



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Geometrotermodinámica de Gases Ideales
Cuánticos

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICA

PRESENTA:

Sasha Alexandra Zaldívar Corichi

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Hernando Quevedo Cubillos



2012



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de Datos del Jurado

1.Datos del alumno

Zaldívar

Corichi

Sasha Alexandra

55 84 73 38

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

304145452

2.Datos del tutor

Dr.

Hernando

Quevedo

Cubillos

3.Datos del sinodal 1

Dr.

Pablo

Padilla

Longoria

4.Datos del sinodal 2

Dr.

Francisco Javier

Mandujano

Sánchez

5.Datos del sinodal 3

Dr.

Darío

Núñez

Zúñiga

6.Datos del sinodal 4

Dr.

César Simón

López

Monsalvo

7.Datos del trabajo escrito

Geometrotermodinámica de Gases Ideales Cuánticos

60 p

2012

Dedicatoria

*“I am an exile, a sojourner.
A citizen of some other place.
All I’ve seen is just a glimmer in a shadowy mirror
but I know one day I’ll see face to face”
-Dustin Kensrue, In Exile*

Muchas cosas han sucedido desde que ingresé a la carrera. Afortunadamente en todo este tiempo siempre he contando con el apoyo de mi familia y mis amigas y amigos. Este trabajo está dedicado a ellos:

Primero que nada a mi mamá y a mi papá pero en especial a mi hermano Luis Ángel Zaldívar Corichi. La pasión que mi hermano tiene por la ciencia y su amor por las matemáticas han sido un gran ejemplo y sin duda alguna él es la persona que más admiro en este mundo. Te quiero hermano.

A mis amigas, mis mejores amigas, desde esos tiempos en el CCH SUR hasta estos días, siempre me han apoyado en todos los aspecto de mi vida. Así que Perla, Alejandra, Isel, Tania, Carolina y Alma, las quiero.

A mis amigos de la carrera, a quienes conocí en los primeros semestres. Jonathan Cruz Vargas, que siempre ha estado conmigo brindandome su apoyo y que sin sus palabras de aliento escribir este trabajo no hubiera sido posible. Fernando Servín Ruvalcaba y Ludmila Palomino sin ellos no se que hubiera hecho, y nuevamente sin su apoyo no hubiera podido escribir esto.

A mis hermanos menores: Alberto Rafael Trejo y Abner Abud Alcalá todos los días escucho palabras de aliento por parte de los dos, todos los días los quiero más. Sin ellos la vida sería muy obsoleta y aburrida. A mi gran amigo Elie Peña Macairo, siempre ayudando con todas mis dudas técnicas, siempre escuchando todo lo que tengo que decir y siendo muy paciente conmigo todos los días. Allan Octavio Flores Zamora, que es como otro hermano mayor, todos los días estuvo pendiente de mi trabajo y siempre se procupo por mi desempeño.

Agradecimientos

Quiero agradecerle al Dr. Hernando Quevedo Cubillos, porque sin su ayuda no hubiera sido posible desarrollar y escribir este trabajo. También porque gracias a él he aprendido muchas cosas del mundo de la Física y cada día me sorprende más el vasto conocimiento que el Dr. posee de este campo. A parte de todo no sólo es un excelente profesor y asesor también es una excelente persona. Así que muchísimas gracias.

Al Dr. Cesar López Monsalvo, porque todos los días desde que lo conozco ha sido muy paciente conmigo y porque sus comentarios respecto a este trabajo siempre fueron constructivos y ayudaron a que la escritura fuera mucho mejor. Y también porque se convirtió en un gran amigo el poco tiempo que llevo de conocerlo.

A todos los integrantes del seminario GTD, porque desde el día que llegué me hicieron sentir bienvenida y porque sus comentarios y dudas respecto a mi trabajo ayudaron a mejorar esta tesis de muchas maneras. Quiero que sepan que los considero a todos grandes amigos y los aprecio muchísimo.

Al Dr. Francisco Javier Mandujano Sánchez, porque su clase de Termodinámica hizo que me diera cuenta de que esa rama de la Física es extremadamente interesante, también por todos los consejos que me ha dado respecto a la vida académica y por la oportunidad que me dió de impartir clases con él.

Al Dr. Jerónimo Cortez Quezada, porque su clase de Relatividad abrió mis ojos al mundo de la Geometría Diferencial y su importancia para la Física, lo cual derivó en mi interés por la Geometrotermodinámica.

Nuevamente a mi hermano Luis Ángel Zaldívar Corichi porque sin su infinita paciencia para enseñarme a escribir en LaTeX no hubiera podido hacer este trabajo.

Finalmente a todas y cada una de las personas que se tomaron el tiempo para leer mis borradores, resúmenes y notas que al final culminaron en esta tesis.

Notación

- $\hbar = 1,0546 \times 10^{-34} J \cdot s \rightarrow$ constante de Planck reducida
- $k_B = 1,3807 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1} \rightarrow$ constante de Boltzmann
- $T \rightarrow$ Temperatura
- $m \rightarrow$ Masa
- $\lambda \rightarrow$ Longitud de onda térmica
- $\mathcal{T} \rightarrow$ Espacio fase termodinámico
- $\mathcal{E} \rightarrow$ Espacio de estados de equilibrio termodinámico
- $\Theta \rightarrow$ 1-forma fundamental de Gibbs
- $\Phi \rightarrow$ Potencial termodinámico
- $E^\alpha \rightarrow$ Variables extensivas termodinámicas
- $I^\alpha \rightarrow$ Variables intensivas termodinámicas
- $Q_n \rightarrow$ Función de partición
- $\mathcal{Q} \rightarrow$ Función de gran partición
- $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} \rightarrow$ Tensor de Curvatura
- $G \rightarrow$ Métrica del espacio fase termodinámico
- $g \rightarrow$ Métrica del espacio de estados de equilibrio termodinámico

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Agradecimientos | III |
| 1. Introducción | 3 |
| 1.1. Un poco de historia | 3 |
| 1.2. Termodinámica y Geometría | 5 |
| 1.3. La vecindad clásica | 7 |
| 2. Fundamentos de Geometrotermodinámica | 11 |
| 2.1. Invariancia de Legendre | 12 |
| 2.2. Espacio fase termodinámico y espacio de estados de equilibrio | 13 |
| 2.3. Métrica GTD, tensor de curvatura y métrica termodinámica | 14 |
| 2.4. Geodésicas | 16 |
| 3. Gases Ideales cuánticos | 19 |
| 3.1. Gas ideal de Fermi | 20 |
| 3.2. Gas Ideal de Bose | 26 |
| 3.3. Límite de Boltzmann | 29 |
| 4. Geometrotermodinámica de gases ideales cuánticos | 33 |
| 4.1. Gas Ideal de Fermi | 33 |
| 4.1.1. Métrica | 33 |
| 4.1.2. Curvatura | 35 |
| 4.1.3. Límite de Boltzmann | 40 |
| 4.2. Gas Ideal de Bose | 41 |
| 4.2.1. Métrica | 41 |
| 4.2.2. Curvatura | 43 |
| 4.2.3. Límite de Boltzmann | 47 |
| 5. Conclusiones | 51 |

| | |
|------------------------|----------|
| ÍNDICE GENERAL | 1 |
| A. Desarrollo de f_n | 55 |
| B. Desarrollo de g_n | 57 |

Capítulo 1

Introducción

En Física la curvatura y algún tipo de interacción son algo bien conocido, por ejemplo, en Relatividad General, la curvatura = interacción gravitacional. Entonces al pensar en Termodinámica y curvatura uno puede preguntarse si ocurre lo mismo, si la curvatura es igual a la interacción termodinámica. Utilizando Geometrotermodinámica se puede hacer esta conexión, como se verá en los siguientes capítulos.

Entonces el objetivo de este trabajo es analizar la interacción termodinámica del gas ideal de Bose-Einstein y del gas ideal de Fermi-Dirac utilizando GTD. En este formalismo la interacción termodinámica queda caracterizada por el tensor de curvatura ($R^\alpha{}_{\beta\mu\nu}$). Si $R^\alpha{}_{\beta\mu\nu} = 0$ no existe interacción termodinámica y si $R^\alpha{}_{\beta\mu\nu} \neq 0$ existe interacción termodinámica. También debemos aclarar que lo que nos concierne en este trabajo son los aspectos matemáticos de la termodinámica, entonces todas las interpretaciones que se harán serán geométricas, estos aspectos son importantes ya que un objetivo de GTD es proponer un formalismo consistente para la termodinámica relativista.

Para los sistemas mencionado esperamos obtener curvatura igual a cero, reproduciendo de esta manera los resultados comunes para estos gases, es decir que no tienen interacción. También estudiaremos como se ven afectados los resultados debido a que los gases están compuestos por fermiones y bosones: averiguaremos si desde el punto de vista de GTD se manifiesta algún tipo de interacción por la naturaleza de las partículas que componen a los dos gases.

1.1. Un poco de historia

El mundo físico y la geometría poseen una relación fundamental. En la rama de la Física es muy común encontrar conceptos que involucran el uso de geometría, sobre todo de Geometría Diferencial. Antes de continuar hablando de Geometría Diferencial y Física

debemos recordar que la geometría de Euclides es el primer tipo de geometría con la que uno tiene contacto y la que contiene todos los aspectos fundamentales acerca de los puntos, las líneas, etc.

En *Elementos*, Euclides deduce la geometría a través de axiomas y postulados. Su postulado más famoso es el quinto:

“Si una línea recta que corta a dos líneas rectas forma ángulos internos en el mismo lado, los cuales sumen menos que dos ángulos rectos, las dos líneas al ser prolongadas indefinidamente se encontrarán en el lado en el cual los dos ángulos sumen menos que dos ángulos rectos”

Muchos intentaron probar el quinto postulado: Ptolemy, Nasir al din al Tusi, Giovanni Alfonso Borelli, John Wallis y Adrien Marie Legendre por mencionar algunos, pero ninguno tuvo éxito. Lo anterior tuvo una consecuencia muy grande para las Matemáticas, fue el inicio de lo que hoy se conoce como geometría no-euclideana. Carl Friedrich Gauss fue el primero en pensar en una geometría no-euclideana. Después Janos Bolyai desarrolló una geometría no-euclideana y finalmente Nikolai Ivanovich Lobachevski obtuvo resultados similares. Los tres anteriores encontraron lo que hoy se conoce como espacio *2-dimensional de curvatura constante negativa*[18].

La prueba de que la geometría que encontraron Gauss, Bolyai y Lobachevsky es autoconsistente la dió Félix Klein al construir un tipo de geometría analítica en la cual un punto queda representado por x_1, x_2 tales que

$$x_1^2 + x_2^2 < 1$$

y la distancia entre dos puntos queda definida por

$$\frac{1 - x_1y_1 - x_2y_2}{(1 - x_1^2 - x_2^2)^{1/2} (1 - y_1^2 - y_2^2)^{1/2}}$$

Lo anterior fue el comienzo del desarrollo de la geometría no-euclideana. Este tipo de geometría tiene grandes aplicaciones en la Física. Quizás la más famosa es su aplicación a la Teoría General de la Relatividad. En esta teoría se utiliza la geometría desarrollada por Georg Friedrich Bernhard Riemann: la geometría Riemanniana. Las ideas revolucionarias que presentó Riemann en su famosa plática *Über die Hypothesen, welche der Geometrie zu Grunde liegen* generalizaron la geometría estudiada por Gauss, Bolyai y Lobachevsky, culminando en la definición de variedad Riemanniana, i.e. una variedad suave (diferenciable \mathcal{C}^∞) \mathcal{M} en la cual está definido un campo tensorial métrico \mathbf{g} [3, 17].

1.2. Termodinámica y Geometría

En la sección anterior revisamos de manera rápida la historia de la geometría no-euclídea y mencionamos una de sus más grandes aplicaciones en Física: la Teoría General de la Relatividad. Pero la rama de la Física que queremos estudiar utilizando conceptos de geometría es Termodinámica.

