\hat{P}_{\nu}|m\rangle \approx \sum_{\nu} \Pi_{\nu} \frac{d_{\nu}}{D}$$
(68)

$$=\sum_{m\in\mathbb{H}}\frac{\Pi_{\nu}\langle m|\hat{P}_{\nu}|m\rangle}{D}=\sum_{m\in\mathbb{H}}\frac{\langle m|\hat{\Pi}|m\rangle}{D}\equiv\langle\Pi\rangle_{ME},\tag{69}$$

donde cabe observar que la segunda igualdad es correcta sólo para correcciones exponencialmente pequeñas, así

$$\langle m|\Pi|n\rangle = \sum_{\nu} \Pi_{\nu} \langle m|\hat{P}\nu|n\rangle,$$

es exponencialmente si el valor esperado del proyector entre dos estados distintos también lo es. Estas últimas expresiones no son nada más que predicciones de la RMT, es decir, de la ETH restringida a una ventana de energía de Thouless $\delta E \sim E_T = \hbar D/L^2$ donde la función envolvente $f(\bar{E}, \omega) \approx constante$, sin embargo, la ETH va más allá de la cáscara de energía de Thouless. Además, cabe señalarse que la teoría de Matrices aleatorias proporciona una riqueza de información acerca de la estadística de espaciamiento de niveles y de las componentes de eigenestados, que se han ligado Hamiltonianos cuánticos caóticos [35, 41].

Conclusión

Como puede verse, el concepto de termalización sigue siendo un tema de gran interés, tanto desde un punto de vista clásico al encontrarse que en un gas monoatómico considerando sus constituyentes como partículas puntuales, como en sistemas en la mecánica cuántica, a través de la ETH. Esta última se le considera como una prometedora herramienta que nos permite entender cómo los sistemas mecánico-cuánticos termalizan a ciertos rangos de energía donde para cierto umbral parece no ser válida, aunque se han hecho algunas especulaciones de lo que podría pasar debajo de este límite [10]. Además, dado que la ETH se centra en cómo los promedios temporales de las mediciones (observables) dan lugar a las leyes de la mecánica estadística, se podría hacer pensar como un caso de *erqodicidad* en el sistemas clásicos ahora presente en sistemas cuánticos. Para tener dicha conciliación se consideran sistemas aislados de tal manera que ningún agente externo modifique su dinámica, por esta razón se relaciona con el ensamble microcanónico. Con base en las consideraciones de este ensamble, la ETH considera que la anchura ΔE puede ser tan angosta que sólo incluya una única energía, esto es el porque se consideró el caso de la energía de Thouless. Así que, de manera sencilla, debe considerarse que en la ETH se divide al sistema en regiones pequeñas y grandes, de tal manera que para cada eigenestado del sistema pueda ser pensado como una región grande, la cual actúa como un baño térmico para una región pequeña. Además, la ETH implica que para cualquier eigenestado, sólo las mediciones en la regiones pequeñas son equivalentes a un sistema en la temperatura correcta. Dado que lo anterior pierde validez en sistemas integrables, se reafirma que la ETH y la ergodicidad comparten el mismo propósito, conectar la dinámica microscópica del sistema con la mecánica estadística. Cabe destacar que se han realizado experimentos numéricos donde muestran que la ETH es una consecuencia de la teoría de matrices aleatorias RMT para sistemas suficientemente grandes [42]. Asimismo, la ETH fue llevada a diversos ámbitos, dando interesantes resultados, por ejemplo en la conjetura "ER = EPR" que considera cómo dos agujeros negros conectados por un agujero de gusano están relacionados [43], y en campos como gravedad cuántica [44]. Por lo cual, la ETH es muy prometedora en la termalización de sistemas cuánticos y se esperan nuevos resultados.

A. Teoría de la medida y su aplicación a sistemas dinámicos

Esta es una breve introducción de un amplio campo de estudio de las matemáticas, llamada *Teoría de conjuntos*. Durante esta sección mencionaremos los términos ocupado en algunas secciones, tales como conjunto medible, medida y σ -álgebras.

Comenzaremos definiendo en conjunto X, dentro de la teoría de la medida el tema central es establecer una longitud generalizada a cualquier conjunto. Partimos del conjunto P(X) que conforma ciertas partes de un conjunto X, es decir, es la reunión de todos los subconjuntos de X. A P(X) se le conoce como el *power set* de X.

