



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

DESCRIPCIÓN GEOMÉTRICA DE CONDENSACIÓN BOSE-EINSTEIN

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
SASHA ALEXANDRA ZALDÍVAR CORICHI

TUTOR PRINCIPAL

DR. HERNANDO QUEVEDO CUBILLOS, INSTITUTO DE CIENCIAS
NUCLEARES UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. JERÓNIMO ALONSO CORTEZ QUEZADA, FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM

DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ, INSTITUTO DE FÍSICA UNAM

MÉXICO, D. F. MARZO 2015



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.

Dedicatoria

*“To the east, to the east,
the road beneath my feet.
To the west, to the west,
I haven’t got there yet.
And to the north, to the north,
never to be caught.
To the south, to the south,
my time is running out” .
-Frank Turner, The Road*

Para mi mamá, María Elena Corichi Cortés.

Agradecimientos

A mi mamá, aunque ya no esté conmigo, no sería la persona que soy si no hubiese sido por ella. A mi papá y a mi hermano, gracias por estar ahí siempre.

A mi asesor, el Dr. Hernando Quevedo por su constante apoyo durante todo este tiempo. En verdad es una de las personas que más aprecio en este mundo y estoy muy agradecida de haber trabajado con usted todo este tiempo.

A los miembros de mi comité tutor, la Dra. Rosario Paredes y el Dr. Jerónimo Cortez, gracias por su apoyo y consejos durante la realización de este trabajo. Ustedes son dos personas que estimo mucho y dos de los mejores profesores que he tenido en toda mi vida.

A los miembros de mi jurado: Dr. Víctor Romero, Dr. Alberto Sánchez, Dr. Francisco Mandujano, gracias por sus comentarios y correcciones.

Dr. Francisco Nettel...Francisco, sin tu apoyo desde el principio, tus consejos, correcciones, regañadas, bromas y demás, este trabajo no existiría hoy. Eres una gran persona y un gran amigo, te aprecio mucho.

A mis amigos del posgrado, Ignacio Portillo y Arturo Carranza, sin ustedes no hubiese encontrado la fuerza para terminar la maestría... ¿ya ven? sobrevivimos. Los adoro aunque hagan Teoría de Cuerdas y Física Nuclear.

A mis amigas del CCH, mis mejores amigas, que siempre están ahí sin importar qué suceda, Perla, Ale, Isel, Caro, Tania y Alma, las quiero demasiado.

Jonathan, te adoro, ya sabes que sin tí me pierdo.

Beto y Abner, ya crecieron, saben que son muy especiales para mi, gracias por escucharme y acompañarme en los buenos momentos, en los malos y en los aburridos.

A mi amigo Allan, eres uno de mis mejores amigos, gracias por ayudarme con todas y cada una de las gráficas de este trabajo y por apoyarme y regañarme cuando lo necesito, te quiero un montón de montones.

Octavio, Héctor, Fabián y todos los demás, gracias por estar ahí siempre. Osvaldo, gracias por escucharme siempre y por ayudarme a entender los experimentos de Condensación Bose-Einstein, eres un gran amigo.

Gracias a los miembros del grupo GTD por sus comentarios durante las pruebas de

examen.

Si olvidé a alguien, no fue a propósito, ya saben que soy bien distraída.

Agradezco a CONACYT por otorgarme la beca de maestría bajo el número de becario 283598.

Investigación realizada gracias al Programa UNAM-DGAPA-PAPIIT IN113514.

Notación y convenciones

Se utilizará la convención de suma de Einstein a menos que se especifique lo contrario y los cálculos geométricos se realizarán en unidades geometrizadas.

- $\hbar = 1,0546 \times 10^{-34} J \cdot s \rightarrow$ 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
- $\lambda_T \rightarrow$ 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
- $\mathcal{Z} \rightarrow$ Función de gran partición
- $Li_s(z) \rightarrow$ Función polilogaritmo de orden s y argumento z
- $G \rightarrow$ Métrica del espacio fase termodinámico
- $g \rightarrow$ Métrica del espacio de estados de equilibrio termodinámico
- $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} \rightarrow$ Componentes de tensor de Curvatura
- $\mathcal{R}_{\alpha\beta} \rightarrow$ Componentes del tensor de Ricci
- $\mathcal{R} \rightarrow$ Escalar de Curvatura

Índice general

Dedicatoria	I
Agradecimientos	III
1. Introducción	3
1.1. Geometría, Física Termodinámica	4
1.2. La Geometrotermodinámica en la Física, las Matemáticas y la Química . .	5
1.3. Condensación Bose-Einstein	5
2. Fundamentos de Geometrotermodinámica (GTD)	7
2.1. ¿Por qué usar GTD?	7
2.2. Objetos geométricos importantes en GTD	8
2.2.1. Tensores	8
2.2.2. Invariancia de Legendre	8
2.3. Espacio fase termodinámico (\mathcal{T}) y espacio de estados de equilibrio (\mathcal{E}) . . .	9
2.4. Métrica termodinámica y curvatura	11
3. Gases Ideales Cuánticos	15
3.1. Sistemas de N partículas indistinguibles	16
3.1.1. Sistema de N bosones ideales	17
3.1.2. Sistema de N fermiones ideales	17
3.2. Segunda Cuantización	18
3.2.1. Representación de número de ocupación	18
3.3. Potencial termodinámico	19
3.3.1. Ensemble gran canónico	19
3.4. Propiedades termodinámicas	22
4. Condensado de Bose-Einstein	25

5. GTD del Condensado de Bose-Einstein	31
5.1. El potencial termodinámico	31
5.2. Métrica	33
5.3. Tensor de curvatura y escalar de curvatura	34
6. Termodinámica geométrica	37
6.1. Métricas hessianas	37
6.2. Gas ideal de Bose-Einstein	42
6.2.1. Entropía	42
6.2.2. Energía interna	44
7. Conclusiones	47
A. Algunas propiedades de las funciones polilogaritmo	51
B. Estructura de la hoja de cálculo de Maple	55
Bibliografía	66

Capítulo 1

Introducción

Al pensar en las propiedades termodinámicas de cualquier sistema, la geometría no es la primera opción para estudiar al sistema. En principio porque no existe una conexión obvia entre conceptos matemáticos de geometría y termodinámica. Como veremos más adelante la Geometrotermodinámica (GTD) nos ofrece una manera de hacer esa conexión.

En otras áreas de la Física es más sencillo pensar en la relación que existe entre la geometría y alguna propiedad física, por ejemplo en Relatividad General existe una relación entre la curvatura del espacio tiempo y la interacción gravitacional:

$$\text{curvatura} = \text{interacción gravitacional}$$

Desde el punto de vista de la GTD la interacción termodinámica está caracterizada por el tensor de curvatura del sistema de la siguiente manera:

- Si $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} \neq 0$ el sistema presenta interacción termodinámica
- Si $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} = 0$ el sistema carece de interacción termodinámica

En dos dimensiones el escalar de curvatura que se obtiene a través del tensor de curvatura, proporciona información acerca de las transiciones de fase que puede o no tener el sistema. Si el escalar diverge existe la posibilidad de que el sistema tenga algún tipo de transición de fase.