“La Termodinámica es una teoría fenomenológica y como tal toma sus conceptos directamente de experimentos. La siguiente es una lista de algunos conceptos que los físicos, a través de la experiencia, han encontrado útiles introducir” [9]

- Los sistemas termodinámicos son macroscópicos
- Los parámetros termodinámicos son cantidades macroscópicas que se pueden medir, estas cantidades están asociadas a un sistema (presión, volumen, temperatura). Todas se obtienen experimentalmente
- Un estado termodinámico queda definido por un conjunto de valores de todos los parámetros termodinámicos que describen a un sistema
- Una ecuación de estado es una relación funcional entre los parámetros termodinámicos de un sistema en equilibrio
- Un cambio termodinámico es un cambio de estado. Es cuasi-estático si las condiciones externas cambian lo suficientemente lento para que en todo momento el sistema se encuentre en equilibrio
- Las cantidades termodinámicas son **extensivas** si son proporcionales a la cantidad total de sustancia en un sistema y son **intensivas** si son independientes de esa cantidad total

Entonces nos podemos preguntar ¿cómo se introducen conceptos de geometría? El primero en introducir geometría a la termodinámica fue Gibbs. Gibbs propuso representar la primera ley de la Termodinámica como un forma diferencial [6]

$$dU = dQ - dW \tag{1.1}$$

En donde U es la energía interna, Q el calor y W el trabajo. A partir de este punto utilizaremos la notación que se encuentra en [6], la cual es $dU = dQ + dW$, donde d es un operador matemático que sirve para generar las 1-formas fundamentales de la geometría diferencial. El resultado experimental en el que se fundamenta la primera ley es la demostración que dió Joule sobre la equivalencia entre calor y trabajo mecánico. Después Charatheodory

introdujó su enfoque axiomático de las leyes de la termodinámica utilizando formas de Pfaff: $d\Psi = X_1 dx_1 + X_2 dx_2 + \dots + X_n dx_n$ [5].

El concepto de *espacio fase termodinámico* fue propuesto por Hermann [8], este espacio es el análogo al espacio fase con el que se trabaja en mecánica clásica. En el espacio fase termodinámico las variables termodinámicas son tomadas como coordenadas, por ejemplo la presión, la temperatura, etc.

De acuerdo a Gibbs [6], Caratheodory [5] y Hermann [8] la manera más apropiada para manejar los aspectos matemáticos de la termodinámica es utilizando la Geometría Diferencial.

En el texto introductorio de Schutz [17] se explica lo mencionado con anterioridad y la razón por la cual el operador matemático d se debe interpretar como la derivada exterior. Recordamos también que en la definición de variedad Riemanniana, se menciona un campo tensorial métrico, es decir una métrica. Con lo anterior se añade una estructura más, la métrica define la curvatura de la variedad. Ruppeiner introdujó una estructura métrica en un espacio de estados de equilibrio[14, 15]. El espacio de estados de equilibrio es en donde se estudian los sistemas termodinámicos y sus propiedades. La métrica de Ruppeiner es

$$g_{ij}^R = -\partial_i \partial_j S(U, N^r) \quad (1.2)$$

Donde U es la energía interna, N^r son variables extensivas, S es la entropía, n es el número de grados de libertad con $r = 1, \dots, n$. El elemento de línea está dado por

$$ds^2 = g_{ij}^R dN^i dN^j = -\frac{\partial^2 S}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j \quad (1.3)$$

Weinhold también propusó una métrica[19]

$$g_{ij}^W = \partial_i \partial_j U(S, N^r) \quad (1.4)$$

donde S es la entropía y N^r variables extensivas, con $r = 1, \dots, n$.

El elemento de línea está dado por

$$ds^2 = g_{ij}^W dN^i dN^j = \frac{\partial^2 U}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j \quad (1.5)$$

El problema que presentan las métricas anteriores es que al utilizarlas en el espacio de estados de equilibrio los resultados dependen de la elección del potencial termodinámico. En este trabajo se utilizará el formalismo conocido como **Geometrotermodinámica** (GTD)

que fue propuesto por el Dr. Hernando Quevedo[12]. En GTD se hace una conexión entre el espacio fase termodinámico y el espacio de estados de equilibrio de tal manera que los resultados cumplan con la invarianza de Legendre, es decir, que no dependan de la elección del potencial termodinámico.

Desde el punto de vista del Hamiltoniano de los sistemas los resultados que esperamos obtener son los correspondiente a una curvatura igual a cero (no hay interacción) ya que clásicamente si

$$\mathcal{H} = T \quad (1.6)$$

los sistemas carecen de interacción termodinámica. En donde \mathcal{H} es el hamiltoniano y T la energía cinética. Pero si

$$\mathcal{H} = T + V \quad (1.7)$$

los sistemas presentan interacción termodinámica. Donde V es la energía potencial.

1.3. La vecindad clásica

Definimos la cantidad

$$\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.8)$$

como la longitud de onda térmica. En donde N es el número de partículas, V el volumen, T la temperatura, m la masa, k_B la constante de Boltzmann y \hbar la constante de Planck reducida.

Dicha cantidad es un tipo de onda de De Broglie que podemos entender de la siguiente manera: los átomos en un gas pueden ser estudiados como paquetes de onda. Si la temperatura es muy alta los podemos visualizar como bolas de billar con un tamaño más pequeño que la distancia promedio entre partículas, si la temperatura comienza a decrecer los paquetes de onda comienzan a traslaparse, cuando esto sucede es necesario tomar en cuenta efectos cuánticos. Para un gas en equilibrio se cumple la siguiente relación

$$\frac{p_0^2}{2m} = \frac{3}{2}k_B T \quad (1.9)$$

Donde p_0 es el momento promedio. Ahora si recordamos que la longitud de onda de De Broglie está dada por

$$\lambda = \frac{h}{p_0} \quad (1.10)$$

podemos escribir la longitud de onda térmica como (1.8) haciendo el cambio $h = 2\pi\hbar$.

Entonces esta longitud de onda nos sirve para estimar el orden de magnitud de la separación espacial de los paquetes de onda, lo cual nos permite especificar el régimen en el que se encuentra el sistema siguiendo el criterio presentado al inicio de esta sección. Lo anterior es de gran utilidad ya que dependiendo de la región en la que se trabaje el tratamiento matemático cambia, también sabemos en cuales regiones se presentan transiciones de fase. Para el tipo de sistemas que estudiaremos el análisis se divide en tres regiones:

- La región clásica: $\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \ll 1$
- La región cuántica: $\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \gg 1$
- La frontera entre las dos regiones: $\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} = 1$

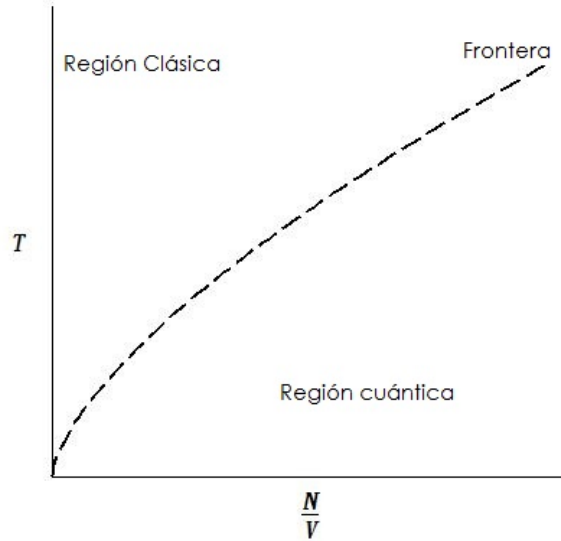


Figura 1.1: Regiones clásica y cuántica en el plano temperatura-densidad. La línea punteada es la frontera entre las dos regiones

En este trabajo el análisis se realizará en la vecindad clásica, aquí se espera que no se presenten transiciones de fase. También se utilizan todas las constantes fundamentales y sus valores correspondientes (a menos que se indique lo contrario), es decir, **no** se trabaja en el sistema de unidades naturales, las cuales están definidas por [7]

$$\hbar = c = k_B = 1 \quad (1.11)$$

En el capítulo 2 daremos un repaso a los fundamentos de Geometrotermodinámica, expondremos los objetos geométricos más importantes y las herramientas que serán utilizadas para aplicar GTD a los gases ideales cuánticos. En el capítulo 3 derivaremos la ecuación fundamental para estos gases utilizando herramientas de Física Estadística y Termodinámica. En el capítulo 4 desarrollaremos la Geometrotermodinámica del gas ideal de Fermi y del gas ideal de Bose. Finalmente el capítulo 5 estará dedicado a las conclusiones e interpretaciones de los resultados obtenidos en el trabajo.

Capítulo 2

Fundamentos de Geometrotermodinámica

Al trabajar con cualquier sistema termodinámico lo más usual es especificar la ecuación fundamental, por ejemplo la entropía como función de variables extensivas, y con esta ecuación obtener toda la información termodinámica del sistema en cuestión. Otra manera de hacerlo es mediante las ecuaciones de estado, que para propósitos experimentales son una mejor descripción del sistema que la ecuación fundamental [4]. Como mencionamos en el capítulo anterior el lenguaje de la Geometría Diferencial es el adecuado para manejar los aspectos matemáticos de la termodinámica. Estos aspectos matemáticos son los que nos interesan en este trabajo, ya que un objetivo de la GTD es proporcionar un formalismo consistente para la termodinámica relativista.

Los conceptos más importantes de la Geometría Diferencial que se utilizarán son

- **Tensores**

Un tensor tipo $\binom{0}{N}$ es una función de N vectores a los reales que es lineal en cada uno de sus N argumentos. Una 1-forma, covector o vector contravariante es un tensor tipo $\binom{0}{1}$.

Un tensor tipo $\binom{M}{0}$ es una función de M 1-formas a los reales que es lineal en cada uno de sus M argumentos.

La generalización final es un tensor tipo $\binom{M}{N}$ que es una función de M 1-formas y N vectores a los reales.

- **Conexión**

La noción de conexión está relacionada con la noción de derivada covariante. Estrictamente hablando una conexión en una variedad diferenciable M esta definida como el mapeo $\nabla : \chi(M) \times \chi(M) \rightarrow \chi(M)$ que satisface propiedades de linealidad respecto

a funciones y escalares así como la regla de Leibniz. Los componentes de la conexión son los símbolos de Christoffel:

$$\Gamma^\gamma{}_{\beta\mu} = \frac{1}{2}g^{\nu\gamma}(g_{\nu\beta,\mu} + g_{\nu\mu,\beta} - g_{\beta\mu,\nu})$$

- **Curvatura**

La curvatura es una manera de medir la diferencia entre una variedad dada y el plano (variedad) de Euclides. En este trabajo se utiliza el tensor de curvatura de Riemann, el cual está definido por

$$R^\alpha{}_{\beta\mu\nu} = \Gamma^\alpha{}_{\beta\nu,\mu} - \Gamma^\alpha{}_{\beta\mu,\nu} + \Gamma^\alpha{}_{\sigma\mu}\Gamma^\sigma{}_{\beta\nu} - \Gamma^\alpha{}_{\sigma\nu}\Gamma^\sigma{}_{\beta\mu}$$

Para el plano euclideano todas las componentes del tensor de curvatura son cero.

2.1. Invariancia de Legendre

Un aspecto fundamental en termodinámica es que las propiedades de los sistemas termodinámicos no dependen del potencial termodinámico con el que se trabaje, esto se conoce como invariancia de Legendre. Los potenciales termodinámicos están relacionados entre sí por transformaciones de Legendre.

La definición matemática de una transformación de Legendre es el cambio de coordenadas $(\Phi, E^\alpha, I^\alpha) \rightarrow (\tilde{\Phi}, \tilde{E}^\alpha, \tilde{I}^\alpha)$ definido por [2]

$$\begin{aligned}\Phi &= \tilde{\Phi} - \delta_{kl}\tilde{E}^k\tilde{I}^l \\ E^i &= -\tilde{I}^i \\ E^j &= \tilde{E}^j \\ I^i &= \tilde{E}^i \\ I^j &= \tilde{I}^j\end{aligned}\tag{2.1}$$

Dónde $i \in I, j \in J$ tal que $I \cup J$ es una partición del conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$ en dos conjuntos disjuntos. Si se toma $i = \{1, \dots, n\}$ junto con $i = \emptyset$ se obtiene la transformación total de Legendre y la identidad respectivamente. Por ejemplo si se toma el conjunto de

coordenadas $(U, S, V, T, -P)$ la transformación de Legendre tiene las siguientes posibilidades

$$\tilde{U}_1 = U - TS, \quad S = -\tilde{T}, \quad T = \tilde{S}, \quad V = \tilde{V}, \quad P = \tilde{P} \quad (2.2)$$

$$\tilde{U}_2 = U + PV, \quad S = \tilde{S}, \quad T = \tilde{T}, \quad V = \tilde{P}, \quad -P = \tilde{V} \quad (2.3)$$

$$\tilde{U}_3 = U - TS + PV, \quad S = -\tilde{T}, \quad T = \tilde{S}, \quad V = \tilde{P}, \quad -P = \tilde{V} \quad (2.4)$$

En donde \tilde{U}_1 es la energía libre de Helmholtz denotada por F , \tilde{U}_2 es la entalpía denotada por H y \tilde{U}_3 el potencial de Gibbs denotado por G . Mientras que las dos primeras son transformaciones parciales, la tercera corresponde a una transformación total. Aplicando las transformaciones anteriores a la 1-forma de Gibbs se puede ver que es invariante de Legendre.