Ejemplo.

Sea $X = \{a, b\}$, entonces $P(X) = \{\emptyset, \{a\}, \{b\}, X\}$

Conjunto Medible y σ -Álgebras Para medir un conjunto basta con sólo medir ciertos conjuntos, tal que sea posible llevar a cabo la medición, de cierta cantidad de subconjuntos. A tales conjuntos les llamamos *conjunto medible*

Dicho lo anterior, buscamos ahora un subconjunto del conjunto de partes de X, así que, miramos a la familia de subconjuntos que podría ser el conjunto completo, pero, generalmente, queremos un conjunto más pequeño de tales subconjuntos.

Definición. Sea $\mathscr{A} \subseteq P(X)$ es una σ -álgebra si tiene conjuntos de X como elementos, y tales elementos serán llamados también *conjuntos medibles*, tales que les podemos asignar una longitud generalizada. A dicha colección se le llama σ álgebra, y tiene que cumplir con las siguientes 3 propiedades

- $\varnothing, X \in \mathscr{A}$
- Dado el subconjunto A en la σ-álgebra que podemos medir, A ∈ A también nos es posible medir el complemento de A, A^c tal que A^c := X \ A, que representa al conjunto X sin el subconjunto A. Entonces A^c ∈ A.
 Esto supone una ventaja, dado que un subconjunto A sea medible permite conocer su volumen generalizado, si trabajamos en Rⁿ. y con base en esto podemos conocer el volumen generalizado diera del subconjunto A.
- $A_i \in \mathscr{A}$; $i \in \mathbb{R}$, eligiendo los conjuntos medibles. A_i representa una familia de conjuntos medibles. Si tenemos un número infinito de ellos (son contables), entonces podemos tomar la unión de todos estos subconjuntos

$$\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathscr{A} \tag{70}$$

esta unión nos describe otro subconjunto que también pertenece a la σ -álgebra. Esto significa que no podemos dejar la σ -álgebra en la unión normal (unión de conjuntos, sino de una unión numerable.

Medida

Definición. Sea (A, \mathscr{A}) ta que es llamado espacio medible. Aquí tenemos un conjuntos X y fijamos una σ -álgebra a este conjunto.

Un mapeo son encontrados en la σ -álgebra, el mapeo es tal $\mu : \mathscr{A} \to [0, \infty] = [0, \infty \cup \{\infty\})$, es llamado *medida* si se satisface

- $\mu(\varnothing) = 0$
- Es posible sumar volúmenes. Aditividad

Explotando la segunda propiedad, si tenemos un subconjunto dado, por ejemplo un rectángulo como se muestra, que es posible partirlo en pedazos (subconjuntos), tal que si sumamos sus volúmenes generalizados (en este caso, áreas) deberíamos obtener el original

$$\sum_{i=1}^{n} \mu(A_i) \tag{71}$$

debe destacarse que la forma en que elegimos los conjuntos recae en que son disjuntos dosados, esto es, que $A_i \cap A_j = \emptyset$ siempre y cuando $i \neq j$, Por lo tanto, como el volumen generalizado original es la unión de los subconjuntos, tenemos

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^{n} A_{i}\right) \tag{72}$$

entonces, uniendo ambas expresiones tenemos la propiedad conocida como aditividad

$$\sum_{i=1}^{n} \mu(A_i) = \mu\left(\bigcup_{i=1}^{n} A_i\right)$$
(73)

Por otro lado, podemos aproximar volúmenes. Sea el siguiente rectángulo dividido en los siguientes subconjuntos donde ahora tenemos infinitos subconjuntos, sin embargo, son numerables y obedecen a la siguiente secuencia $(A_1, A_2, A_3, ...)$. Entonces la propiedad de aditividad se convierte en

$$\sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i) = \mu\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right)$$
(74)

Ahora introduciremos un nuevo término que será de mucha ayuda, este es el espacio de medida donde dada una medida, entonces (X, \mathscr{A}, μ) .