El objetivo de este trabajo es analizar un gas de ideal de N bosones sin interacción, un gas ideal de Bose-Einstein, tratando de describir la condensación Bose-Einstein, utilizando el escalar de curvatura del sistema.

Con lo anterior es claro que la geometría a la que nos referimos es la Geometría no-euclídeana, en particular a la Geometría Diferencial.

1.1. Geometría, Física Termodinámica

Para la ciencia moderna las herramientas que proporciona la Geometría Diferencial son de gran importancia.

La geometría no-euclideana fue desarrollada después de que Ptolemy, Nasir al din al Tusi, Giovanni Alfonso Borelli, John Wallis, entre otros, trataran de probar el quinto postulado de Euclides:

“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”

Gauss, Bólyai y Lobachevsky desarrollaron una geometría no-euclideana y encontraron lo que hoy se conoce como espacio *2-dimensional de curvatura constante negativa*[44]. Y después Klein, demostró que la geometría que encontraron los anteriores era autoconsistente.

El tipo de geometría que nos concierne es la Geometría Riemanniana desarrollada por Georg Friedrich Bernhard Riemann y que presentó en su famosa plática *Über die Hypothesen, welche der Geometrie zu Grunde liegen*. Las ideas que presentó en esa plática generalizan la geometría estudiada por Gauss, Bólyai y Lobachevsky y proporcionan la definición de variedad Riemanniana, la cual es en concreto una variedad suave (diferenciable \mathcal{C}^∞) \mathcal{M} en la cual está definido un campo tensorial métrico \mathbf{g} [7, 42].

Gibbs fue el primero en introducir la Geometría a la Termodinámica al representar a la primera Ley como una forma diferencial[15]. Después Charatheodory propuso que se utilizarán formas de Pfaff para representar a las leyes de la termodinámica y Hermann introdujo la idea de espacio fase termodinámico en el cual las variables termodinámicas son utilizadas como coordenadas [9, 17].

La idea de utilizar una variedad Riemanniana y una estructura métrica la introdujeron Fisher y Roa [13, 35, 36, 37]. Más tarde Weinhold propuso una métrica hessiana para el espacio de estados en donde se estudian los sistemas termodinámicos y sus propiedades. El elemento de línea es

$$ds^2 = g_{ij}^W dN^i dN^j = \frac{\partial^2 U}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j \quad (1.1)$$

Más tarde Ruppeiner, introdujo su métrica termodinámica [39, 40], con elemento de línea dado por

$$ds^2 = g_{ij}^R dN^i dN^j = -\frac{\partial^2 S}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j \quad (1.2)$$

donde N son variables extensivas, S es la entropía del sistema, U es la energía interna

del sistema y $i, j = 1, \dots, n$ con n el número de grados de libertad.

Las métricas anteriores presentan un problema, los resultados dependen del potencial termodinámico que se elija para trabajar. Es por esto que en este trabajo utilizaremos la Geometrotermodinámica, formalismo propuesto por Quevedo [28], que como ya habíamos mencionado hace una conexión entre el espacio fase termodinámico y el espacio de estados de equilibrio, de tal forma que los resultados no dependen de la elección de potencial termodinámico, es decir, son invariantes bajo transformaciones de Legendre.

1.2. La Geometrotermodinámica en la Física, las Matemáticas y la Química

Los trabajos mencionado en esta sección son un pequeño resumen de los resultados que se han obtenido utilizando GTD en distintas ramas de la Ciencia, existen muchos artículos publicados, solamente mencionaremos algunos.

En Matemáticas los trabajos publicado se enfocan en relacionar la geometría de contacto con la geometría conforme [5] y la geometría Riemanniana con la conforme [14]. En Física se ha estudiado la termodinámica de hoyos negros, tratando de poner orden en la descripción geométrica de estos [1, 18]. También se ha utilizado GTD para derivar ecuaciones fundamentales termodinámicas y construir modelos cosmológicos relativistas, por ejemplo utilizando la ecuación más sencilla en GTD, la cual corresponde a un sistema sin interacción termodinámica, se describen disintos fluidos del modelo estándar de la cosmología [4].

Otro tipo de sistemas que se han estudiado utilizando GTD son sistemas termodinámicos ordinarios, por ejemplo el gas de Van der Waals [30]. Al estudiar este sistema se obtuvieron resultados consistentes con las transiciones de fase que presenta este gas y los puntos en los cuales el escalar de curvatura diverge. También se han estudiado gases ideales cuánticos, el gas de Bose-Einstein y el gas de Fermi-Dirac [33]. Desde el punto de la econofísica también

Finalmente se han analizado reacciones químicas utilizando GTD. En [34] se muestra que cualquier reacción química en un sistema cerrado puede ser descrita por una geodésica en una variedad de dos dimensiones interpretada como el espacio de estados de equilibrio de la reacción química.

1.3. Condensación Bose-Einstein

La historia de la condensación Bose-Einstein comienza aproximadamente en 1920. La estadística de Bose data de 1924 cuando Satyendranath Bose derivó el espectro de radiación

de cuerpo negro utilizando un argumento estadístico. Einstein fue quién consiguió que se publicara el trabajo de Bose. Posteriormente generalizó la idea para átomos sin interacción.

Einstein notó una característica particular en la distribución de los átomos sobre los niveles de energía. Si la temperatura era lo suficientemente baja pero finita, una fracción grande los átomos ocupaba el nivel de energía más bajo. Lo anterior es lo que hoy se conoce como condensación Bose-Einstein. [10]

La comprobación experimental de la condensación Bose-Einstein se realizó en 1995 con el experimento de Cornell y Wieman quienes condensaron ^{87}Rb y con el experimento de Ketterle que condensó ^{23}Na [27].

Utilizaron trampas magneto-ópticas y trampas magnéticas para enfriar vapores de decenas de miles de átomos a temperaturas de nanokelvins.

En la figura 1.1 se observan los resultados del experimento de Cornell.

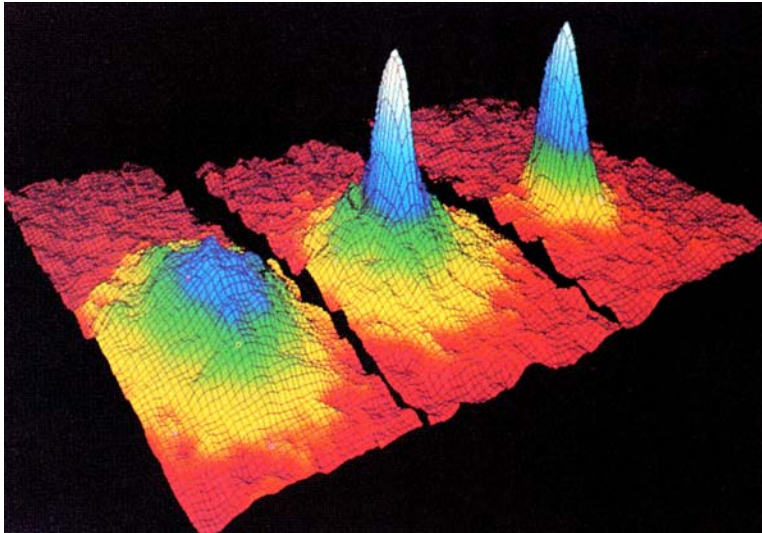


Figura 1.1: Se observan las distribuciones de densidad de tres nubes de átomos de rubidio. En la izquierda se muestra la distribución justo antes de la condensación. La imagen de en medio corresponde al momento en que se comienzan a condensar y la última imagen es después de la condensación. Imagen adaptada de [43].