2.2. Espacio fase termodinámico y espacio de estados de equilibrio

En GTD primero se debe construir un espacio fase. El espacio Fase es una variedad Riemanniana de contacto, este espacio fase se denota como \mathcal{T} . Como coordenadas se utilizan variables termodinámicas: extensivas E^α , intensivas I^α y un potencial termodinámico Φ con $\alpha = 1, 2, \dots, n$. Como \mathcal{T} es diferenciable inmediatamente podemos introducir distintos objetos geométricos por ejemplo 1-formas y vectores. La 1-forma más importante que definiremos es la 1-forma de Gibbs o forma fundamental de Gibbs

$$\Theta = d\Phi - \delta_{\alpha\beta} I^\alpha dE^\beta \quad (2.5)$$

en donde $\delta_{\alpha\beta} = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$. Esta 1-forma contiene toda la información termodinámica como se verá más adelante. También es necesario introducir una métrica $G = G(\Phi, E^\alpha, I^\alpha)$ a la cual se le pide que sea invariante de Legendre.

El espacio fase, la 1-forma de Gibbs y la métrica $(\mathcal{T}, \Theta$ y $G)$ forman una variedad Riemanniana de contacto. Esta estructura es necesaria para poder implementar consistentemente las propiedades de los sistemas termodinámicos que se estudiarán. El siguiente elemento de GTD es el espacio de estados de equilibrio, el cual denotaremos como \mathcal{E} , los sistemas termodinámicos existen en este espacio y sus propiedades pueden ser estudiadas.

El tratamiento que se hace a continuación no es matemáticamente exacto pero se uti-

lizará ya que es más intuitivo. ¹

El espacio de estados de equilibrio es una sub-variedad del espacio fase termodinámico y se define eligiendo un conjunto de variables extensivas, las cuales serán las coordenadas del mismo. Después al evaluar en \mathcal{E} las coordenadas restantes de \mathcal{T} éstas resultan ser función del conjunto de variables extensivas. Elegir variables extensivas para la construcción de \mathcal{E} es lo más común, ya que se obtienen las representaciones más utilizadas en termodinámica, la representación de la energía y la representación de la entropía. Pero en principio se puede elegir cualquier conjunto de variables, lo único que cambia al final es la representación en la que se está trabajando.

Para garantizar que existan las condiciones de equilibrio en \mathcal{E} se pide que la proyección de la uno-forma de Gibbs cumpla que

$$\Theta|_{\mathcal{E}} = 0 \quad (2.6)$$

Finalmente la métrica definida en \mathcal{T} al ser proyectada en \mathcal{E} debe inducir una métrica g en el espacio de estados de equilibrio, es decir

$$G|_{\mathcal{E}} = g \quad (2.7)$$

Esta métrica g hereda las propiedades de invarianza de Legendre. Las componentes de $g_{\alpha\beta}$ se calculan de la siguiente manera:

Sean $Z^A = \{\Phi, E^\alpha, I^\alpha\}$ las coordenadas de \mathcal{T} Y E^α las coordendas de \mathcal{E} . Entonces las proyecciones de la métrica G se definen cómo

$$g_{\alpha\beta} = \frac{\partial Z^A}{\partial E^\alpha} \frac{\partial Z^B}{\partial E^\beta} G_{AB} \quad (2.8)$$

dónde G_{AB} son las componentes de G .

2.3. Métrica GTD, tensor de curvatura y métrica termodinámica

Como se puede apreciar en las secciones anteriores el resultado clave de GTD es que nos proporciona una métrica invariante de Legendre $g = g_{\alpha\beta} dE^\alpha dE^\beta$ en el espacio de estados de equilibrio \mathcal{E} , ya que al ser g invariante bajo transformaciones de Legendre, nos permite trabajar con cualquier potencial termodinámico y los resultados que se obtendrán siempre

¹Para ser más correctos debemos considerar el mapeo $\varphi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{T}$, donde $\mathcal{E} \subset \mathcal{T}$ es una sub-variedad de dimensión n para la cual se induce el mapeo $\varphi^* : T^*\mathcal{T} \rightarrow T^*\mathcal{E}$ tal que se satisface la condición $\varphi^*(\Theta) = 0$, donde Θ es la 1-forma de Gibbs (esta condición es la interpretación geométrica de la primera ley de la termodinámica).

serán los mismos. Lo anterior resuelve el problema que presentaban las métrica de Ruppeiner y Wienhold, la cuales no eran invariantes de Legendre. Sin embargo estas métricas han sido utilizadas en numerosos trabajos sobre termodinámica relativista, termodinámica fuera de equilibrio, tepría de la información, temrodinámica de agujeros negros, grupo de renormalización, etc (ver por ejemplo [15] y los trabajos citados en ese artículo).

Así que podemos ver que el espacio de estados de equilibrio se convierte en una variedad Riemanniana en donde las propiedades termodinámicas de los sistemas están relacionadas con sus propiedades geométricas como la curvatura.

En una variedad Riemanniana los objetos de mayor importancia son los símbolos de Christoffel

$$\Gamma^\gamma_{\beta\mu} = \frac{1}{2}g^{\nu\gamma}(g_{\nu\beta,\mu} + g_{\nu\mu,\beta} - g_{\beta\mu,\nu}) \quad (2.9)$$

Utilizando los símbolos de Christoffel se construye el tensor de curvatura

$$R^\alpha_{\beta\mu\nu} = \Gamma^\alpha_{\beta\nu,\mu} - \Gamma^\alpha_{\beta\mu,\nu} + \Gamma^\alpha_{\sigma\mu}\Gamma^\sigma_{\beta\nu} - \Gamma^\alpha_{\sigma\nu}\Gamma^\sigma_{\beta\mu} \quad (2.10)$$

En GTD el tensor de curvatura caracteriza la interacción termodinámica de un sistema es decir si el sistema en cuestion arroja $R^\alpha_{\beta\mu\nu} = 0$ se dice que carece de interacción termodinámica por ejemplo el gas ideal clásico [13]

Si $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} \neq 0$ entonces el sistema con el que se está trabajando presenta interacción termodinámica. Entonces la curvatura de \mathcal{E} se conoce como *curvatura termodinámica*. Finalmente apartir del tensor de curvatura se puede calcular el tensor de Ricci $\mathcal{R}_{\alpha\beta} = R^\mu_{\alpha\mu\beta}$ y el escalar de curvatura $\mathcal{R} = R^\nu_{\nu}$.

La métrica que se utilizará en este trabajo está dada por

$$G = (d\Phi - I_\alpha dE^\alpha)^2 + \Lambda(E_\alpha I_\alpha) dE^\alpha dI^\alpha \quad (2.11)$$

y constituye la métrica más general encontrada hasta ahora que es invariante ante transformaciones parciales y totales de Legendre y además es lineal en las variables termodinámicas. Como se discutió en las secciones anteriores la proyección de está métrica y la proyección de la 1-forma de Gibbs en \mathcal{E} deben cumplir las condiciones (2.7) y (2.6) respectivamente, de está manera se recupera la primera ley de la Termodinámica junto con las condiciones de equilibrio termodinámico

$$\begin{aligned} d\Phi &= \delta_{\alpha\beta} I^\alpha dE^\beta \\ \frac{\partial\Phi}{\partial E^\alpha} &= \delta_{\alpha\beta} I^\beta \end{aligned} \quad (2.12)$$

Y finalmente al realizar la proyección de G en \mathcal{E} se obtiene la métrica termodinámica que tiene la siguiente forma

$$g = \Lambda \left(E_\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial E^\alpha} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^\beta \partial E^\gamma} \delta^{\alpha\beta} dE^\alpha dE^\gamma \quad (2.13)$$

Observando la ecuación anterior podemos concluir que al especificar el potencial termodinámico Φ la métrica en \mathcal{E} queda determinada de manera única, módulo la constante Λ , la cual se puede fijar de acuerdo a las unidades que se utilizarán para medir en \mathcal{E} . Esta elección es uno de los problemas abiertos en GTD.

2.4. Geodésicas

Intuitivamente las geodésicas son curvas que minimizan la distancia entre dos puntos. Son la solución de la siguiente ecuación

$$U^\beta U^\alpha ;_\beta = 0 \quad (2.14)$$

en dónde $;$ denota la derivada covariante, entonces

$$U^\beta U^\alpha ;_\beta + \Gamma^\alpha_{\mu\beta} U^\mu U^\beta = 0 \quad (2.15)$$

En dónde $,$ denota la derivada parcial. Si definimos τ como el parámetro de la curva podemos reconocer algunos términos y llegar a una ecuación muy importante para el concepto de geodésica:

$$\begin{aligned} U^\beta U^\alpha ;_\beta &= U^\beta \frac{\partial}{\partial x^\beta} \left(\frac{dx^\alpha}{d\tau} \right) \\ &= \frac{d}{d\tau} \left(\frac{dx^\alpha}{d\tau} \right) \end{aligned} \quad (2.16)$$

También $U^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}$ y $U^\beta = \frac{dx^\beta}{d\tau}$, con esto llegamos a la *ecuación geodésica*

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{dx^\alpha}{d\tau} \right) + \Gamma^\alpha_{\mu\beta} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\beta}{d\tau} = 0 \quad (2.17)$$

Notamos que si τ es el parámetro de una geodésica, es decir de una curva que cumple con la ecuación anterior, entonces al definir un nuevo parámetro de la forma

$$\varphi = a\tau + b$$

el cuál es una transformación lineal, con a y b constantes, también se satisface la ecuación de la geodésica

$$\frac{d}{d\varphi} \left(\frac{dx^\alpha}{d\varphi} \right) + \Gamma^\alpha_{\mu\beta} \frac{dx^\mu}{d\varphi} \frac{dx^\beta}{d\varphi} = 0 \quad (2.18)$$

Los parámetros como τ y φ son llamados parámetros afines. En general se pueden tener curvas que sigan el mismo camino que la geodésica pero que están parametrizadas por un parámetro no-afín, estrictamente hablando estas curvas no son geodésicas.

Las contrucciones geométricas que se presentaron en las secciones anteriores y en esta pueden ser utilizadas para estudiar cualquier sistema termodinámico con dos grados de libertad, lo único que se necesita hacer es especificar la ecuación fundamental, de esta manera se pueden encontrar y estudiar sus propiedades geométricas y termodinámicas. Cabe mencionar que en GTD se pueden estudiar sistemas más generales con n grados de libertad, en esos casos las dimensiones de \mathcal{T} y de \mathcal{E} cambian de 5 y 2 a $2n + 1$ y n respectivamente.

En este trabajo se utilizarán las herramientas mencionadas en las secciones anteriores para describir dos sistemas termodinámicos: el gas ideal de Bose-Einstein y el gas ideal de Fermi-Dirac.

Capítulo 3

Gases Ideales cuánticos

Al trabajar con gases de bosones y fermiones se deben de tomar en cuenta ciertos conceptos referentes a mecánica cuántica. En mecánica cuántica las partículas están descritas por una función de onda $\Psi(r_1, r_2)$, dependiendo de la naturaleza del sistema la función de onda puede ser simétrica o antisimétrica, más adelante se revisará con mayor detalle esta condición.

Los bosones son partículas indistinguibles al igual que los fermiones, es decir, su Hamiltoniano \mathbf{H} , es invariante ante permutaciones de coordenadas. Entonces si se define un operador de permutación \mathbf{P} que actúa de la siguiente forma: $\mathbf{P}\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_2, r_1)$, se tiene que [10]

$$[\mathbf{H}, \mathbf{P}] = 0 \quad (3.1)$$

Lo anterior nos dice que las eigenfunciones de \mathbf{H} también serán eigenfunciones de \mathbf{P} con el mismo eigenvalor de energía E , es decir:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\Psi &= E\Psi \\ \mathbf{P}\mathbf{H}\Psi &= \mathbf{P}E\Psi = E\mathbf{P}\Psi \end{aligned} \quad (3.2)$$

El operador de permutación cumple que $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P} = \mathbf{I}$, donde \mathbf{I} es el operador identidad así que:

$$\mathbf{P}\mathbf{H}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\Psi = \mathbf{H}\mathbf{P}\Psi = E\mathbf{P}\Psi \quad (3.3)$$

Regresando a la condición de simetría(antisimetría), se tiene que :

$$\mathbf{P}\Psi(r_1, r_2) = \lambda\Psi(r_2, r_1) \quad (3.4)$$

Aplicando el operador de permutación nuevamente a la ecuación anterior y denotando λ como su eigenvalor se obtiene:

$$\mathbf{P}\mathbf{P}\Psi(r_1, r_2) = \mathbf{P}\lambda\Psi(r_2, r_1) = \lambda\mathbf{P}\Psi(r_2, r_1) = \lambda^2\Psi(r_1, r_2) \quad (3.5)$$

Entonces los eigenvalores deben cumplir que $\lambda^2 = 1$ de donde se sigue que $\lambda = \pm 1$. Así que las funciones de onda pueden ser simétricas o antisimétricas bajo una permutación de las coordenadas. Las funciones de onda simétricas corresponden a los bosones y las antisimétricas corresponden a los fermiones.