B. Cálculo de Srednicki

En un artículo publicado por Mark Srednicki se argumenta que la propiedad necesaria para lograr la termalización en sistemas cuánticos, de manera análoga a lo establecido por la mecánica clásica, es la validez de la conjetura de Berry [10, 45]. El argumento expuesto por Srednicki consta de estudiar un sistema gaseoso cuántico de N esferas duras con radio a (que caracteriza a los átomos dentro una caja de longitud L) en un estado inicial, descrito por las eigenfunciones obtenidas de la ecuación de Schrödinger. En el artículo se toma la predicción teórica que modela una fracción de los átomos que salen de una caja, este experimento se explica a detalle en la referencia [10]. El momento de este sistema se encuentra dentro de un rango d^3p alrededor de p denotado como $f_{QM}(\mathbf{p}, t)d^3p$, cuya forma es la siguiente

$$f_{QM}(\mathbf{p}_1, t) = \sum_{\alpha\beta} C^*_{\alpha} C_{\beta} \exp\left(\frac{(U_{\alpha} - U_{\beta})t}{\hbar}\right) \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1), \tag{75}$$

donde

$$\Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \equiv \int d^3 p_2 \dots d^3 p_N \widetilde{\psi}^*_{\alpha}(\mathbf{P}) \widetilde{\psi}_{\beta}(\mathbf{P}), \qquad (76)$$

es la amplitud de probabilidad en el espacio de momentos. Srednicki menciona que si el sistema termaliza después de algún tiempo, la cantidad $f_{QM}(\mathbf{p}, t)$ debería ser igual a la distribución de Maxwell-Boltzmann. Esta idea es probada por el autor y pone el ejemplo donde el estado inicial del gas está dado por un solo eigenestado de energía donde ahora $f_{QM}(\mathbf{p}_1, t) = \Phi_{\alpha\alpha}(\mathbf{p}_1)$ [10]. Para que lo anterior tenga validez, las fluctuaciones deben ser pequeñas como en el caso del ensamble canónico en la mecánica estadística clásica. En este caso se debe demostrar de manera general que

$$[\Delta \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2 = \int d^3 p_2 ... d^3 p_N d^3 p'_2 ... d^3 p'_N \delta(\mathbf{P}^2 - 2mU_\alpha) \delta(\mathbf{P'}^2 - 2mU_\beta) \delta_D^{3N}(\mathbf{P} - \mathbf{P'})$$
(77)

Para ello serán de utilidad las siguientes ecuaciones

$$\langle \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{P}_{1})\mathbf{A}_{\beta}(\mathbf{P}_{2})\mathbf{A}_{\gamma}(\mathbf{P}_{3})\mathbf{A}_{\delta}(\mathbf{P}_{4})\rangle_{EE} = \langle \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{P}_{1})\mathbf{A}_{\beta}(\mathbf{P}_{2})\rangle_{EE}\langle \mathbf{A}_{\gamma}(\mathbf{P}_{3})\mathbf{A}_{\delta}(\mathbf{P}_{4})\rangle_{EE} + \langle \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{P}_{1})\mathbf{A}_{\gamma}(\mathbf{P}_{3})\rangle_{EE}\langle \mathbf{A}_{\delta}(\mathbf{P}_{4})\mathbf{A}_{\beta}(\mathbf{P}_{2})\rangle_{EE} + \langle \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{P}_{1})\mathbf{A}_{\delta}(\mathbf{P}_{4})\rangle_{EE}\langle \mathbf{A}_{\beta}(\mathbf{P}_{2})\mathbf{A}_{\gamma}(\mathbf{P}_{3})\rangle_{EE}, \quad (78)$$

y

$$\delta_D^{3N}(0) \to (L/h)^{3N},$$

$$\delta_D^{3N}(\mathbf{P}) \to \delta^{3N}(\mathbf{P}),$$

$$\delta_D^{3N}(\mathbf{P})]^2 \to (L/h)^{3N} \delta^{3N}(\mathbf{P}),$$
(79)

de las cuales derivan de la expresión

$$\langle \tilde{\psi^*}_{\alpha}(\mathbf{P})\tilde{\psi}_{\beta}(\mathbf{P}')\rangle_{EE} = \delta_{\alpha\beta}\mathcal{N}_{\alpha}^2 h^{3N}\delta(\mathbf{P}^2 - 2mU_{\alpha})\delta_D^{3N}(\mathbf{P} - \mathbf{P}'), \tag{80}$$

donde los $\langle \rangle_{EE}$ indican que las cantidades equivalen a promedios sobre el ensamble de eigenenergías (*Eigenstates Ensamble*). Si ahora se toma el promedio de la ecuación (76) en el ensamble de eigenenergías a través de las aproximaciones en la ecuación (79) y de (80) se obtiene

$$\langle \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle_{EE} = \mathcal{N}_{\alpha}^2 L^{3N} \int d^3 p_2 \dots d^3 p_N \delta(\mathbf{P}^2 - 2mU_{\alpha})$$
(81)