Capítulo 2

Fundamentos de Geometrotermodinámica (GTD)

2.1. ¿Por qué usar GTD?

Al estudiar sistemas termodinámicos lo más usual es especificar la ecuación fundamental del sistema, al hacer esto tenemos una descripción completa de dicho sistema, es decir, tenemos toda la información termodinámica. También es posible contar con todas las ecuaciones de estado del sistema, desde un punto de vista experimental, esto es mejor, ya que usualmente son cantidades termodinámicas que se pueden medir o controlar en los experimentos. La descripción mediante la ecuación fundamental es equivalente a la descripción con ecuaciones de estado ya que estas últimas se pueden derivar de la primera de forma única usando derivadas parciales.

Pero nosotros estamos interesados en estudiar los aspectos matemáticos de los sistemas termodinámicos, en un lenguaje geométrico. Para hacer eso necesitamos de un formalismo que haga una descripción consistente de las propiedades matemáticas de nuestros sistemas.

Como mencionamos en el capítulo anterior usaremos las herramientas que nos proporciona la Geometría Diferencial.

Nuestro objetivo al estudiar un gas ideal de bosones, es hacer la descripción geométrica de la condensación Bose-Einstein.

Este fenómeno ha sido tratado por muchos autores y es un tema de estudio en los libros de texto como se menciona en la Introducción[20, 23, 27], sin embargo no ha sido analizado utilizando GTD.

En la literatura existe una discrepancia sobre que tipo de transición de fase es la condensación Bose-Einstein[20, 24, 38], utilizaremos GTD para tratar de presentar una descripción consistente de las propiedades geométricas del sistema en cuestión y su conexión

con sus propiedades termodinámicas. Más adelante profundizaremos en la descripción de estos sistemas.

2.2. Objetos geométricos importantes en GTD

2.2.1. Tensores

Consideramos un espacio vectorial V de dimensión finita, llamamos V^* a su dual. Un tensor tipo $\binom{M}{N}$ es un mapeo multilinear a los reales definido como

$$T : \underbrace{V \times V \cdots \times V}_{N \text{ veces}} \times \underbrace{V^* \times \cdots \times V^*}_{M \text{ veces}} \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.1)$$

Es decir, T toma M vectores duales (también llamados formas) y N vectores y regresa un escalar.

Por ejemplo un tensor tipo $\binom{0}{1}$ es una 1-forma o vector dual, cuyo argumento es un vector [41, 46]. Este tipo de tensores son importantes para la GTD, como veremos más adelante.

2.2.2. Invariancia de Legendre

Al estudiar sistemas termodinámicos y sus propiedades, sabemos que estas no dependen del potencial que se utilice para hacer la descripción. Esto se debe a que los potenciales termodinámicos están relacionados entre si por transformaciones de Legendre.

La manera usual de tratar a las transformaciones de Legendre se encuentra en libros de Termodinámica, por ejemplo [8] o en libros de Mecánica Clásica en las secciones que estudian los formalismos Lagrangiano y Hamiltoniano.

La definición formal de una transformación de Legendre se halla en libros más avanzados de Matemáticas, la cual nos dice que una transformación de Legendre es el cambio de coordenadas

$$(\Phi, E^\alpha, I^\alpha) \rightarrow (\tilde{\Phi}, \tilde{E}^\alpha, \tilde{I}^\alpha), \quad \alpha = (1, \dots, n) \quad (2.2)$$

definido por[3]

$$\begin{aligned} \Phi &= \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l \\ E^i &= -\tilde{I}^i \\ E^j &= \tilde{E}^j \\ I^i &= \tilde{E}^i \\ I^j &= \tilde{I}^j \end{aligned} \quad (2.3)$$

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

Ahora, supongamos que tomamos el siguiente conjunto de coordenadas: $(U, S, V, T - P)$. De acuerdo con la definición, tenemos las siguientes posibilidades para la transformación de Legendre:

$$\tilde{U}_1 = U - TS, S = -\tilde{T}, T = \tilde{S}, V = \tilde{V}, P = \tilde{P} \quad (2.4)$$

$$\tilde{U}_2 = U + PV, S = \tilde{S}, T = \tilde{T}, V = \tilde{P}, -P = \tilde{V} \quad (2.5)$$

$$\tilde{U}_3 = U - TS + PV, S = -\tilde{T}, T = \tilde{S}, V = \tilde{P}, -P = \tilde{V} \quad (2.6)$$

Entonces, si identificamos U con la energía interna, S con la entropía, V con el volumen y P con la presión, las transformaciones son

$$\begin{aligned} \tilde{U}_1 &\rightarrow F \\ \tilde{U}_2 &\rightarrow H \\ \tilde{U}_3 &\rightarrow G \end{aligned} \quad (2.7)$$

La primera es la energía libre de Helmholtz, la segunda es la Entalpía y la tercera es la energía libre de Gibbs.

2.3. Espacio fase termodinámico (\mathcal{T}) y espacio de estados de equilibrio (\mathcal{E})

En Geometrotermodinámica trabajamos con dos espacios, el espacio fase termodinámico y el espacio de estados de equilibrio.

El espacio fase termodinámico, que denotaremos como \mathcal{T} , de dimensión $2n + 1$. En este espacio las coordenadas son $Z^A = \{E^\alpha, I^\alpha, \Phi\}$. E^α denota a las variables termodinámicas extensivas, I^α a las intensivas y Φ al potencial termodinámico, con $\alpha = 1, \dots, n$ y $A = (1, \dots, 2n)$.

Ahora introducimos la 1-forma fundamental de Gibbs:

$$\Theta = d\Phi - \delta_{\alpha\beta} I^\alpha dE^\beta, \quad \delta_{\alpha\beta} = \text{diag}(1, 1, \dots, 1) \quad (2.8)$$

La 1-forma fundamental de Gibbs, es invariante ante transformaciones de Legendre. Utilizando (2.3) y (2.8) podemos mostrar esto:

$$\begin{aligned} \Theta &= d\Phi - \delta_{\alpha\beta} I^\alpha dE^\beta & (2.9) \\ &= d\left(\tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l\right) - \delta_{im} I^m dE^i - \delta_{jn} I^n dE^j \\ &= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} d\tilde{E}^k \tilde{I}^l - \delta_{rs} \tilde{E}^r d\tilde{I}^s - \delta_{im} I^m dE^i - \delta_{jn} I^n dE^j \\ &= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{I}^l d\tilde{E}^k - \delta_{rs} \tilde{E}^r d\tilde{I}^s - \delta_{im} \tilde{E}^m d(-I^i) - \delta_{jn} \tilde{I}^n d\tilde{E}^j \\ &= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{I}^l d\tilde{E}^k - \delta_{rs} \tilde{E}^r d\tilde{I}^s + \delta_{im} \tilde{E}^m dI^i - \delta_{jn} \tilde{I}^n d\tilde{E}^j \end{aligned}$$