Los conceptos de partículas indistinguibles, funciones de onda simétricas y antisimétricas afectan la forma en la que realizan los conteos en estadística, es por eso que se tienen dos tipos distintos:

i) la estadística de Bose

ii) la estadística de Fermi

En las siguientes secciones se estudiarán los sistemas que obedecen estas estadísticas, se obtendrá su ecuación fundamental y se recuperará el caso clásico.

3.1. Gas ideal de Fermi

Un gas ideal de fermiones es un sistema formado por fermiones que no interactúan entre sí. Para poder hacer una descripción de este sistema primero se debe recordar que los fermiones están sujetos al Principio de Exclusión de Pauli. Este principio nos dice que dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico. Consideramos el sistema más simple de N partículas indistinguibles cuyo hamiltoniano está dado por [9]

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} \quad (3.6)$$

Los eigenvalores de este Hamiltoniano son la suma de las energías $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$, que corresponden a una partícula libre. El estado de este sistema se puede caracterizar utilizando el conjunto de números de ocupación $\{n_p\}$. Para fermiones este conjunto tiene como valores $n_p = 0, 1$ debido al Principio de Exclusión de Pauli. Con esto se obtiene la energía E y el

número de partículas N :

$$\begin{aligned} E &= \sum \varepsilon_p n_p \\ N &= \sum n_p \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para un gas ideal la función de partición está dada por

$$Q_n(T, V) = \sum_{\{n_p\}} g \{n_p\} \exp(-\beta E) \quad (3.8)$$

En donde $g \{n_p\}$ especifica el número de estados correspondientes al conjunto $\{n_p\}$. En el caso de fermiones este número es 1. Sin embargo debido a la ecuación (3.7), más específicamente a la condición que deben cumplir los números de ocupación, la función de partición no puede ser evaluada explícitamente. Por esto se recurre a la función de gran partición la cual está definida como:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(T, V, z) &= \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N(T, V) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} z^N \exp(-\beta E) \\ &= \sum_{\{n_p\}} z^N \exp(-\beta \sum \varepsilon_p n_p) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Donde z es la fugacidad definida como $z = \exp(\beta\mu)$ y μ el potencial químico. El término z^N se puede reescribir como $\exp(\beta\mu \sum n_p)$ entonces

$$\mathcal{Q}(T, V, z) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} \exp(\beta\mu \sum n_p) \exp(-\beta \sum \varepsilon_p n_p) \quad (3.10)$$

Desarrollando un poco las expresiones anteriores utilizando las propiedades de la función exponencial se llega a

$$\mathcal{Q}(T, V, z) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} \prod_{\{n_p\}} (z \exp(-\beta\varepsilon_p))^{n_p} \quad (3.11)$$

La doble suma que aparece en la expresión anterior junto con la restricción (3.7) son equivalentes a sumar los n_p de manera independiente, entonces para un gas ideal de fermiones

$n_p = 0, 1$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Q}(T, V, z) &= \sum_{n_0, n_1, \dots = 0} (z \exp(-\beta \varepsilon_p))^{n_p} & (3.12) \\
 &= \sum_{n_0, n_1, \dots = 0} (z \exp(-\beta \varepsilon_0))^{n_0} (z \exp(-\beta \varepsilon_1))^{n_1} \dots \\
 &= \left(\sum_{n_0=0}^{\infty} (z \exp(-\beta \varepsilon_0))^{n_0} \right) \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} (z \exp(-\beta \varepsilon_1))^{n_1} \right) \dots \\
 &= \prod_{p=0}^{\infty} \sum_{n_p=0}^1 (z \exp(-\beta \varepsilon_p))^{n_p}
 \end{aligned}$$

Recordando que $n_p = 0, 1$ la función de gran partición se simplifica considerablemente

$$\mathcal{Q}(T, V, z) = \prod_{p=0}^{\infty} (1 + z \exp(-\beta \varepsilon_p)) \quad (3.13)$$

Para poder encontrar las ecuaciones termodinámicas de este sistema se necesita tomar el logaritmo natural de la función de gran partición y con éste y sus derivadas respectos a β y μ , de esta manera se obtiene la energía interna y el número de partículas. Con U y N se puede obtener la energía libre de Helmholtz y a partir de esta construir la entropía.. Tomando el logaritmo natural de \mathcal{Q} se obtiene

$$\begin{aligned}
 \ln(\mathcal{Q}) &= \ln \left(\prod_{p=0}^{\infty} (1 + z \exp(-\beta \varepsilon_p)) \right) & (3.14) \\
 &= \sum_{p=0}^{\infty} \ln(1 + z \exp(-\beta \varepsilon_p))
 \end{aligned}$$

Entonces la energía interna y el número de partículas se calculan de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\mathcal{Q}) & (3.15) \\
 N &= k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln(\mathcal{Q})
 \end{aligned}$$

Derivando las expresiones correspondientes se llega a

$$\begin{aligned} U &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{z \varepsilon_p \exp(-\beta \varepsilon_p)}{1 + z \exp(-\beta \varepsilon_p)} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_p}{1 + z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p)} \end{aligned} \quad (3.16)$$

y

$$\begin{aligned} N &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{z \exp(-\beta \varepsilon_p)}{1 + z \exp(-\beta \varepsilon_p)} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p) + 1} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Comparando la ecuación (3.17) con la (3.7) reconocemos la expresión para n_p

$$n_p = \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p) + 1} \quad (3.18)$$

La ecuación anterior es conocida como *distribución de Fermi*.

Al trabajar en el límite termodinámico, $V \rightarrow \infty$, las ecuaciones para U y N se pueden calcular mediante integrales sobre p , esto se debe a que los estados de energía ε_p están arbitrariamente juntos y los valores posibles que puede tomar p forman un continuo. De esta manera reemplazamos $\sum_p \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p$ lo cual se puede escribir como $\frac{4\pi V}{h^3} \int p^2 dp$.

Recordando que $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ lo anterior se puede expresar como

$$\frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon \quad (3.19)$$

Entonces U y N se pueden escribir de la siguiente manera cambiando h por $2\pi\hbar$

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon) + 1} d\varepsilon \\ U &= \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon) + 1} d\varepsilon \end{aligned} \quad (3.20)$$

Para poder resolver (3.20) se utiliza un cambio de variable $x = \beta \varepsilon$. Las integrales resultantes

realizando la sustitución adicional $\beta = \frac{1}{k_B T}$ son

$$N = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1} \exp(x) + 1} dx \quad (3.21)$$

$$U = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} k_B T \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}}}{z^{-1} \exp(x) + 1} dx$$

Las integrales que aparecen en (3.12) son conocidas como *integrales de Fermi*. Estas integrales se representan como

$$f_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{z^{-1} \exp(x) + 1} dx \quad (3.22)$$

En donde $\Gamma(n)$ es la función Gamma de Euler, algunos valores de esta función que serán de utilidad son $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$. Utilizando lo anterior las expresiones finales para la energía interna y el número de partículas son

$$N = \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (3.23)$$

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} f_{5/2}(z)$$

En donde $\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{1}{2}}$ es la longitud de onda térmica. Para valores de $z \ll 1$ $f_n(z)$ se representa como una serie de potencias (Apéndice A)

$$f_n(z) = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \frac{z^j}{j^n} \quad (3.24)$$

Para poder encontrar $F = F(T, V)$ para N fijo debemos eliminar z de las ecuaciones para U y N . Lo más ideal sería tener la entropía $S = S(U, V)$ pero para este sistema obtener S como función de las variables extensivas (U, V) no es algo sencillo de realizar, ya que despejar la temperatura de la ecuación para U presenta muchos problemas, en cambio F es más sencillo de construir y apartir de éste con ayuda de $F = U - TS$ se puede construir la entropía pero como función de (T, V) . La invarianza de Legendre nos asegura que los resultados que se obtengan no dependerán del potencial termodinámico que se utilice.

Entonces de la ecuación (3.23) y de la ecuación (3.24) se obtiene lo siguiente

$$\sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \frac{z^j}{j^{\frac{3}{2}}} = \frac{\lambda^3 N}{V} \quad (3.25)$$

Se necesita despejar z en términos de λ^3, N, V así que se propone una serie de la forma

$$z = z_1 \left(\frac{N}{V} \right) + z_2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 + z_3 \left(\frac{N}{V} \right)^3 + \dots$$

Esta serie se sustituye en la ecuación (3.25) y se compara a primer orden, a segundo orden y así sucesivamente hasta que se obtiene lo siguiente

$$z = \left(\frac{\lambda^3 N}{V} \right) + \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\lambda^3 N}{V} \right)^2 + \dots \quad (3.26)$$

La energía libre de Helmholtz está dada por $F = U - TS$ lo cual se puede escribir como

$$F = -pV + N\mu \quad (3.27)$$

En la expresión anterior aparece el término pV pero las ecuaciones que tenemos son para U y N . Una relación bastante útil que se cumple para cualquier gas ideal es $pV = \frac{2}{3}U$. Ahora utilizando la expresión que se encontró para z se puede escribir F cortando a segundo orden

$$\begin{aligned} F = & -Nk_B T - \frac{N^2 k_B}{2^{\frac{5}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right) \left(\frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \right) \\ & + Nk_B T \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) + Nk_B T \ln \left(1 + \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Considerando el límite de altas temperaturas se obtiene

$$F = -Nk_B T + Nk_B T \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) + \frac{N^2}{2^{\frac{5}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (3.29)$$

Utilizando $S = \frac{1}{T}(U - F)$ obtenemos la entropía del gas ideal de Fermi

$$S = \frac{5}{2} Nk_B - Nk_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) + \frac{N^2 k_B}{2^{\frac{7}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.30)$$

La ecuación para la entropía será la que utilizaremos para calcular la métrica en el siguiente capítulo.

3.2. Gas Ideal de Bose

Un gas ideal de bosones es un sistema formado por bosones los cuales no interaccionan entre sí. A diferencia de los fermiones los bosones no tienen restricciones en cuanto al número de partículas que pueden ocupar un estado cuántico.

Nuevamente se trabajará con el sistema más sencillo de N partículas sin interacción mutua, descritos por el mismo hamiltoniano de la sección anterior

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} \quad (3.31)$$

Siendo $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ la energía de una partícula libre. El conjunto de números de ocupación para este sistema, $\{n_p\}$, no tiene restricciones entonces $n_p = 0, 1, 2, \dots$. Como se vió en la sección anterior la función de partición de los gases ideales está dada por la ecuación (3.11) y la energía y el número de partículas por la ecuación (3.7). El desarrollo de la función de partición es distinto al realizado para el gas de Fermi, en este caso se tiene que

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(T, V, z) &= \left(\sum_{n_0=0}^{\infty} (z \exp(-\beta\varepsilon_0))^{n_0} \right) \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} (z \exp(-\beta\varepsilon_1))^{n_1} \right) \cdots \\ &= \prod_{p=0}^{\infty} \sum_{n_p=0}^{\infty} (z \exp(-\beta\varepsilon_p))^{n_p} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Si se pone $r = z \exp(-\beta\varepsilon_p)$ se tiene una serie geométrica $\sum_{j=0}^{\infty} r^j$ y para que esta serie converja se necesita que $r < 1$ entonces $z \exp(-\beta\varepsilon_p) < 1$ lo cual sucede si $\mu < 0$. Así que

$$\sum_{j=0}^{\infty} r^j = \frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_p)}$$

Finalmente la función de partición para el gas ideal de Bose es

$$\mathcal{Q}(T, V, z) = \prod_{p=0}^{\infty} \frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_p)} \quad (3.33)$$

Análogamente a lo que se hizo para el gas de Fermi, se necesita tomar el logaritmo natural

de la función de partición y derivarlo respecto de β y μ para poder obtener U y N . Entonces

$$\begin{aligned}\ln(\mathcal{Q}) &= \ln \left(\prod_{p=0}^{\infty} \frac{1}{1 - z \exp(-\beta \varepsilon_p)} \right) \\ &= - \sum_{p=0}^{\infty} \ln(1 - z \exp(-\beta \varepsilon_p))\end{aligned}\quad (3.34)$$

Utilizando (3.15) obtenemos las ecuaciones correspondientes a la energía interna

$$\begin{aligned}U &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{z \varepsilon_p \exp(-\beta \varepsilon_p)}{1 - z \exp(-\beta \varepsilon_p)} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_p}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p) - 1}\end{aligned}\quad (3.35)$$

y al número de partículas

$$\begin{aligned}N &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{z \exp(-\beta \varepsilon_p)}{1 - z \exp(-\beta \varepsilon_p)} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p) - 1}\end{aligned}\quad (3.36)$$

Al comparar con la ecuación (3.7) se reconoce el término para n_p

$$n_p = \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_p) - 1}\quad (3.37)$$