Con la finalidad de obtener la demostración se define la forma de las fluctuaciones como

$$[\Delta \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2 = \langle |\Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)|^2 \rangle_{EE} - |\langle \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle_{EE}|^2 = \langle \Phi^*_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle_{EE} - \langle \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle^* \langle \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle$$
(82)

Haciendo las siguientes simplificaciones y omitiendo las EE en los promedios

$$\psi(\mathbf{P'}) \to \psi'$$

$$\tilde{\psi}_{\alpha}(\mathbf{P}) \to \psi_{\alpha}$$

$$\tilde{\psi}_{\beta}(\mathbf{P}) \to \psi_{\beta}$$

$$\int d^{3}p_{2}...d^{3}p_{N} \to \int$$

$$\int d^{3}p'_{2}...d^{3}p'_{N} \to \int'$$

$$\langle \rangle_{EE} \to \langle \rangle$$
(83)

desarrollando la ecuación (82) de acuerdo con la ecuación (76) se tiene

$$[\Delta \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2 = \left\langle \left(\int \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \right)^* \left(\int \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \right) \right\rangle - \left(\int \langle \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \rangle \right)^* \left(\int \langle \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \rangle \right)$$

=
$$\int \int \langle \psi_{\alpha} \psi_{\beta}^* \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \rangle - \int \int \langle \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \rangle^* \langle \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} \rangle$$
(84)

Usando la ecuación (78), el primer término de la expresión anterior puede escribir como

$$\langle \psi_{\alpha}\psi_{\beta}^{*}\psi_{\alpha}^{*}\psi_{\beta}\rangle = \langle \psi_{\alpha}\psi_{\alpha}^{*}\rangle\langle\psi_{\beta}^{*}\psi_{\beta}\rangle + \langle \psi_{\alpha}\psi_{\beta}^{*}\rangle\langle\psi_{\alpha}^{*}\psi_{\beta}\rangle_{+}\langle\psi_{\alpha}\psi_{\beta}\rangle\langle\psi_{\alpha}^{*}\psi_{\beta}\rangle.$$
(85)

Cabe destacar dos cosas. Primero, los promedios en donde los índices de las eigenfunciones ψ son distintos se anulan debido a la delta de Kronecker presente en la ecuación (80); y segundo, el único término que sobrevive es $\langle \psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \rangle \langle \psi_{\beta}^* \psi_{\beta} \rangle$. Por lo tanto, la ecuación (84) puede reescribirse como

$$[\Delta \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2 = \int \int \langle \psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \rangle \langle \psi_{\beta}^* \psi_{\beta} \rangle$$
(86)

Para terminar con el cálculo se aplican las ecuaciones (80) y (79), lo cual deriva en

lo siguiente

$$[\Delta\Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2 = \int \int' N_{\alpha}^2 N_{\beta}^2 h^{3N} L^{3N} \delta(\mathbf{P}^2 - 2mU_{\alpha}) \delta(\mathbf{P'}^2 - 2mU_{\beta}) \delta_D^{3N}(\mathbf{P} - \mathbf{P'}) \quad (87)$$

siendo lo que se quiere demostrar. Se puede notar que esta cantidad es muy pequeña ya que si remplazamos al término $\delta_D^{3N}(\mathbf{P} - \mathbf{P}')$ por su valor máximo, esto es $\delta_D^{3N}(0)$, se obtiene $(L/h)^{3N}$. Al tener en cuenta este remplazo y la forma de la ecuación (81) el resultado se convierte en $\langle \Phi_{\alpha\alpha}(\mathbf{p}_1) \rangle_{EE} \langle \Phi_{\beta\beta}(\mathbf{p}_1) \rangle_{EE}$. Este remplazo implica una sobre-estimación de $[\Delta \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{p}_1)]^2$, ya que $\delta_D^{3N}(\mathbf{P} - \mathbf{P}')$ es cercano a cero en casi todo su dominio. Además, dado que ψ_{α} tiene fluctuaciones de orden 1 en el ensamble de eigenestados y a la hora de integrar sobre la mayoría de los momentos las variaciones se anulan. Esta es la razón por la cual las fluctuaciones de $\Phi\alpha\alpha$ son tan pequeñas, lo cual aplica para el otro término con índice β .