Pero r, s, i, m son índices mudos, entonces el tercer término cancela al cuarto y llegamos a:

$$\begin{aligned} \Theta &= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{I}^l d\tilde{E}^k - \delta_{jn} \tilde{I}^n d\tilde{E}^j & (2.10) \\ &= d\tilde{\Phi} - \delta_{\alpha\beta} \tilde{I}^\alpha d\tilde{E}^\beta \\ &\therefore \Theta = \tilde{\Theta} \end{aligned}$$

El espacio de estados de equilibrio \mathcal{E} está definido por el mapeo suave

$$\varphi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{T} \quad (2.11)$$

tal que

$$\varphi : \{E^\alpha\} \rightarrow \{\Phi(E^\alpha), E^\alpha, I_\alpha(E^\alpha)\} \quad (2.12)$$

bajo la condición

$$\varphi^*(\Theta) = 0 \quad (2.13)$$

φ^* representa el pullback de φ y está definido como

$$\varphi^* : T_{\varphi(p)}^* \mathcal{T} \rightarrow T_p^* \mathcal{E} \quad (2.14)$$

La condición (2.13) implica que

$$\begin{aligned} d\Phi &= \delta_{\alpha\beta} I^\alpha dE^\beta \\ \frac{\partial\Phi}{\partial E^\alpha} &= \delta_{\alpha\beta} I^\beta \end{aligned} \quad (2.15)$$

Reconocemos (2.15) como la Primera Ley de la Termodinámica y las condiciones de equilibrio termodinámico.

Para finalizar esta sección consideramos una métrica G , que induce una estructura Riemanniana en \mathcal{T} , definida por

$$G = \Theta_G \otimes \Theta_G + \sum_{\alpha} \Lambda E^\alpha I_\alpha dE^\alpha \otimes dI_\alpha \quad (2.16)$$

Λ es una constante arbitraria, que más adelante elegiremos como 1. Pedimos que (2.16) cumpla con dos puntos importantes:

- G debe ser no degenerada
- G debe ser invariante bajo transformaciones de Legendre

Con todo lo anterior decimos que (\mathcal{T}, Θ, G) forman una variedad Riemanniana de contacto.

2.4. Métrica termodinámica y curvatura

Ahora ya tenemos todo lo necesario para poder hablar de la métrica termodinámica, g . El pullback $\varphi^*(G)$ induce una métrica en \mathcal{E} que denotaremos como g .

El pullback se calcula de la siguiente manera

$$g = \varphi^*(G) = G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial E^\alpha} \frac{\partial Z^B}{\partial E^\beta} dE^\alpha \otimes dE^\beta \quad (2.17)$$

Lo calculamos explícitamente:

$$\begin{aligned} &\varphi^* \left(\Theta_G \otimes \Theta_G + \sum_{\alpha} \Lambda E^\alpha I_\alpha dE^\alpha \otimes dI_\alpha \right) \\ &\varphi^*(\Theta_G \otimes \Theta_G) + \varphi^* \left(\sum_{\alpha} \Lambda E^\alpha I_\alpha dE^\alpha \otimes dI_\alpha \right) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Utilizando (2.13) tenemos que

$$\varphi^*(\Theta_G \otimes \Theta_G) = \varphi^*(\Theta_G) \otimes \varphi^*(\Theta_G) = 0 \quad (2.19)$$

Luego

$$\varphi^* \left(\sum_{\alpha} \Lambda E^{\alpha} I_{\alpha} dE^{\alpha} \otimes dI_{\alpha} \right) = \Lambda \sum_{\alpha} \varphi^* (E^{\alpha} I_{\alpha} dE^{\alpha} \otimes dI_{\alpha}) \quad (2.20)$$

Como E^{α} , I_{α} son funciones en \mathcal{T} , entonces tenemos

$$\begin{aligned} \varphi^* E^{\alpha} &= E^{\alpha} \\ \varphi^* I_{\alpha} &= \frac{\partial \Phi}{\partial E^{\alpha}} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Luego utilizando que $\varphi^* d = d\varphi^*$, nos queda

$$\varphi^* dE^{\alpha} = d(\varphi^* E^{\alpha}) = dE^{\alpha} \quad (2.22)$$

y

$$\begin{aligned} \varphi^* dI_{\alpha} &= d(\varphi^* I_{\alpha}) = d \left(\frac{\partial \Phi}{\partial E^{\alpha}} \right) \\ &= \sum_{\beta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^{\alpha} \partial E^{\beta}} dE^{\beta} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Entonces la métrica termodinámica está dada por

$$g = \sum_{\alpha, \beta} \Lambda \left(E^{\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial E^{\alpha}} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^{\alpha} \partial E^{\beta}} dE^{\alpha} \otimes dE^{\beta} \quad (2.24)$$

La métrica (2.24) hereda las propiedades de invariancia de Legendre que tiene G , también es no degenerada.

Uno de los resultados clave de la GTD es proporcionarnos con (2.24) que, como ya mencionamos, es invariante de Legendre. Con esta métrica podemos describir sistemas termodinámicos utilizando cualquier potencial termodinámico. En el espacio de estado de equilibrio, las propiedades termodinámicas están relacionadas con las propiedades geométricas

Mediante g , podemos calcular lo símbolos de Christoffel

$$\Gamma^\gamma_{\beta\mu} = \frac{1}{2}g^{\nu\gamma}(g_{\nu\beta,\mu} + g_{\nu\mu,\beta} - g_{\beta\mu,\nu}) \quad (2.25)$$

Utilizando (2.25) podemos calcular el tensor de curvatura de Riemann

$$R^\alpha_{\beta\mu\nu} = \Gamma^\alpha_{\beta\nu,\mu} - \Gamma^\alpha_{\beta\mu,\nu} + \Gamma^\alpha_{\sigma\mu}\Gamma^\sigma_{\beta\nu} - \Gamma^\alpha_{\sigma\nu}\Gamma^\sigma_{\beta\mu} \quad (2.26)$$

Si recordamos un poco, en Relatividad General se hace la identificación de curvatura con interacción gravitacional. En GTD retomamos esta idea y hacemos la siguiente identificación

Curvatura = Interacción Termodinámica

Así que el tensor de curvatura calculado a partir de (2.24) caracteriza la interacción termodinámica en GTD. Si resulta que $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} = 0$ el sistema bajo cuestión carece de interacción termodinámica, por ejemplo el gas ideal clásico[31] y si resulta que $\mathcal{R}^\alpha_{\beta\mu\nu} \neq 0$ el sistema con el que se está trabajando presenta interacción termodinámica.

Entonces con las construcciones geométricas tratadas en este capítulo podemos analizar sistemas termodinámicos simples como un gas ideal clásico hasta sistemas más complejos como agujeros negros. En este trabajo utilizaremos GTD para analizar un gas ideal de Bose-Einstein, concentrándonos en el condesado de Bose-Einstein.

Capítulo 3

Gases Ideales Cuánticos

En mecánica cuántica, las partículas son totalmente indistinguibles. Podemos utilizar etiquetas auxiliares para trabajar, pero estas no tienen efecto alguno en la dinámica del sistema.