La expresión anterior se conoce como *distribución de Bose*

Nuevamente reemplazamos las sumas sobre p por integrales sobre p ya que seguimos trabajando en el límite termodinámico ($V \rightarrow \infty$). Entonces hacemos el cambio $\sum_p \rightarrow \frac{4\pi}{V} h^3 \int p^2 dp$

y usando que $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ podemos reescribir las ecuaciones para U y N como

$$\begin{aligned}N &= \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon) - 1} d\varepsilon \\ U &= \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon) - 1} d\varepsilon\end{aligned}\quad (3.38)$$

Realizando las sustituciones $x = \beta \varepsilon$ y $\beta = \frac{1}{k_B T}$ reescribimos las ecuaciones anteriores

como

$$N = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{z^{-1} \exp(x) - 1} dx \quad (3.39)$$

$$U = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} k_B T \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}}}{z^{-1} \exp(x) - 1} dx$$

Al igual que el caso del gas ideal de Fermi las integrales que aparecen en las ecuaciones anteriores también tienen una representación especial y son conocidas como *integrales de Bose*

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{(z^{-1} \exp(x) - 1)} dx \quad (3.40)$$

Se debe tener especial cuidado al trabajar con el término correspondiente a $\varepsilon = 0$ ya que este no aparece al hacer el cambio de suma a integral, por eso es mejor separarlo de la integral y escribirlo explícitamente. Este término es de especial importancia trabajando en regiones para las cuales $z = 1$, lo denotaremos como $N_0 = \frac{z}{1-z}$. De esta manera la energía interna y el número de partículas son

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + N_0 \quad (3.41)$$

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$

En este trabajo se está considerando el límite termodinámico para el cual $V \rightarrow \infty$, en esta aproximación $z \ll 1$ entonces observando el término $\frac{z}{1-z}$ y reescribiendo N como $\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z}$ podemos ver que $\frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \rightarrow 0$, entonces el número de partículas que ocupan el estado base es descartable y todas las partículas están en estados excitados. Como $z \ll 1$ g_n se representa como una serie de potencias (Apéndice B)

$$g_n = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^n} \quad (3.42)$$

Primero encontraremos F para después construir $S = S(T, V)$ pero al igual que en el caso anterior despejar a la energía interna en términos de T es bastante complicado así que no se trabajará $S = S(U, V)$ lo cual no afecta los resultados que se obtengan ya que como se había dicho la invarianza de Legendre nos permite trabajar con cualquier potencial termodinámico. Como se vio en la sección anterior $F = U - TS = -pV + N\mu$. Para poder obtener $F = F(T, V)$ es necesario eliminar a la fugacidad de las ecuaciones para U y N . El

procedimiento es análogo al de gas de fermiones, primero con la ayuda de (3.41) y (3.40) escribimos

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^{\frac{3}{2}}} = \frac{\lambda^3 N}{V} \quad (3.43)$$

Proponemos una serie de la forma

$$z = z_1 \left(\frac{N}{V} \right) + z_2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 + z_3 \left(\frac{N}{V} \right)^3 + \dots$$

Se sustituye en la ecuación (3.42) y se compara a primer orden, luego a segundo orden y así sucesivamente hasta obtener una expresión para la fugacidad en términos de λ, N, V

$$z = \left(\frac{\lambda^3 N}{V} \right) - \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\lambda^3 N}{V} \right)^2 + \dots \quad (3.44)$$

Utilizando nuevamente $pV = \frac{2}{3}U$ y z se escribe la expresión para F cortando a segundo orden

$$F = -Nk_B T + \frac{N^2 k_B}{2^{\frac{5}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right) \left(\frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \right) + Nk_B T \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) + Nk_B T \ln \left(1 - \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (3.45)$$

Entonces la energía libre de Helmholtz para este gas es

$$F = -Nk_B T + Nk_B T \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) - \frac{N^2}{2^{\frac{5}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right) \left(\frac{1}{T^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (3.46)$$

Finalmente utilizando la relación termodinámica para la entropía $S = \frac{1}{T}(U - F)$ se obtiene

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) - \frac{N^2 k_B}{2^{\frac{7}{2}} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.47)$$

La ecuación anterior será utilizada para calcular la métrica en el siguiente capítulo.

3.3. Límite de Boltzmann

Siempre es recomendable comprobar que los resultados obtenidos en las secciones anteriores se reduzcan al caso clásico al tomar el límite correcto. Para temperaturas altas (densidades bajas) muy pocas partículas están distribuidas en varios niveles, esto sucede

cuando $\exp(\beta\mu) \ll 1$, es decir, cuando la fugacidad es muy pequeña. En este contexto las distribuciones de Bose y de Fermi tienden a la distribución de Boltzmann

$$\begin{aligned} n_p &= \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon_p) \pm 1} \\ &\simeq \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon_p)} = z \exp(-\beta\varepsilon_p) \end{aligned} \quad (3.48)$$

Entonces con esta distribución se puede recuperar las ecuaciones de estado de un gas ideal clásico. Calculamos U y N como en las secciones anteriores

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{4\pi^2\hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int z\varepsilon^{\frac{1}{2}} \exp(-\beta\varepsilon) d\varepsilon \\ U &= \frac{V}{4\pi^2\hbar^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \int z\varepsilon^{\frac{3}{2}} \exp(-\beta\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned} \quad (3.49)$$

A diferencia de las integrales que aparecen en las expresiones para la energía interna y el número de partículas de los gases de Bose y Fermi, estas integrales son bastante sencillas y se pueden resolver utilizando el cambio de variable $x = \beta\varepsilon$ junto con la definición de función Gamma

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{4\pi^2\hbar^3} z (2mk_B T)^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \\ U &= \frac{Vk_B T}{4\pi^2\hbar^3} z (2mk_B T)^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Pero $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ y $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$ entonces

$$\begin{aligned} N &= \frac{zV}{\lambda^3} \\ U &= \frac{3}{2} k_B T \frac{zV}{\lambda^3} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Si dividimos las ecuaciones anteriores obtenemos

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \quad (3.52)$$

Y finalmente utilizando $p = \frac{2U}{3V}$ se llega a

$$pV = N k_B T \quad (3.53)$$

Que son las ecuaciones de estado de un gas ideal clásico. Con estas ecuaciones es posible construir la entropía de un gas ideal clásico. Si recordamos que $S = S(U, V)$ la diferencial

es $dS = \frac{\partial S}{\partial U}dU + \frac{\partial S}{\partial V}dV$, al resolverla con ayuda de (3.52) y (3.53) se obtiene

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^{\frac{3}{2}} + Nk_B \ln \left(\frac{U^{\frac{3}{2}}V}{N^{\frac{5}{2}}} \right) \quad (3.54)$$

La expresión anterior la podemos escribir como

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V} \right) \quad (3.55)$$

Con lo anterior hemos comprobado que los gases de Fermi y Bose se comportan como se espera en el límite clásico, es decir tienden al gas ideal de Boltzmann.

Capítulo 4

Geometrotermodinámica de gases ideales cuánticos

En este capítulo se utilizarán las ecuaciones obtenidas en el capítulo 3 para encontrar la métrica correspondiente al gas ideal de Fermi y la métrica correspondiente al gas ideal de Bose. Después con esas métricas, se calculará el tensor de Riemann, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura.

En cada caso se obtuvo la entropía como función de las variables (T, V) . Lo más usual es obtener el potencial termodinámico como función de variables extensivas, por ejemplo (U, V) o (S, V) , de esta manera se trabaja en la representación de la energía o la entropía. Sin embargo obtener $S = S(U, V)$ para los sistemas termodinámicos que se están estudiando resultó una tarea bastante complicada, todo eso debido a que la relación entre la energía y la temperatura está dada por una serie.

Así que para estos gases \mathcal{E} está construido con (T, V) como coordenadas. Recalcamos que esto no es problema ya que GTD nos permite trabajar con cualquier subespacio de \mathcal{T} para definir el espacio de estados de equilibrio \mathcal{E} . También es importante mencionar que de $S = S(T, V)$ la cual es la ecuación que determina la geometría de \mathcal{E} se pueden derivar las ecuaciones de estado del sistema. En este capítulo demostraremos que esto es cierto.

4.1. Gas Ideal de Fermi

4.1.1. Métrica

Utilizando la ecuación encontrada en el capítulo anterior calculamos la métrica para un gas ideal de Fermi. Esta métrica es la más general, invariante ante transformaciones totales y

parciales de Legendre. Recordando un poco, la métrica en el espacio de estados de equilibrio está dada por

$$g = \Lambda \left(E_\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial E^\alpha} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^\beta \partial E^\gamma} \delta_{\alpha\beta} dE^\alpha dE^\gamma \quad (4.1)$$

En nuestro caso

$$\begin{aligned} \Phi &= S \\ E^\alpha &= (T, V) \end{aligned} \quad (4.2)$$

La 1-forma de Gibbs está dada por:

$$\Theta = dS - \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT - \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \quad (4.3)$$

Aplicando (2.6) obtenemos

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \quad (4.4)$$

Después escribimos la métrica en el espacio fase utilizando la ecuación (2.11)

$$\begin{aligned} G &= \left(dS - \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT - \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \right)^2 \\ &+ \left\{ T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Al proyectarla obtenemos la métrica en el espacio de estados de equilibrio

$$\begin{aligned} g &= \left\{ \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial T^2} (dT)^2 + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial V^2} (dV)^2 \right\} \\ &\left[T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \right] \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} dV dT \end{aligned} \quad (4.6)$$

En donde S está dada por

$$S = \frac{5}{2} N k_B - N k_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) + \frac{N^2 k_B}{2^{7/2} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2} \quad (4.7)$$

Utilizando el programa computacional Maple 14 se calcula la forma de la métrica. La

generamos como una matriz de 2×2

$$\mathbf{g}_F = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Las componentes son:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{11} &= -\frac{9}{128} \frac{N^2 \left(-4k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right) \left(-8 k_B^2 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} V m^2 T^2 + 5 N \pi^2 \hbar^4 \right)}{T^5 V^2 m^3 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} k_B} \\ \mathbf{g}_{22} &= -\frac{1}{8} \frac{N^2 \left(-4 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right) \left(-2 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right)}{V^4 m^2 T^2} \\ \mathbf{g}_{12} &= -\frac{15}{128} \frac{N^3 \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \left(-4 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right)}{V^3 m^2 T^3} = \mathbf{g}_{21} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Como podemos observar la forma de la métrica no es simple, esto afectará en las expresiones para el tensor de curvatura, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura.

4.1.2. Curvatura

Nuevamente utilizando Maple 14 se calcula el tensor de curvatura, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura. En principio es suficiente presentar el valor para el escalar de curvatura debido a que el espacio de estados de equilibrio es de dos dimensiones, entonces el escalar y el tensor de curvatura son proporcionales, pero para ser formales presentamos el resultado para el tensor de curvatura. Como se mencionó en la sección anterior es difícil escribir de manera compacta las expresiones correspondientes para los tensores sin embargo la expresión para el escalar es más sencilla de escribir. Primero presentamos los resultados obtenidos.

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^\alpha{}_{\beta\mu\nu} &\neq 0 \\ \mathcal{R}_{\alpha\beta} &\neq 0 \\ \mathcal{R} &\neq 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

En dónde el escalar de curvatura está dado por

$$\mathcal{R} = \frac{\mathcal{P}}{\mathcal{J} \times \mathcal{F}} \quad (4.11)$$

Donde

$$\begin{aligned} \mathcal{P} = & 16384V^3\pi^2\hbar^6 \left(9\pi^5\hbar^{10}N^3 - 256m^5T^5\sqrt{\pi}k_B^5\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}V^3 \right. \\ & \left. + 272\hbar^4\pi^2m^3k_B^3T^3V^2N - 88\hbar^6\pi^{7/2}m^2k_B^2T^2\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}VN^2 \right) \\ & \times \left(55N^2\pi^{7/2}\hbar^6 + 256m^3T^3k_B^3\sqrt{\pi}V^2 - 288m^2T^2\hbar^2k_B^2\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}\pi^2VN \right) mT \end{aligned} \quad (4.12)$$

y

$$\mathcal{J} \left(-4k_BVmT + N\pi^{3/2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}\hbar^2 \right)^3 \times k_B\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}N \quad (4.13)$$

$$\mathcal{F} = \left(256k_B^3\sqrt{\pi}\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}V^2m^3T^3 - 288K\pi^2\hbar^4mTVN + 55N^2\pi^{7/2}\hbar^6\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}} \right)^3 \quad (4.14)$$

Lo anterior nos dice que para el gas ideal de Fermi **existe interacción termodinámica** desde el punto de la GTD. Esta interacción termodinámica se debe a efectos cuánticos. Estos efectos son notorios desde el cálculo de la ecuación para la energía libre de Helmholtz y consecuentemente para la entropía ya que podemos observar una corrección a la ecuación para un gas ideal de Boltzmann.