La demostración previamente realizada realizada tiene como finalidad dar un panorama particular acerca de los métodos e ideas usadas en el desarrollo de la ETH, en este caso realizados por Srednicki. Cabe señalar en las aproximaciones en la ecuación (79) y en aplicaciones sucesivas están basadas en aquellas las condiciones que permiten a la conjetura de Berry ser válida, como la condición de altas energías descrita por $\lambda_{\alpha} \leq a$ y de bajas densidades, expresada por $Na^3 \ll L^3$, explicaciones adicionales escapan a los intereses de este apéndice, por lo cual se recomienda la referencia [10].

Referencias

- [1] Herbert Goldstein, Charles Poole y John Safko. *Classical mechanics*. 2002.
- [2] A.I. Khinchin. *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*. Dover Publications, 1960.
- [3] R.K. Pathria y Paule D. Beale. Statistical Mechanics. 3.^a ed. The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford, 0X5 1GB, UK: Butterworth-Heinemann, 2011.
- [4] Nelse L. Greiner W. y Stöcker H. Thermodynamics and Statistical Mechanics.
 1.^a ed. Fifth Avenue, New York, NY, USA: Springer, 1995.
- Joseph Berkovitz, Roman Frigg y Fred Kronz. "The ergodic hierarchy, randomness and Hamiltonian chaos". En: Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics 37.4 (2006), págs. 661-691. ISSN: 1355-2198. DOI: https://doi.org/10.1016/ j.shpsb.2006.02.003. URL: https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S1355219806000700.
- [6] Ignacio Gomez y Mario Castagnino. "Towards a definition of the Quantum Ergodic Hierarchy: Kolmogorov and Bernoulli systems". En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 393 (2014), págs. 112-131. ISSN: 0378-4371. DOI: https://doi.org/10.1016/j.physa.2013.08.070. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437113008200.
- [7] Ott E. Chaos in Dynamical Systems. 2.^a ed. The Edinburgh Building, Cambridge CB2 8RU, UK: Cambridge University Press, 2002.
- [8] Sinai Ya. G. Introduction to Ergodic Theory. 1.^a ed. Princenton, New Jersey: Princenton University Press, 1976.
- Joshua M Deutsch. "Eigenstate thermalization hypothesis". En: Reports on Progress in Physics 81.8 (jul. de 2018), pág. 082001. DOI: 10.1088/1361-6633/aac9f1. URL: https://doi.org/10.1088/1361-6633/aac9f1.
- [10] Mark Srednicki. "Chaos and quantum thermalization". En: *Phys. Rev. E* 50 (2 ago. de 1994), págs. 888-901. DOI: 10.1103/PhysRevE.50.888. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.50.888.
- [11] Luca D'Alessio y col. "From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics". En: Adv. Phys. 65.3 (2016), págs. 239-362. DOI: 10.1080/00018732.2016.1198134. arXiv: 1509.06411
 [cond-mat.stat-mech].
- [12] Ze'ev Rudnick. "Quantum chaos?" En: Notices of the AMS 55.1 (2008), págs. 32-34.
- [13] JG Leopold e IC Percival. "Ionisation of highly excited atoms by electric fields. III. Microwave ionisation and excitation". En: Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics (1968-1987) 12.5 (1979), pág. 709.