Consideremos un sistema de N partículas, la función de onda para dicho sistema está dada por:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_l, r_m, \dots, r_N). \quad (3.1)$$

El Hamiltoniano general del sistema es:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \hat{U}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + \sum_{i=1}^N \hat{V}(\vec{r}_i) \quad (3.2)$$

El primer término es la energía cinética de las N partículas, el segundo es un potencial de interacción entre las partículas y el tercero es un potencial externo. En nuestro caso el potencial de interacción es cero y el potencial externo es una caja de volumen $V = L^\sigma$

$$\hat{V} = \begin{cases} \infty & r \notin V \\ 0 & r \in V \end{cases} \quad (3.3)$$

donde σ es la dimensión.

Estas consideraciones simplifican el Hamiltoniano de manera considerable y nos queda el Hamiltoniano de partícula libre:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \quad (3.4)$$

Si las partículas son indistinguibles, el Hamiltoniano del sistema debe ser invariante ante el intercambio de cualesquiera dos coordenadas, es decir [20]

$$\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{P} \right] = 0 \quad (3.5)$$

donde \hat{P} es un operador de permutación.

Aplicando dos veces el operador de permutación a la función de onda del sistema obtenemos lo siguiente

$$\hat{P}\hat{P}\Psi(r_1, r_2, \dots, r_l, r_m, \dots, r_N) = \lambda^2\Psi(r_1, r_2, \dots, r_m, r_l, \dots, r_N) \quad (3.6)$$

Entonces para que se cumpla la igualdad tenemos que $\lambda = \pm 1$. Esto nos dice que la función de onda puede ser simétrica o antisimétrica.

Con lo anterior podemos hacer la distinción entre dos tipos de partículas:

- Bosones

- ★ La función de onda que caracteriza al sistema es simétrica bajo el intercambio de coordenadas.

- Fermiones

- ★ La función de onda que caracteriza al sistema es antisimétrica bajo el intercambio de coordenadas.

Como mencionamos en la introducción en este trabajo nos enfocaremos en un sistema de N bosones sin interacción.

3.1. Sistemas de N partículas indistinguibles

Para construir las funciones de ondas de nuestros sistemas necesitamos una base. Si consideramos un gas ideal cuyo hamiltoniano está dado por [21, 38]

$$\hat{H}_{ideal} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \hat{V}(\vec{r}_i) \quad (3.7)$$

podemos utilizar como base el producto de N funciones de una partícula:

$$\Phi_{\alpha}(r_1, r_2, \dots) = \phi_{\alpha_1}(r_1)\phi_{\alpha_2}(r_2) \cdots \phi_{\alpha_N}(r_N) \quad (3.8)$$

Φ_α es eigenestado de \hat{H}_{ideal} ¹.

3.1.1. Sistema de N bosones ideales

Para un sistema de N bosones sin interacción la función de onda normalizada está dada por la siguiente expresión:

$$\Psi_{N_1, N_2, N_3, \dots}(r_1, \dots, r_N) = \left(\frac{N_1! N_2! N_3! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_{perm} \phi_{\alpha_1}(r_1) \phi_{\alpha_2}(r_2) \dots \phi_{\alpha_N}(r_N) \quad (3.9)$$

donde N_i es el número de partículas en el estado α_i .

La suma se toma sobre todas las permutaciones posibles sin repetición. Es importante observar que no existe restricción sobre el número de partículas que pueden ocupar un estado, esto se debe a la naturaleza de los bosones, en cambio, los fermiones tienen una restricción importante sobre el número de partículas que pueden ocupar el mismo estado cuántico (Principio de Exclusión de Pauli).

3.1.2. Sistema de N fermiones ideales

En el caso de un sistema de N fermiones sin interacción, la función de onda normalizada está dada por el determinante de Slater:

$$\Psi_{N_1, N_2, N_3, \dots, N_N}(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_1}(r_1) & \phi_{\alpha_2}(r_2) & \dots & \phi_{\alpha_1}(r_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(r_1) & \phi_{\alpha_2}(r_2) & \dots & \phi_{\alpha_N}(r_N) \end{vmatrix} \quad (3.10)$$

Si intercambiamos α_i por α_j (intercambiamos columnas) la función cambia de signo y si $\alpha_i = \alpha_j$ entonces dos filas serán iguales y el determinante es igual a cero. El determinante nos garantiza que la función de onda sea antisimétrica y que se cumpla el Principio de Exclusión de Pauli, el cual nos dice que dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico.

Como podemos observar, si aumentamos el número de partículas las funciones de onda se hacen cada vez más complicadas y si necesitamos trabajar con sistemas que interactúan el análisis se complica mucho más. Así que utilizaremos un enfoque distinto para poder estudiar esto dos sistemas, utilizaremos una descripción basada en el número de partículas que se encuentran en cada estado cuántico. Esto se conoce como segunda cuantización².

¹Denotamos α_i como el conjunto de números cuánticos asociados al estado i de una partícula.

²Este método fue desarrollado en 1927 por P.A.M. Dirac para fotones en la teoría de la radiación y en

3.2. Segunda Cuantización

De ahora en adelante, nos concentraremos solamente en la descripción de bosones, los resultados para fermiones se encuentran en varios textos por ejemplo [12, 21]

3.2.1. Representación de número de ocupación

Al trabajar con estos sistemas es más sencillo caracterizar a los estados utilizando el número de partículas en cada uno.

En este formalismo es conveniente utilizar notación de Dirac. Los estados se escriben de la siguiente forma

$$|N_1, N_2, \dots, N_N\rangle \equiv |N_1\rangle \otimes |N_2\rangle \dots \otimes |N_N\rangle \quad (3.11)$$

El conjunto que forman estos estados es ortogonal y completo.

Para bosones introducimos el operador de creación $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ y de aniquilación $\hat{\mathbf{a}}$ con las siguientes reglas de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{a}}_\alpha, \hat{\mathbf{a}}_{\alpha'}^\dagger] &= \delta_{\alpha\alpha'} \\ [\hat{\mathbf{a}}_\alpha^\dagger, \hat{\mathbf{a}}_{\alpha'}^\dagger] &= [\hat{\mathbf{a}}_\alpha, \hat{\mathbf{a}}_{\alpha'}] = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Los operadores actúan de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_\alpha |N_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha} |N_\alpha - 1\rangle \\ \hat{\mathbf{a}}_\alpha^\dagger |N_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1} |N_\alpha + 1\rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

Con el operador de creación y aniquilación definimos el operador de número que actúa como sigue

$$\hat{\mathbf{N}} |N_\alpha\rangle = n_\alpha |N_\alpha\rangle \quad (3.14)$$

El hamiltoniano escrito en segunda cuantización es ³

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha'} \sum_{\alpha} \langle \alpha' | H^1 | \alpha \rangle \hat{\mathbf{a}}_{\alpha'}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_\alpha \quad (3.15)$$

1928 E. Wigner y P. Jordan hicieron la extensión para fermiones.

³Donde hemos utilizado $|\alpha\rangle$ para denotar los estados de manera más cómoda

donde H^1 es el hamiltoniano de una partícula dado por

$$\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}) \quad (3.16)$$

Y los elementos de matriz son[21]

$$\langle \alpha' | H^1 | \alpha \rangle = \int d^3r \phi_{\alpha'}^*(r) H^1 \phi_{\alpha}(r) \quad (3.17)$$

Usualmente un estado arbitrario se expande en términos de los eigenestados del hamiltoniano, es decir

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N_1, N_2, \dots} c(N_1, N_2, \dots) \Phi_{\alpha}(r_1, r_2, \dots) \quad (3.18)$$

Entonces en este formalismo, la expansión del mismo estado es [21, 38].