Como se menciona en el capítulo 2 el comportamiento de escalar de (figura 4.1) nos proporciona información respecto a las transiciones de fase que pueden tener los sistemas termodinámicos, entonces basandonos en esto podemos interpretar los picos en la gráfica como singularidades en el escalar de curvatura y consecuentemente como **posibles** transiciones de fase para este sistema. En la literatura [9][7] no se mencionan transiciones de fase en la regiones $z \ll 1$, $z \gg 1$ ni en la frontera entre las dos.

La gráfica que se presenta en la figura 4.1 fue realizada tomando $k_B = m = \hbar = N = 1$. Más adelante haremos un análisis para probar que la elección de las constantes no afecta el comportamiento de \mathcal{R} .

Para asegurar que el comportamiento del escalar no depende de las constantes, hacemos un análisis extra utilizando $\hbar = k_B = 1$ y $m = 2\pi$. También reescribiremos la ecuación

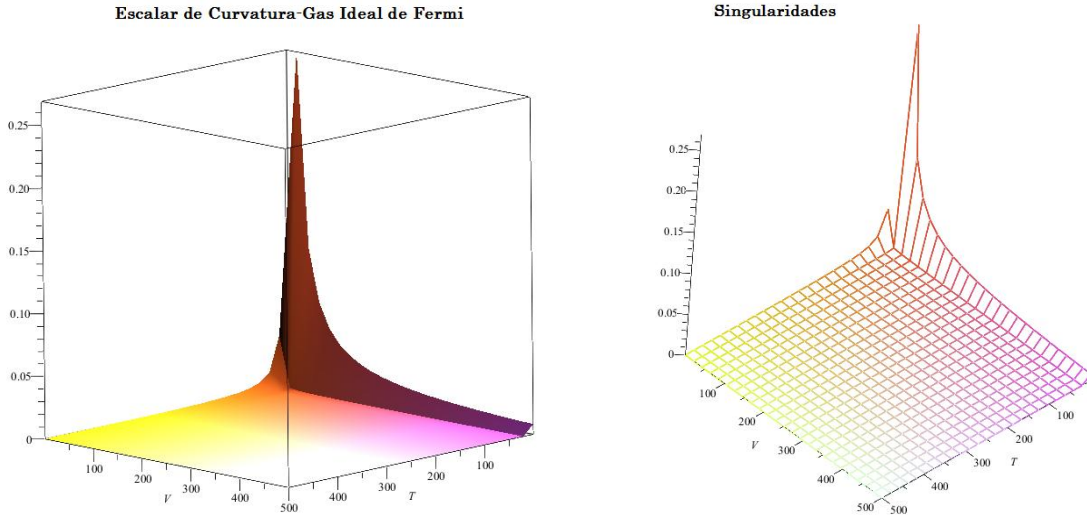


Figura 4.1: *Escalar de Curvatura para un Gas Ideal de Fermi*

fundamental utilizando esta convención

$$S = S_0 - \ln \left(\left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) + \frac{cN^2}{V} \left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} \quad (4.15)$$

Donde $c = \frac{1}{2^{7/2}}$. Si calculamos nuevamente el escalar de curvatura usando la ecuación anterior se llega a

$$\mathcal{R} = \frac{256 c V^3 T^{9/2} (-4 V^3 T^{9/2} + 17 T^3 V^2 c N + 9 c^3 N^3 - 22 T^{3/2} c^2 N^2 V)}{(16 T^3 V^2 - 72 V T^{3/2} c N + 55 c^2 N^2)^2 N (-V T^{3/2} + c N)^3} \quad (4.16)$$

La expresión anterior es más sencilla de analizar. Primero graficamos, para mostrar que efectivamente la forma del escalar y su comportamiento no dependen de las constantes. La gráfica se presenta en la figura (4.2). Comparando con la figura (4.1) observamos que la superficie generada es la misma, lo único que cambia es el valor del escalar en el pico.

Antes de asegurar que las singularidades en el escalar de curvatura corresponden a transiciones de fase, es necesario analizar los puntos en los que el escalar diverge. Para hacer eso tomamos el denominador de la expresión (4.17) y resolvemos para V

$$\left(16 T^3 V^2 - 72 V T^{3/2} c N + 55 c^2 N^2 \right)^2 N \left(-V T^{3/2} + c N \right)^3 = 0 \quad (4.17)$$

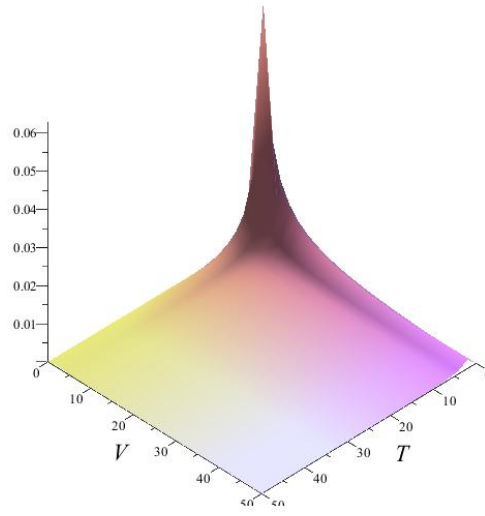


Figura 4.2: Segunda gráfica del escalar de curvatura para un Gas Ideal de Fermi.

Las raíces son

$$V = \frac{c}{T^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{de multiplicidad } 3) \quad (4.18)$$

$$V = \frac{1}{4} \frac{(9 + \sqrt{26})c}{T^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{de multiplicidad } 2)$$

$$V = -\frac{1}{4} \frac{(-9 + \sqrt{26})c}{T^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{de multiplicidad } 2)$$

Reescribimos las expresiones utilizando que $\left(\frac{9 + \sqrt{26}}{4}\right) \approx 3,52$ y $\left(\frac{-9 + \sqrt{26}}{4}\right) \approx 0,98$, entonces

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} \frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} &= \frac{1}{c} \\ \frac{N}{V} \frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} &= \frac{1}{3,52c} \\ \frac{N}{V} \frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} &= \frac{1}{0,98c} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Recordando el valor de la constante $c = \frac{1}{2^{\frac{7}{2}}} > 0$, podemos simplificar las raíces

$$\begin{aligned}\frac{N}{V} \left(\frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} \right) &= 2^{\frac{7}{2}} \approx 11,31 > 1 \\ \frac{N}{V} \left(\frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} \right) &= \frac{2^{\frac{7}{2}}}{3,52c} \approx 3,21 > 1 \\ \frac{N}{V} \left(\frac{1}{T^{\frac{3}{2}}} \right) &= \frac{2^{\frac{7}{2}}}{0,98c} \approx 11,54 > 1\end{aligned}\tag{4.20}$$

Primero observamos que todas las raíces son positivas, entonces pueden representar posibles puntos en donde ocurra una transición de fase. Sin embargo analizando un poco más a detall observamos también que todas son mayores que 1. Si recordamos en el capítulo 1, se presentó un criterio para caracterizar distintas regiones de análisis para estos sistemas, nosotros trabajamos en la región para la cual

$$\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \ll 1\tag{4.21}$$

Con la convención $\hbar = k_B = 1$ y $m = 2\pi$ se obtiene

$$\frac{N}{V} \left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} \ll 1\tag{4.22}$$

Comparando con las expresiones para las raíces observamos que implican

$$\frac{N}{V} \left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} > 1\tag{4.23}$$

contradiendo la ecuación (4.23). Entonces todos los puntos en donde el escalar de curvatura presenta singularidades quedan fuera de la región física que estamos analizando, estos puntos efectivamente corresponden a singularidades de la función que representa el escalar de curvatura pero no tienen significado físico. Así que de acuerdo con *GTD* el gas ideal de Fermi presenta interacción termodinámica pero no transiciones de fase, todo en la vecindad clásica.

4.1.3. Límite de Boltzmann

Ahora recuperaremos los resultados para un gas ideal de Boltzmann. Primero a nivel de la ecuación para la entropía. En el límite de altas temperaturas ésta se reduce a

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) \quad (4.24)$$

La ecuación anterior es equivalente a (3.54) utilizando $T = \frac{2}{3} \frac{U}{Nk_B}$. La métrica es entonces

$$g = \left\{ \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial T^2} (dT)^2 + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial V^2} (dV)^2 \right\} \quad (4.25)$$

$$\left[T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \right] \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} dV dT$$

Reconociendo las condiciones de equilibrio

$$\frac{\partial S}{\partial T} = \frac{C_V}{T} \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{\partial P}{\partial T} = \frac{Nk_B}{V}$$

Con lo anterior la métrica queda representada por

$$g = -C_V^2 \left(\frac{dT^2}{T^2} \right) - Nk_B^2 \left(\frac{dV^2}{V^2} \right) \quad (4.27)$$

Explícitamente la métrica es

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} -\frac{9}{4} \frac{N^2 k_B^2}{T^2} & 0 \\ 0 & -\frac{N^2 k_B^2}{V^2} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Haciendo el cambio de coordenadas

$$\zeta = \ln(T) \quad (4.29)$$

$$\xi = \ln(V)$$

Se obtiene una métrica que toma la forma Euclidena

$$g = -C_V^2 d\zeta^2 - Nk_B^2 d\xi^2 \quad (4.30)$$

Con lo anterior podemos anticipar que las componentes la curvatura termodinámica serán iguales a cero. Entonces al calcular el tensor de curvatura, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^\alpha{}_{\beta\mu\nu} &= 0 \\ \mathcal{R}_{\alpha\beta} &= 0 \\ \mathcal{R} &= 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

De lo anterior se observa que todos las componentes de la curvatura termodinámica son idénticas a cero. De esta manera se recuperan los resultados para un gas ideal clásico [13]. Para terminar con el gas ideal de Fermi mostraremos que a nivel de curvatura también se recuperan los resultados para un gas ideal de Boltzmann. Tomando las expresiones para el tensor de curvatura y para el escalar calculamos el límite cuando la temperatura es lo suficientemente alta ($T \rightarrow \infty$). Con ayuda de Maple llegamos a

$$\lim_{T \rightarrow \infty} R^\alpha{}_{\beta\mu\nu} = 0 \quad (4.32)$$

Con lo anterior comprobamos que en el límite el tensor de curvatura, el de Ricci y el escalar reproducen lo que se obtiene para un gas ideal clásico.

4.2. Gas Ideal de Bose

4.2.1. Métrica

Ahora con la ecuación para la entropía de un gas ideal de bosones calculamos la métrica. Nuevamente la métrica es la más general invariante ante transformaciones totales y parciales de Legendre. Recordamos la forma

$$g = \Lambda \left(E_\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial E^\alpha} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^\beta \partial E^\gamma} \delta_{\alpha\beta} dE^\alpha dE^\gamma \quad (4.33)$$

La 1-forma de Gibbs es similar a la del gas ideal de Fermi

$$\Theta = dS - \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT - \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \quad (4.34)$$

La métrica en el espacio fase está dada por

$$G = \left(dS - \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT - \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \right)^2 + \left\{ T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) \right\} \quad (4.35)$$

Utilizando las condiciones (2.6) y (2.7) respectivamente se obtiene lo siguiente

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) dT + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right) dV \quad (4.36)$$

y

$$g = \left\{ \left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial T^2} (dT)^2 + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial V^2} (dV)^2 \right\} + \left[T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right) \right] \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} dV dT \quad (4.37)$$

También tenemos los valores para $k = 0$ y $\Lambda = 1$. Ahora recordando que la entropía es

$$S = \frac{5}{2} N k_B - N k_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) - \frac{N^2 k_B}{2^{7/2} V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2} \quad (4.38)$$

y utilizando Maple 14 calculamos la métrica para el gas ideal de Bose. Análogamente se genera como una matriz

$$\mathbf{g}_B = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

En este caso las componentes son:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{11} &= -\frac{9}{128} \frac{N^2 \left(4 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right) \left(8 k_B^2 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} V m^2 T^2 + 5 N \pi^2 \hbar^4 \right)}{T^5 V^2 m^3 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} k_B} \\ \mathbf{g}_{22} &= -\frac{1}{8} \frac{N^2 \left(4 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right) \left(2 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right)}{V^4 m^2 T^2} \\ \mathbf{g}_{12} &= -\frac{15}{128} \frac{N^3 \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \left(4 k_B V m T + N \pi^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m k_B T}} \hbar^2 \right)}{V^3 m^2 T^3} = \mathbf{g}_{21} \end{aligned} \quad (4.40)$$

La métrica del gas ideal de Bose es similar a la del gas ideal de Fermi con la excepción de

algunos signos, pero nuevamente la forma no es sencilla.