- [14] Roderick V. Jensen. "Stochastic Ionization of Bound Electrons". En: Chaotic Behavior in Quantum Systems: Theory and Applications. Ed. por Giulio Casati. Boston, MA: Springer US, 1985, págs. 171-186. ISBN: 978-1-4613-2443-0. DOI: 10.1007/978-1-4613-2443-0_12. URL: https://doi.org/10.1007/ 978-1-4613-2443-0_12.
- [15] James E. Bayfield, Larry D. Gardner y Peter M. Koch. "Observation of Resonances in the Microwave-Stimulated Multiphoton Excitation and Ionization of Highly Excited Hydrogen Atoms". En: *Phys. Rev. Lett.* 39 (2 jul. de 1977), págs. 76-79. DOI: 10.1103/PhysRevLett.39.76. URL: https://link.aps. org/doi/10.1103/PhysRevLett.39.76.
- [16] Michael Victor Berry. "The bakerian lecture, 1987. quantum chaology". En: Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences 413.1844 (1987), págs. 183-198.
- [17] G. Casati y col. "Stochastic behavior of a quantum pendulum under a periodic perturbation". En: Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems. Ed. por Giulio Casati y Joseph Ford. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1979, págs. 334-352. ISBN: 978-3-540-35510-6.
- [18] Giulio Casati, B. V. Chirikov y D. L. Shepelyansky. "Quantum Limitations for Chaotic Excitation of the Hydrogen Atom in a Monochromatic Field". En: *Phys. Rev. Lett.* 53 (27 dic. de 1984), págs. 2525-2528. DOI: 10.1103/ PhysRevLett.53.2525. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.53.2525.
- [19] Giulio Casati y col. "New Photoelectric Ionization Peak in the Hydrogen Atom". En: Phys. Rev. Lett. 57 (7 ago. de 1986), págs. 823-826. DOI: 10. 1103/PhysRevLett.57.823. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.57.823.
- [20] R Blümel y Uzy Smilansky. "Microwave ionization of highly excited hydrogen atoms". En: Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters 6.2 (1987), págs. 83-105.
- [21] Boris V Chirikov, Felix M Izrailev y Dima L Shepelyansky. "Dynamical stochasticity in classical and quantum mechanics". En: Sov. Scient. Rev. C 2.4 (1981), págs. 209-267.
- Shmuel Fishman, D. R. Grempel y R. E. Prange. "Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization". En: *Phys. Rev. Lett.* 49 (8 ago. de 1982), págs. 509-512. DOI: 10.1103/PhysRevLett.49.509. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.509.
- [23] D. R. Grempel, R. E. Prange y Shmuel Fishman. "Quantum dynamics of a nonintegrable system". En: *Phys. Rev. A* 29 (4 abr. de 1984), págs. 1639-1647. DOI: 10.1103/PhysRevA.29.1639. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.29.1639.
- [24] Michael Berry. "Quantum chaology, not quantum chaos". En: *Physica Scripta* 40.3 (1989), pág. 335.

- [25] F. Rahn y col. "Neutron Resonance Spectroscopy. 10. Th-232 and U-238". En: Phys. Rev. C 6 (1972), págs. 1854-1869. DOI: 10.1103/PhysRevC.6.1854.
- [26] "1 Introduction". En: Random Matrices. Ed. por Madan Lal Mehta. Vol. 142. Pure and Applied Mathematics. Elsevier, 2004, págs. 1-32. DOI: https://doi. org/10.1016/S0079-8169(04)80091-6. URL: https://www.sciencedirect. com/science/article/pii/S0079816904800916.
- [27] J. J. Sakurai y Jim Napolitano. Modern Quantum Mechanics. 2.^a ed. Cambridge University Press, 2017. DOI: 10.1017/9781108499996.
- [28] Freeman J. Dyson. "The Threefold Way. Algebraic Structure of Symmetry Groups and Ensembles in Quantum Mechanics". En: Journal of Mathematical Physics 3.6 (1962), págs. 1199-1215. DOI: 10.1063/1.1703863. eprint: https://doi.org/10.1063/1.1703863. URL: https://doi.org/10.1063/1.1703863.
- [29] O. Bohigas, M. J. Giannoni y C. Schmit. "Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws". En: *Phys. Rev. Lett.* 52 (1 ene. de 1984), págs. 1-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.52.1. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.1.
- [30] Bohigas, O., Giannoni, M.J. y Schmit, C. "Spectral properties of the Laplacian and random matrix theories". En: J. Physique Lett. 45.21 (1984), págs. 1015-1022. DOI: 10.1051/jphyslet:0198400450210101500. URL: https://doi.org/10.1051/jphyslet:0198400450210101500.
- [31] J. von Neumann. "Proof of the ergodic theorem and the H-theorem in quantum mechanics". En: The European Physical Journal H 35.2 (sep. de 2010), págs. 201-237. DOI: 10.1140/epjh/e2010-00008-5. URL: https://doi.org/10.1140%2Fepjh%2Fe2010-00008-5.
- [32] S. Goldstein y col. "Long-time behavior of macroscopic quantum systems". En: The European Physical Journal H 35.2 (sep. de 2010), págs. 173-200. DOI: 10.1140/epjh/e2010-00007-7. URL: https://doi.org/10.1140%2Fepjh% 2Fe2010-00007-7.
- [33] Irénée Frérot y Tommaso Roscilde. "Quantum critical metrology". En: Physical review letters 121.2 (2018), pág. 020402.
- [34] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. 2.^a ed. Cambridge University Press, 2011. DOI: 10.1017/CB09780511973765.
- [35] J. M. Deutsch. "Quantum statistical mechanics in a closed system". En: *Phys. Rev. A* 43 (4 feb. de 1991), págs. 2046-2049. DOI: 10.1103/PhysRevA.43.2046.
 URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.43.2046.
- [36] Mark Srednicki. "Thermal fluctuations in quantized chaotic systems". En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 29.4 (feb. de 1996), págs. L75-L79. DOI: 10.1088/0305-4470/29/4/003. URL: https://doi.org/10.1088/ 0305-4470/29/4/003.