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N_1, N_2, \dots} f(N_1, N_2, \dots) |N_1, N_2, \dots, N_N\rangle \quad (3.19)$$

Como se muestra en [12], los coeficientes $c(N_1, N_2, \dots)$ y $f(N_1, N_2, \dots)$ en (3.18) y (3.19) son equivalentes, entonces si se resuelve el problema físico en segunda cuantización se puede determinar un conjunto de coeficientes $c(N_1, N_2, \dots)$ que nos dan una solución de la ecuación de Schrödinger del sistema de muchas partículas.

La expansión (3.19) y el hamiltoniano escrito como apartado 3.2.1 es lo que se conoce como *segunda cuantización*.

3.3. Potencial termodinámico

3.3.1. Ensemble gran canónico

Las herramientas desarrolladas en la sección anterior facilitan la obtención de las cantidades termodinámicas necesarias para hacer uso de la GTD.

Para hacer lo anterior, recordamos el procedimiento estándar que se utiliza en Física Estadística para obtener las propiedades termodinámicas de los sistemas.

Primero necesitamos elegir un ensemble. Nosotros trabajaremos en el ensemble gran canónico, en el cual las variables independientes son la temperatura (T), el volumen (V) y el potencial químico (μ).

Después es necesario conocer la matriz de densidad del sistema. En este ensemble la matriz de densidad es

$$\hat{\rho} = \frac{\exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})]}{Tr \left\{ \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})] \right\}} \quad (3.20)$$

Donde

$$Tr \left\{ \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})] \right\} \quad (3.21)$$

es la función de gran partición, que denotaremos como \mathcal{Z} .

En el formalismo de segunda cuantización es inmediato evaluar \mathcal{Z} , como veremos más adelante.

El potencial termodinámico fundamental en este ensamble es el gran potencial, el cual denotaremos como $\Xi(T, V, \mu)$, se obtiene de la siguiente manera⁴

$$\begin{aligned} \Xi(T, V, \mu) &= -k_B T \ln \left\{ Tr \left[\exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})] \right] \right\} \\ &= \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle - TS - \mu \langle \hat{\mathbf{N}} \rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

Todas las cantidades termodinámicas se calculan a partir del gran potencial mediante las siguientes relaciones.[16, 20, 27]

$$\begin{aligned} S &= - \left(\frac{\partial \Xi}{\partial T} \right)_{V, \mu} \\ P &= - \left(\frac{\partial \Xi}{\partial V} \right)_{T, \mu} \\ N &= - \left(\frac{\partial \Xi}{\partial \mu} \right)_{T, V} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Antes de continuar, calculamos explícitamente el elemento de matriz que aparece en apartado 3.2.1. Como las ϕ_α son eigenfunciones del hamiltoniano, el elemento de matriz es muy sencillo[21]:

$$\langle \alpha' | H^1 | \alpha \rangle = \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha' \alpha} \quad (3.24)$$

Con todo esto podemos calcular (3.21) rápidamente.

⁴El promedio de las cantidades físicas s calcula como $\langle \hat{O} \rangle = Tr(\hat{\rho}\hat{O})$

Con apartado 3.3.1 tenemos que

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\alpha'} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \delta_{\alpha'\alpha} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha}\end{aligned}\quad (3.25)$$

Y reconocemos el operador de número, entonces nos queda:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \hat{\mathbf{N}}_{\alpha} \quad (3.26)$$

De esto vemos que $[\mathcal{H}, \hat{\mathbf{N}}] = 0$

Entonces la traza es

$$\begin{aligned}Tr \left\{ \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{\mathbf{N}})] \right\} \\ &= \sum_{N_{\alpha_1}, \dots, N_{\alpha_N}} \langle N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} | \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{\mathbf{N}})] | N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} \rangle \\ &= \sum_{N_{\alpha_1}, \dots, N_{\alpha_{\infty}}} \langle N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_N} | \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{\mathbf{N}})] | N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} \rangle\end{aligned}\quad (3.27)$$

Ahora utilizando (apartado 3.3.1) y $\hat{\mathbf{N}} = \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{N}}_{\alpha}$ nos queda

$$\begin{aligned}&\sum_{N_{\alpha_1}, \dots, N_{\alpha_N}} \langle N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} | \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} (\varepsilon_{\alpha} \hat{\mathbf{N}}_{\alpha} - \mu \hat{\mathbf{N}}_{\alpha}) \right] | N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} \rangle \\ &= \sum_{N_{\alpha_1}, \dots, N_{\alpha_N}} \langle N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} | \exp [-\beta [(\varepsilon_1 N_1 + \varepsilon_2 N_2 + \dots) - \mu(N_1 + N_2 + \dots)]] | N_{\alpha_1}, N_{\alpha_2}, \dots, N_{\alpha_{\infty}} \rangle\end{aligned}\quad (3.28)$$

Usando ((3.11)) nos queda

$$\begin{aligned}
& \sum_{N_{\alpha_1}, \dots, N_{\alpha_N}} \langle N_{\alpha_1} | \exp(-\beta(\varepsilon_1 N_1 - \mu N_1)) | N_{\alpha_1} \rangle \cdots \langle N_{\alpha_\infty} | \exp(-\beta(\varepsilon_\infty N_\infty - \mu N_\infty)) | N_{\alpha_\infty} \rangle \\
& \qquad \qquad \qquad (3.29) \\
& = \sum_{\alpha_1} \langle N_{\alpha_1} | \exp(-\beta(\varepsilon_1 N_1 - \mu N_1)) | N_{\alpha_1} \rangle \cdots \sum_{\alpha_\infty} \langle N_{\alpha_\infty} | \exp(-\beta(\varepsilon_\infty N_\infty - \mu N_\infty)) | N_{\alpha_\infty} \rangle
\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha_1} \langle N_{\alpha_1} | \exp(-\beta(\varepsilon_1 - \mu))^{N_1} | N_{\alpha_1} \rangle \cdots \sum_{\alpha_\infty} \langle N_{\alpha_\infty} | \exp(-\beta(\varepsilon_\infty - \mu))^{N_\infty} | N_{\alpha_\infty} \rangle \quad (3.30) \\
& = \prod_j \sum_{N_j} \langle N_j | \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]^{N_j} | N_j \rangle = \prod_j \sum_{N_j} \langle N_j | N_j \rangle \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]^{N_j} \\
& = \prod_j \sum_{N_j} \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]^{N_j}
\end{aligned}$$

Finalmente llegamos a⁵

$$\mathcal{Z} = \prod_j \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\varepsilon_j - \mu))} \quad (3.31)$$

Entonces el gran potencial está dado por⁶

$$\Xi(T, V, \mu) = -k_B T \ln(\mathcal{Z}) = -k_B T \sum_p \ln(1 - \beta(\varepsilon_p - \mu)) \quad (3.32)$$

3.4. Propiedades termodinámicas

Usando los resultados anteriores podemos obtener las expresiones para la energía interna y para el número de partículas.