4.2.2. Curvatura

Con ayuda de Maple 14 calculamos el tensor de curvatura, el Ricci y el escalar de curvatura. Como se mencionó anteriormente es suficiente presentar el valor del escalar pero de igual manera presentaremos los resultados para éste y los dos tensores. Así que para el gas ideal de Bose obtenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^\alpha{}_{\beta\mu\nu} &\neq 0 \\ \mathcal{R}_{\alpha\beta} &\neq 0 \\ \mathcal{R} &\neq 0\end{aligned}\tag{4.41}$$

El escalar de curvatura tiene la siguiente forma

$$\mathcal{R} = \frac{\mathcal{P}}{\mathcal{J} \times \mathcal{F}}\tag{4.42}$$

Donde

$$\begin{aligned}\mathcal{P} = & -16384V^3\pi^2\hbar^6 \left(9\pi^5\hbar^{10}N^3 + 256m^5T^5\sqrt{\pi}k_B^5\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}V^3 \right. \\ & \left. + 272\hbar^4\pi^2m^3k_B^3T^3V^2N + 88\hbar^6\pi^{7/2}m^2k_B^2T^2\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}VN^2 \right) \\ & \times \left(55N^2\pi^{7/2}\hbar^6 + 256m^3T^3k_B^3\sqrt{\pi}V^2 + 288m^2T^2\hbar^2k_B^2\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}\pi^2VN \right) mT\end{aligned}\tag{4.43}$$

y

$$\mathcal{J} = \left(4k_BVmT + N\pi^{3/2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}\hbar^2 \right)^3 \times k_B\sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}}N\tag{4.44}$$

$$\mathcal{F} = \left(256k_B^3 \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}} V^2 m^3 T^3 + 288k_B \pi^2 \hbar^4 m T V N + 55 N^2 \pi^{7/2} \hbar^6 \sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}} \right)^3 \quad (4.45)$$

Análogamente a los resultados obtenidos para el gas ideal de fermiones, los resultados para el gas ideal de Bose nos dicen que **existe interacción termodinámica** desde el punto de vista de GTD. Esta interacción se debe a efectos cuánticos, los cuales se hacen notar desde el cálculo de la entropía. Estos efectos deben dejar de influir en el límite de altas temperaturas como veremos en la siguiente sección. Mostramos el comportamiento del escalar de curvatura (figura 4.2) en donde se ha tomado $k_B = m = \hbar = N = 1$. Las posibles singularidades del escalar ocurren cuando $\mathcal{J} = 0$ y $\mathcal{F} = 0$. Para analizar mejor este comportamiento y mostrar que no depende de la elección de constantes haremos un análisis extra. Notamos un pico en la gráfica, que nuevamente interpretamos como una

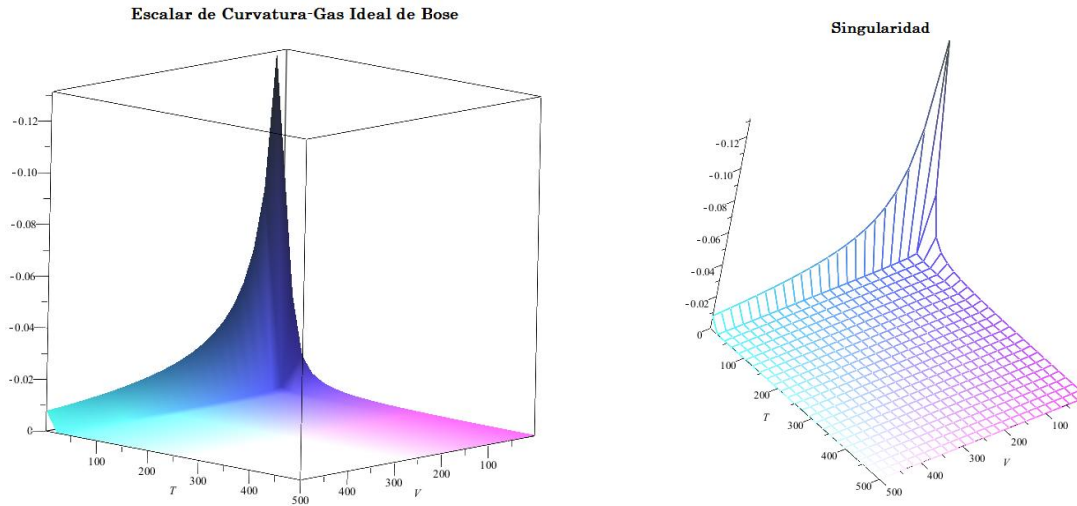


Figura 4.3: Escalar de Curvatura para un Gas Ideal de Bose

posible transición de fase por lo discutido anteriormente. Esta posible transición de fase se presenta en la región para la cual $z \ll 1$, en esta región no existen transiciones de fase de acuerdo con la literatura clásica. Para un gas ideal de Bose la transición de fase más famosa es la *condensación Bose-Einstein* la cual ocurre en la región para $z = 1$, que es la frontera entre la región clásica y la región cuántica. En esta región el término

$$\frac{1}{V} \frac{z}{1-z}$$

en la ecuación

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \quad (4.46)$$

ya no puede ser descartado. Recordando un poco, ese término corresponde al estado base del sistema, $\varepsilon = 0$ ($\mathbf{p} = 0$). De lo anterior se deduce que una fracción finita de partículas ocupa el estado base, esto se conoce como condensación Bose-Einstein. En esta región la ecuación (3.42) toma la forma de la función Zeta de Riemann

$$g_n(1) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1^j}{j^n} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2,612\dots \quad (4.47)$$

Dicha transición de fase está caracterizada en la literatura de maneras distintas, en [7] la condensación Bose-Einstein es una transición de fase de segundo orden y en [9] es una transición de primer orden. Como podemos ver la posible transición de fase que nos indica el escalar de curvatura no corresponde a la condensación Bose-Einstein, ya que el análisis se ha hecho para la región clásica.

Entonces para poder comprobar o descartar las singularidades que tiene el escalar como posibles transiciones de fase es necesario hacer un análisis extra. Primero presentamos una gráfica tomando la convención $\hbar = k_B = 1$ y $m = 2\pi$. Observamos que la superficie que se genera (figura 4.4) es la misma comparada con la figura 4.3, la única diferencia es el valor del pico. Lo anterior nos asegura que la elección de las constantes no afecta el comportamiento de \mathcal{R} . Ahora reescribimos la ecuación para la entropía utilizando la convención anterior

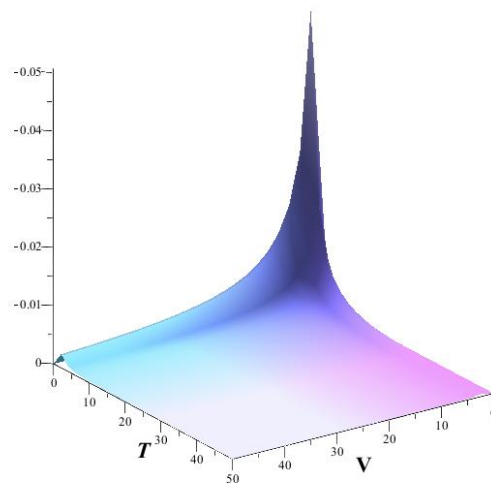


Figura 4.4: Segunda gráfica del escalar de curvatura para un Gas Ideal de Bose

$$S = S_0 - \ln \left(\left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) + \frac{bN^2}{V} \left(\frac{1}{T} \right)^{3/2} \quad (4.48)$$

En este caso $b = -\frac{1}{2^{7/2}}$. Repitiendo el cálculo del escalar de curvatura se obtiene una expresión mucho más sencilla de analizar

$$\mathcal{R} = \frac{256 b V^3 T^{9/2} (-4 V^3 T^{9/2} + 17 T^3 V^2 b N + 9 b^3 N^3 - 22 T^{3/2} c^2 N^2 V)}{(16 T^3 V^2 - 72 V T^{3/2} b N + 55 b^2 N^2)^2 N (-V T^{3/2} + b N)^3} \quad (4.49)$$

Nos concentramos en el denominador y resolvemos para la variable V . De esta manera podemos encontrar los puntos en donde \mathcal{R} presenta singularidades, para después poder analizarlos y poder asegurar o descartar su interpretación como posibles transiciones de fase para el gas ideal de Bose, entonces

$$(16 T^3 V^2 - 72 V T^{3/2} c N + 55 c^2 N^2)^2 N (-V T^{3/2} + c N)^3 = 0 \quad (4.50)$$

Las raíces son

$$\begin{aligned} V &= \frac{b}{T^{3/2}} \quad (\text{de multiplicidad } 3) \\ V &= \frac{1}{4} \frac{(9 + \sqrt{26}) b}{T^{3/2}} \quad (\text{de multiplicidad } 2) \\ V &= -\frac{1}{4} \frac{(-9 + \sqrt{26}) b}{T^{3/2}} \quad (\text{de multiplicidad } 2) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Pero $\left(\frac{9 + \sqrt{26}}{4} \right) \approx 3,52$ y $-\left(\frac{-9 + \sqrt{26}}{4} \right) \approx 0,98$, así que

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} \frac{1}{T^{3/2}} &= \frac{1}{b} \\ \frac{N}{V} \frac{1}{T^{3/2}} &= \frac{1}{3,52b} \\ \frac{N}{V} \frac{1}{T^{3/2}} &= \frac{1}{0,98b} \end{aligned} \quad (4.52)$$

Tenemos que $b = -\frac{1}{2^{7/2}} < 0$, por lo tanto todas las raíces son negativas, entonces quedan fuera de la región física. Nuevamente aseguramos que esos puntos son singularidades que tiene la función matemática que representa al escalar de curvatura pero que no poseen significado físico. Con lo anterior podemos concluir que aunque el gas ideal de Bose presenta interacción termodinámica de acuerdo con *GTD* no presenta transiciones de fase en la

vecindad clásica.

4.2.3. Límite de Boltzmann

Partiendo de la ecuación para la entropía de este gas recuperaremos los resultados para un gas ideal clásico. Nuevamente en el límite de altas temperaturas la expresión (4.13) se reduce a

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln \left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \frac{N}{V} \right) \quad (4.53)$$

Utilizando (4.27) se encuentra que la métrica está dada por

$$g = -C_V^2 \left(\frac{dT^2}{T^2} \right) - Nk_B^2 \left(\frac{dV^2}{V^2} \right) \quad (4.54)$$

Explícitamente g es

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} -\frac{9}{4} \frac{N^2 k_B^2}{T^2} & 0 \\ 0 & -\frac{N^2 k_B^2}{V^2} \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

Proponiendo el cambio de coordenadas

$$\begin{aligned} \chi &= \ln(T) \\ \eta &= \ln(V) \end{aligned} \quad (4.56)$$

La métrica se puede escribir de la siguiente manera

$$g = -C_V^2 d\chi^2 - Nk_B^2 d\eta^2 \quad (4.57)$$

La expresión anterior tiene la forma de una métrica euclídeana lo que nos indica que las componentes del tensor de curvatura serán idénticas a cero. Calculando el tensor de curvatura, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^\alpha{}_{\beta\mu\nu} &= 0 \\ \mathcal{R}_{\alpha\beta} &= 0 \\ \mathcal{R} &= 0 \end{aligned} \quad (4.58)$$

Recuperando así los resultados para un gas ideal clásico.

Finalmente partiendo de la expresión para el escalar de curvatura comprobamos que se recuperan los resultados anteriores, entonces tomando el límite ($T \rightarrow \infty$)

$$\lim_{T \rightarrow \infty} R^\alpha{}_{\beta\mu\nu} = 0 \quad (4.59)$$

Con esto comprobamos que para temperaturas lo suficientemente altas, los efectos cuánticos dejan de ser notorios y recuperamos el caso de un gas ideal clásico a nivel de curvatura, que era lo que se esperaba. Presentamos una comparación entre los dos escalares de curvatura (figura 4.3). Podemos ver que los escalares generan superficies similares con una singularidad prominente, como se vió en las secciones anteriores ninguna posee un significado físico.