- [37] Mark Srednicki. "The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems". En: Journal of Physics A: Mathematical and General 32.7 (ene. de 1999), págs. 1163-1175. DOI: 10.1088/0305-4470/32/7/007. URL: https://doi.org/10.1088/0305-4470/32/7/007.
- [38] James R. Garrison y Tarun Grover. "Does a Single Eigenstate Encode the Full Hamiltonian?" En: *Physical Review X* 8.2 (abr. de 2018). DOI: 10.1103/ physrevx.8.021026. URL: https://doi.org/10.1103%2Fphysrevx.8. 021026.
- [39] J T Edwards y D J Thouless. "Numerical studies of localization in disordered systems". En: Journal of Physics C: Solid State Physics 5.8 (abr. de 1972), págs. 807-820. DOI: 10.1088/0022-3719/5/8/007. URL: https://doi.org/ 10.1088/0022-3719/5/8/007.
- [40] Alexander Altland, Yuval Gefen y Gilles Montambaux. "What is the Thouless Energy for Ballistic Systems?" En: *Phys. Rev. Lett.* 76 (7 feb. de 1996), págs. 1130-1133. DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.1130. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.1130.
- [41] Marcos Rigol, Vanja Dunjko y Maxim Olshanii. "Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems". English (US). En: Nature 452.7189 (abr. de 2008). Funding Information: Acknowledgements We thank A. C. Cassidy, K. Jacobs, A. P. Young, and E. J. Heller for their comments. We acknowledge financial support from the National Science Foundation and the Office of Naval Research. We are grateful to the USC HPCC centre, where all our numerical computations were performed., págs. 854-858. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature06838.
- [42] Rubem Mondaini y Marcos Rigol. "Eigenstate thermalization in the twodimensional transverse field Ising model. II. Off-diagonal matrix elements of observables". En: *Phys. Rev. E* 96 (1 jul. de 2017), pág. 012157. DOI: 10. 1103/PhysRevE.96.012157. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevE.96.012157.
- [43] Juan Maldacena y Leonard Susskind. "Cool horizons for entangled black holes". En: Fortschritte der Physik 61.9 (2013), págs. 781-811.
- S. Khlebnikov y M. Kruczenski. "Locality, entanglement, and thermalization of isolated quantum systems". En: *Phys. Rev. E* 90 (5 nov. de 2014), pág. 050101.
 DOI: 10.1103/PhysRevE.90.050101. URL: https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevE.90.050101.
- [45] M V Berry. "Regular and irregular semiclassical wavefunctions". En: Journal of Physics A: Mathematical and General 10.12 (dic. de 1977), págs. 2083-2091.
 DOI: 10.1088/0305-4470/10/12/016. URL: https://doi.org/10.1088/0305-4470/10/12/016.