⁵Utilizando $\sum_{r=0}^{\infty} x^r = \frac{1}{1-x}$ para $|x| < 1$.

⁶Cambiamos el índice j por p para hacer referencia al momento.

Ahora calculamos

$$N = \langle N \rangle = \frac{\left(\exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu\hat{N})] \hat{N} \right)}{\text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu\hat{N})] \right\}} \quad (3.33)$$

y la energía interna $U = \langle \mathcal{H} \rangle$.

Haciendo cálculos similares a ((3.27)) nos queda

$$\begin{aligned} N &= \sum_p \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon_p) - 1} \\ U &= \sum_p \frac{\varepsilon_p}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon_p) - 1} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Donde $z = \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right)$ es la fugacidad. De la expresión para N podemos ver que se debe cumplir que $0 \leq z \leq 1$, lo cual nos dice que el potencial químico debe ser negativo, $\mu \leq 0$.

Ahora consideremos un volumen muy grande, necesitamos reemplazar la suma sobre p por una integral, de manera que las nuevas cantidades estén dadas por

$$\begin{aligned} N &= \int \frac{d\varepsilon g(\varepsilon, T)}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) - 1} \\ U &= \int \frac{d\varepsilon g(\varepsilon, T) \varepsilon}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) - 1} \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde $g(\varepsilon, T) = \frac{2m\pi^{\frac{\sigma}{2}}(2m\varepsilon)^{\frac{\sigma}{2}-1}}{\frac{\sigma}{2}\Gamma\left(\frac{\sigma}{2}\right)}$ es la densidad de estados de energía[16].

Sustituyendo lo anterior tenemos que

$$N = \frac{(2m\pi)^{\frac{\sigma}{2}}}{\frac{\sigma}{2}\Gamma(\sigma/2)} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{\sigma}{2}-1} d\varepsilon}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) - 1} + \frac{z}{1-z} \quad (3.36)$$

El segundo término corresponde al estado base ($\varepsilon = 0$). Hacemos un cambio de variable $x = \beta\varepsilon$ y llegamos a

$$\begin{aligned} N &= \left(\frac{L}{\lambda_T}\right)^\sigma \int_0^\infty \frac{x^{\frac{\sigma}{2}-1} dx}{z^{-1} e^x - 1} + \frac{z}{1-z} \\ &= \left(\frac{L}{\lambda_T}\right)^\sigma \text{Li}_{\frac{\sigma}{2}}(z) + \frac{z}{1-z} \end{aligned} \quad (3.37)$$

λ_T es la longitud de onda térmica y $Li_{\frac{\sigma}{2}}(z)$ es la función polilogaritmo de orden $\sigma/2$. Un resumen de las propiedades de este tipo de funciones se encuentra en el apéndice A.

Haciendo cálculos similares llegamos a la siguiente expresión para la energía interna:

$$U = \frac{3}{2} \frac{V}{\lambda_T^3} k_B T Li_{\frac{5}{2}}(z) \quad (3.38)$$

Y finalmente el gran potencial es

$$\Xi = -\frac{V}{\lambda_T^3} k_B T Li_{\frac{5}{2}}(z) + k_B T \ln(1 - z) \quad (3.39)$$

En el siguiente capítulo analizaremos con más detalle las expresiones anteriores.

Capítulo 4

Condensado de Bose-Einstein

En el capítulo anterior obtuvimos las expresiones generales de las cantidades termodinámicas importantes para nuestro sistema. Concentraremos el análisis para $\sigma = 3$.

Primero observamos que el segundo término de (3.39) es $\sim \ln(1 + N_0)$ entonces en el límite termodinámico no contribuye para ningún valor de $T(z \neq 1)$ ¹.

Ahora nos fijamos que pasa con N . De (3.37) observamos que el segundo término no contribuye en el límite termodinámico para T alta, es decir, el número de partículas en el estado base es despreciable y todas las partículas ocupan estados excitados.

Algo muy distinto ocurre cuando $z = 1$. Primero calculamos el número máximo de partículas (N_{max}) que ocupan los estados excitados, para cierta temperatura T_c .

La función $Li_{\frac{3}{2}}(z)$ alcanza su valor máximo para $z = 1$, es decir $\mu = 0$. Entonces N_{max} es

$$\begin{aligned} N_{max} &= \left(\frac{L}{\lambda_{T_c}} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}-1} dx}{e^x - 1} \\ &= \left(\frac{L}{\lambda_{T_c}} \right)^3 \zeta(3/2) \end{aligned} \quad (4.1)$$

Entonces podemos reescribir (3.37) de la siguiente manera

$$1 = \frac{N_{max}}{N} + \frac{N_0}{N} \quad (4.2)$$

El segundo término ya no es despreciable ya que N_0 diverge, entonces los estados

¹Esto se debe a que si nombramos $N_0 = \frac{z}{1-z}$ entonces $z = 1 + \frac{1}{N_0}$, luego al hacer el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$, nos queda $\frac{k_B T}{V} \ln(N_0 + 1) \rightarrow 0$.

excitados ya no contienen a todas las partículas y se hace favorable para el sistema que se ocupe el estado base con el exceso de partículas. A esto se le conoce como **condensación Bose-Einstein**[16]

Usando (4.1) podemos calcular la temperatura a la que esto sucede (fijando la densidad de partículas):

$$T_c = \left(\frac{N}{L^3 \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{2/3} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right) \quad (4.3)$$

La condensación Bose-Einstein es interpretada como una transición de fase que puede ser modelada como de primer orden o de segundo orden.

Si nos fijamos en las isothermas (figura 4.1), el diagrama de fase nos indica que la condensación de B.E. puede pensarse intuitivamente como la transición vapor-líquido figura 4.2. En esta situación podemos calcular el calor latente de la transición y ver que es distinto de cero. Es por eso que puede considerarse como una transición de primer orden.