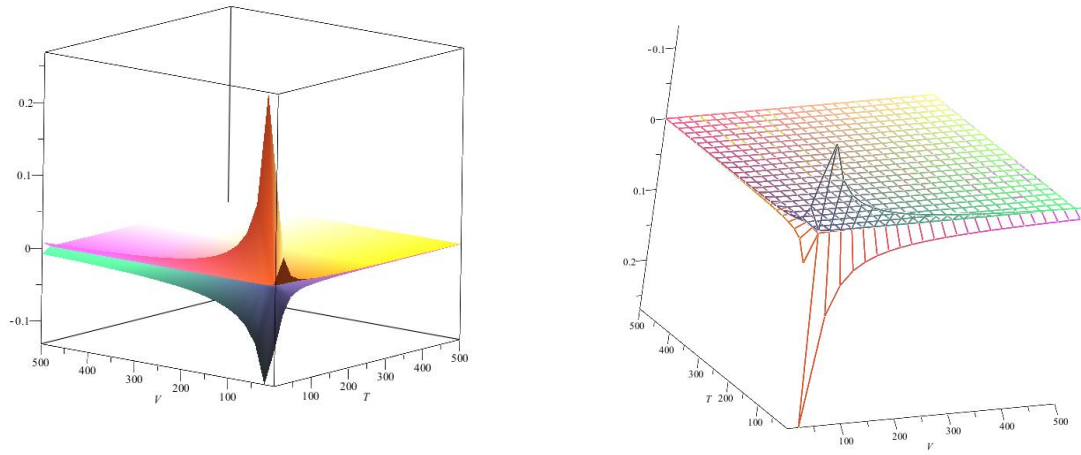


Figura 4.5: Comparación entre los escalares de curvatura

Capítulo 5

Conclusiones

Recapitulando lo que se hizo en este trabajo

- i)* Se dió una introducción en donde se explica la relación histórica de la geometría y la termodinámica, un paseo rápido en dónde hablamos de los resultados más importantes y que influyeron en el nacimiento de la Geometrotermodinámica.
- ii)* Exploramos los conceptos importantes en Geometrotermodinámica, todos derivados de la Geometría Diferencial. En este capítulo se ve claramente que la conexión de la Física con la Geometría es extremadamente importante.
- iii)* Después se trabajó con dos sistemas termodinámicos: el gas ideal de Fermi y el gas ideal de Bose. El propósito fue encontrar un potencial termodinámico conveniente para poder aplicar las herramientas expuestas en el capítulo 2. El potencial que se derivó para cada gas fue la entropía, en nuestros casos como una función de la temperatura y el volumen, es decir $S = S(T, V)$.
- iv)* Con los potenciales respectivos se procedió a derivar los objetos importantes para GTD: la métrica y el tensor de curvatura. Para los dos gases los resultados que se obtuvieron fueron curvaturas distintas de cero. Después se analizó el comportamiento del escalar de curvatura, que en este caso es proporcional al tensor de curvatura, y se obtuvieron dos resultados distintos:
 1. Para un gas ideal de Fermi el escalar presentó singularidades que de acuerdo a GTD pueden ser interpretadas como **posibles** transiciones de fase. Después al hacer un análisis más detallado se descartaron como singularidades con significado físico debido a que los puntos para los cuales \mathcal{R} diverge no pertenecen a la región física que se analizó

2. Para un gas ideal de Bose el escalar de curvatura también presentó singularidades, nuevamente interpretadas como **posibles** transiciones de fase. Pero al analizar más a fondo los puntos en los cuales se presentaron las singularidades, se encontró que ninguno pertenecía a la región física.

Entonces discutamos un poco los resultados obtenidos. La estructura matemática de los dos sistemas termodinámicos que se estudiaron resultó ser bastante parecida, en general las ecuaciones presentaban la misma forma salvo un cambio de signo. Así que se mantuvo la misma estructura que se encontró desde el logaritmo de la función de partición para cada gas. Estas manifestaciones llegaron hasta el escalar de curvatura, en las gráficas presentadas en el capítulo anterior podemos observar ese comportamiento.

Aunque el tratamiento matemático de los dos gases fue muy similar, existen diferencias físicas. Es necesario mencionar que la ecuación que se utilizó como potencial termodinámico no tiene la dependencia más ideal, es decir, lo usual es utilizar $S = S(U, V)$ como potencial ya que las condiciones de equilibrio se obtienen inmediatamente. Lo anterior presentaría problemas si el tratamiento fuera puramente termodinámico pero afortunadamente la Geometrotermodinámica nos permite utilizar cualquier representación y cualquier subconjunto de \mathcal{T} para construir \mathcal{E} y analizar cualquier sistema termodinámico, por ejemplo ver [2].

Utilizando la métrica (2.12) los resultados que se obtuvieron para el tensor de curvatura de cada uno de los gases presentan discrepancias con lo que se conoce en la literatura. Para un gas ideal, el hamiltoniano con el que se trabaja es el que corresponde a una partícula libre

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m}$$

es decir en el hamiltoniano no está presente un potencial solamente la contribución por parte de la energía cinética. De acuerdo con lo que se discute en la literatura este hamiltoniano llevaría a un sistema sin interacción termodinámica, precisamente porque no existe una contribución por parte de la energía potencial, que es un potencial de interacción. Entonces uno esperaría que los gases ideales de Fermi y de Bose se comportaran de esa manera, sin presentar interacción termodinámica. Como se expuso anteriormente en este trabajo se obtuvo que desde la perspectiva de GTD si hay interacción termodinámica. Esta interacción se debe a la naturaleza cuántica de las partículas con las que se trabajó, fermiones y bosones, es decir, esta interacción debe ser una consecuencia de las correlaciones que imponen las funciones de onda y sus simetrías. Para comprobar esto se analizó la curvatura en el límite clásico (altas temperaturas) y los efectos dejaron de ser notorios recuperando

así una curvatura igual a cero.

Todas las correcciones que aparecen en las ecuaciones para la entropía son resultados que se derivan de hacer el cambio de partículas clásicas por partículas cuánticas. Así que sin necesidad de cambiar el Hamiltoniano obtuvimos resultados muy diferentes apuntando a que la interacción termodinámica no puede ser definida a partir de la forma de \mathcal{H} ya que de acuerdo con *GTD* nuestros sistemas termodinámicos si presentan interacción termodinámica aunque en su hamiltoniano no se toma en cuenta algún potencial de interacción.

Las singularidades que se encontraron para cada gas apuntaron a la existen transiciones de fase. Para una gas ideal de Bose, la transición de fase más famosa es la **condensación Bose-Einstein**. Esta transición de fase se presenta en la región correspondiente a $z = 1$, que es la frontera de la región clásica-cuántica. Antes de asegurar que esas singularidades podían tener una interpretación física y no eran meramente singularidades matemáticas se realizó un análisis extra. Durante este análisis se demostró que para el gas ideal de Bose, las singularidades no pertenecían a alguna región física, ya que todas eran negativas. Entonces *GTD* nos dice que el gas ideal de Bose no puede tener transiciones de fase para $z \ll 1$.

Sin embargo queda la pregunta abierta sobre la condensación Bose-Einstein, mediante este formalismo debe ser posible reproducir el resultado para esa transición de fase. Esto requiere encontrar la ecuación fundamental en este límite, con eso calcular la métrica, el tensor de curvatura, el tensor de Ricci y finalmente el escalar. Después analizar nuevamente el escalar de curvatura, encontrar sus singularidades y asegurar que al menos una (si es que presenta varias) cae en la región definida por $z = 1$. Este análisis se deja como un trabajo a futuro.

Para el gas ideal de Fermi, no se encontró reportada en la literatura alguna transición de fase en la región $z \ll 1$, y los tratamientos de las otras regiones no muestran alguna transición de fase. Las singularidades para este escalar de curvatura también se analizaron con detalle y aunque todas pertenecían a la región física (todas eran positivas) ninguna fue consistente con la región de análisis $z \ll 1$, es decir todas implicaban que $z > 1$ o de manera equivalente $\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} > 1$.

De esta discusión podemos concluir que aunque los gases ideales de Fermi y Bose presentan interacción termodinámica de acuerdo a *GTD* no poseen transiciones de fase en la vecindad clásica.

Los resultados anteriores nos muestran que la Geometrotermodinámica nos proporciona herramientas muy poderosas para estudiar sistemas termodinámicos, en este caso el gas ideal de Bose-Einstein y el gas ideal de Fermi-Dirac, también nos muestran que *GTD*

al estar fundamentada matemáticamente en la Geometría Diferencial es consistente con resultados físicos y la geometrización de las propiedades termodinámicas de un sistema no es puramente abstracta ya que al final se recupera toda la información física del sistema que se está estudiando y en algunos casos se manifiestan propiedades o comportamientos que no eran esperados. Este trabajo es un ejemplo de todo lo anterior y claramente la Geometrotermodinámica es otro ejemplo de que la Geometría y la Física están relacionadas fuertemente.

Apéndice A

Desarrollo de f_n

Partimos de la expresión general de f_n y hacemos una expansión de una parte del integrando para valores de $z \ll 1$. Tenemos

$$f_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{z^{-1} \exp(x) + 1} dx \quad (\text{A.1})$$

Entonces

$$\begin{aligned} & \frac{x^{n-1}}{z^{-1} \exp(x) + 1} \\ &= \frac{1}{z^{-1} \exp(x)(1 + \exp(-x))} \\ &= z \exp(-x) \left(\frac{1}{1 + \exp(-x)} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Ahora recordando la definición de serie geométrica tenemos

$$\left(\frac{1}{1 + \exp(-x)} \right) = \sum_{j=0}^{\infty} (-z \exp(-x))^j \quad (\text{A.3})$$

Sustituimos en (A.2) y desarrollamos

$$\begin{aligned}
 & z \exp(-x) \sum_{j=0}^{\infty} (-z \exp(-x))^j & (A.4) \\
 &= \sum_{j=0}^{\infty} z \exp(-x) (-z)^j (\exp(-x))^j \\
 &= \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} z^j \exp(-jx)
 \end{aligned}$$

Usamos lo anterior en la expresión para f_n

$$\frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} z^j \exp(-jx) x^{n-1} dx \quad (A.5)$$

Hacemos un cambio de variable $u = jx \Rightarrow du = jdx$ y sustituimos

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{z^j}{j^{n-1} j^n} \int_0^{\infty} u^{n-1} \exp(-u) du & (A.6) \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{z^j}{j^n} \Gamma(n)
 \end{aligned}$$

$$\therefore f_n(z) = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{z^j}{j^n} \quad (A.7)$$

En donde hemos utilizado la definición de la función Gamma [1]

Apéndice B

Desarrollo de g_n

Utilizamos expresión general para g_n y hacemos una expansión de una parte del integrando para valores de $z \ll 1$. Entonces tenemos

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{z^{-1} \exp(x) - 1} dx \quad (\text{B.1})$$

Entonces

$$\begin{aligned} & \frac{x^{n-1}}{z^{-1} \exp(x) - 1} \\ &= \frac{1}{z^{-1} \exp(x)(1 - \exp(-x))} \\ &= z \exp(-x) \left(\frac{1}{1 - \exp(-x)} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Ahora recordando la definición de serie geométrica tenemos

$$\left(\frac{1}{1 - \exp(-x)} \right) = \sum_{j=0}^{\infty} (z \exp(-x))^j \quad (\text{B.3})$$

Sustituimos en (B.2) y desarrollamos

$$\begin{aligned}
 & z \exp(-x) \sum_{j=0}^{\infty} (z \exp(-x))^j & (B.4) \\
 &= \sum_{j=0}^{\infty} z \exp(-x) (z)^j (\exp(-x))^j \\
 &= \sum_{j=1}^{\infty} z^j \exp(-jx)
 \end{aligned}$$

Usamos este resultado en la expresión para g_n

$$\frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z^j \exp(-jx) x^{n-1} dx \quad (B.5)$$

Hacemos un cambio de variable $w = jx \Rightarrow dw = jdx$ y sustituimos

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^{n-1} j^n} \int_0^{\infty} w^{n-1} \exp(-w) dw & (B.6) \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^n} \Gamma(n)
 \end{aligned}$$

$$\therefore g_n(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^n} \quad (B.7)$$

En donde hemos utilizado la definición de la función Gamma [1]

Bibliografía

- [1] W. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press, United States of America, 2005)
- [2] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1980)
- [3] Burke L. William, *Applied Differential Geometry* (Cambridge University Press, United States of America, 1987)
- [4] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985)
- [5] C. Charatheodory, *Untersuchungen über die Grundlagen der Thermodynamik*, Math. Ann. **67**, 335 (1909)
- [6] J. Gibbs, *The Collected Works*, Vol. 1, Thermodynamics (Yale University Press, 1948)
- [7] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, *Thermodynamics and Statitcal Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1997)
- [8] R. Hermann, *Geometry, physics and systems* (Marcel Dekker, new York, 1973)
- [9] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987)
- [10] K. Huang, *Introduction to Statistical Physics*, (Taylor & Francis Group, United States of America, 2010)
- [11] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, London, UK, 1908)
- [12] H. Quevedo, *Geometrothermodynamics*, J. Math. Phys. **48**, 013506 (2007)
- [13] H. Quevedo, A. Sánchez, and A. Vázquez, *Invariant geometry of the ideal gas*, arXiv:0811.0222v1[math-ph] (2008)

-
- [14] G. Ruppeiner, *Thermodynamics: A Riemannian geometric model*, Phys. Rev. **A** 20, 1608 (1979)
- [15] G. Ruppeiner, *Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory*, Rev. Mod. Phys. **67**, 605 (1995); **68**, 313 (1996)
- [16] B. F. Schutz, *A First Course in General Relativity*, (Cambridge University Press, New York, 2009)
- [17] B. F. Schutz, *Geometrical Methods of Mathematical Physics*, (Cambridge University Press, Great Britain, 1982)
- [18] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1972)
- [19] F. Weinhold, *Metric Geometry of Equilibrium Thermodynamics I, II, III, IV, V*, J. Chem Phys. **63**, 2479, 2484, 2488, 2496 (1975); **65**, 558 (1976)