

Temperatura electrónica, cuantización de Wigner-Moyal e inferencia estadística

Boris Maulén^{1*}, Sergio Davis², Daniel Pons³, Eduardo Chamorro⁴

¹Doctorado en Fisicoquímica Molecular, Universidad Andrés Bello,

² Comisión Chilena de Energía Nuclear,

³ Departamento de Matemáticas, Universidad Andrés Bello,

⁴ Centro de Química Teórica y Computacional, Universidad Andrés Bello.

*b.maulenlara@uandresbello.edu

Resumen

En esta presentación mostraremos cómo es posible aproximarse (y redefinir) el concepto de temperatura electrónica [1-2] a través de la inferencia estadística y de la cuantización de Wigner-Moyal [3-4]. En particular, derivaremos algunos teoremas de expectación los cuales son el primer paso en la construcción de una teoría de inferencia [5] en mecánica cuántica. Además, exploraremos las relaciones que permiten conectar operadores y expectativas cuánticas con sus equivalentes en el espacio de fase. Esto último es parte de nuestro diccionario entre mecánica estadística clásica y cuántica el cual nos permitirá traer el concepto de temperatura electrónica al mundo cuántico.



Figura 1: Ejemplo

Agradecimientos: **Proyecto Fondecyt 1220651**, Beca de Asistencia Académica de la Vicerrectoría de Investigación y Doctorados, Universidad Andrés Bello.

Referencias

- [1] Ayers, P.; Parr, R.; Nagy, A. Local kinetic energy and local temperature in the density-functional theory of electronic structure. *Int. J. Quantum Chem.* 2002, 90, 309–26.
- [2] Guo, Ch.; He, X.; Rong, Ch.; Lu, T.; Liu, S.; Chattaraj, P. Local temperature as a chemical reactivity descriptor. *J. Phys. Chem.* 2021, 12, 5623–30.
- [3] Parr, R.; Yang, W. *Density functional theory of atoms and molecules*; Oxford University Press: New York, Oxford, 1989.
- [4] Case, W. Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians, *Am J. Phys.* 2008, 76, 937–46.
- [5] Davis, S. *Estimación, Probabilidad e inferencia*; ver. 0.94, 2021. <http://sdavis.cl/epi/epi.pdf>