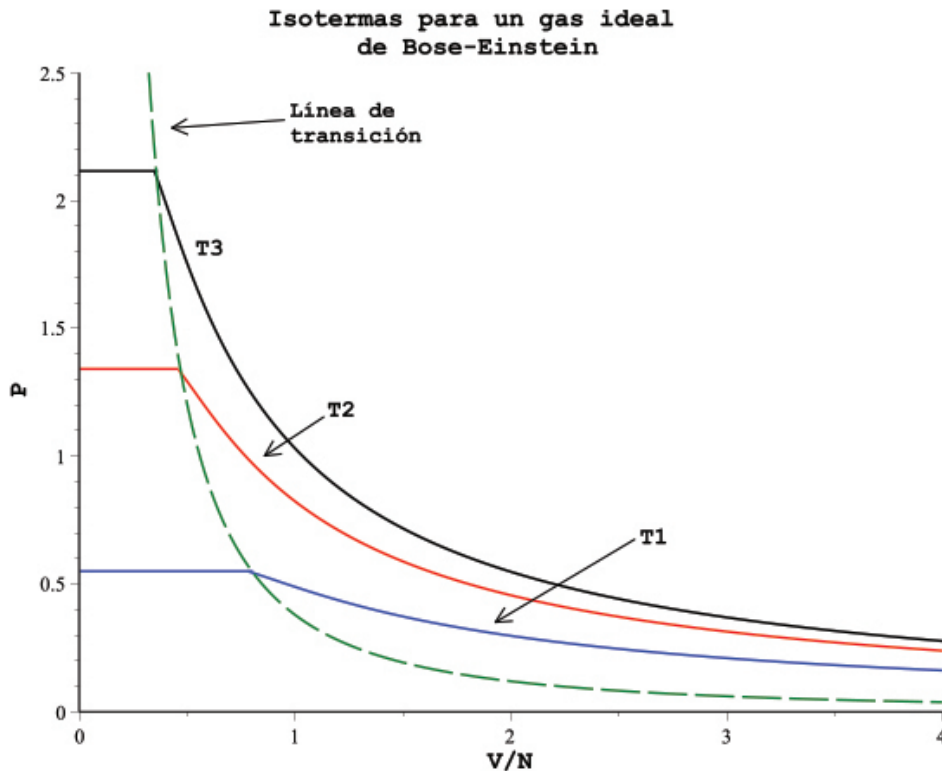


Figura 4.1: *Isotermas de una gas ideal de Bose-Einstein, se observa también la línea de transición que corresponde a $pV^{5/3} = cte$*

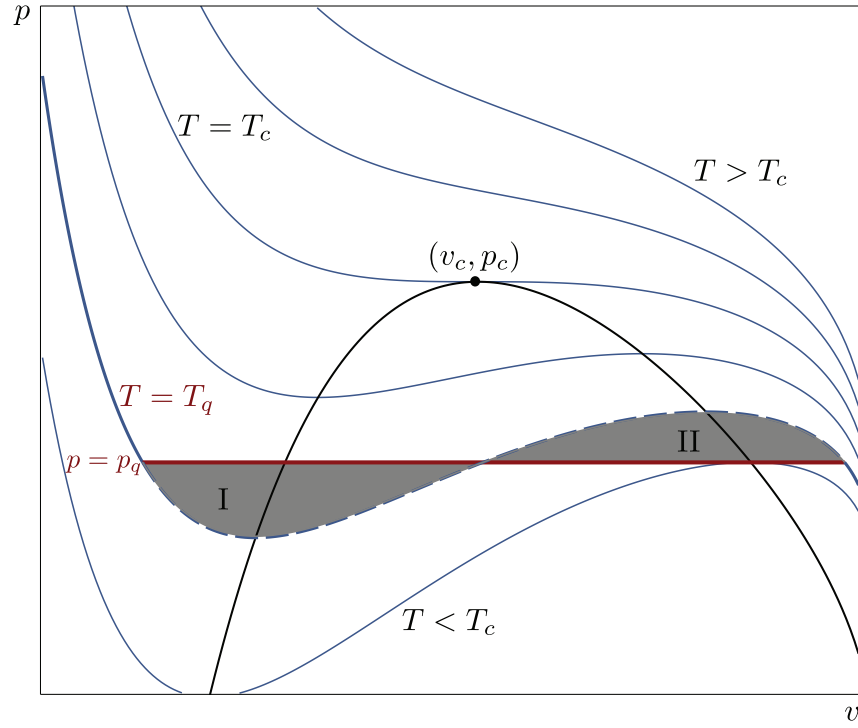


Figura 4.2: *Isotermas de un gas de Van der Waals con la construcción de Maxwell. Se observa la transición líquido-vapor (Imagen adaptada de [6])*

En cambio si uno se fija en el calor específico del sistema, haciendo los cálculos para una densidad fija, el comportamiento de C_v presenta una discontinuidad en su derivada para $z \rightarrow 1$, i.e. $T \rightarrow T_c$.

Por el momento escribamos las ecuaciones relevantes para la región $T > T_c$ ²

$$\Xi = -\frac{V}{\lambda_T^3} k_B T \text{Li}_{\frac{5}{2}}(z) = -pV \quad (4.4)$$

$$U = \frac{3}{2} \frac{V}{\lambda_T^3} k_B T \text{Li}_{\frac{5}{2}}(z) \quad (4.5)$$

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} \text{Li}_{\frac{3}{2}}(z) \quad (4.6)$$

$$S = \frac{5}{2} \frac{V k_B}{\lambda_T^3} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(z) - N k_B \ln(z) \quad (4.7)$$

$$P = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(z) \quad (4.8)$$

Para calcular el calor específico tomamos la ecuación de U y la de N y hacemos lo

²Cambiamos L^3 por V para ahorrar notación

siguiente

$$U = \frac{3}{2} N k_B T \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)} \quad (4.9)$$

Entonces

$$C_V = \frac{3}{2} N k_B \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)} + \frac{3}{2} N k_B T \frac{\partial}{\partial T} \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)} \quad (4.10)$$

Usamos la relación de recurrencia para las derivadas de las funciones polilogaritmo, obtenemos lo siguiente

$$C_V = \frac{3}{2} N k_B \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)} + \frac{3}{2} N k_B T \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \left(1 - \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z) Li_{\frac{1}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)^2} \right) \quad (4.11)$$

Sabemos la relación de z con el potencial químico y la temperatura y con eso podemos calcular la derivada que aparece en la expresión anterior. Pero para poder tener todo en términos de funciones polilogaritmo usaremos la ecuación para N .

De esa ecuación tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial T} Li_{\frac{3}{2}}(z) = \frac{\partial}{\partial T} \frac{N \lambda_T^3}{V} = -\frac{3}{2} \frac{1}{T} Li_{\frac{3}{2}}(z) \quad (4.12)$$

Pero

$$\frac{\partial}{\partial T} Li_{\frac{3}{2}}(z) = \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} Li_{\frac{1}{2}}(z) \quad (4.13)$$

Entonces depejamos la relación para $\frac{\partial z}{\partial T}$:

$$\frac{\partial z}{\partial T} = \frac{z \frac{\partial}{\partial T} Li_{\frac{3}{2}}(z)}{Li_{\frac{1}{2}}(z)} = -\frac{3}{2} \frac{1}{T} \frac{Li_{\frac{3}{2}}(z)}{Li_{\frac{1}{2}}(z)} \quad (4.14)$$

Con todo lo anterior el calor específico queda como

$$C_V = \frac{15}{4} N k_B \frac{Li_{\frac{5}{2}}(z)}{Li_{\frac{3}{2}}(z)} - \frac{9}{4} N k_B \frac{Li_{\frac{3}{2}}(z)}{Li_{\frac{1}{2}}(z)} \quad (4.15)$$

Ahora para ver el comportamiento de C_V hacemos una gráfica. Ponemos todo en función

de la temperatura crítica (que ya habíamos encontrado)³ y usamos las aproximaciones para las funciones polilogaritmo que aparecen en C_V

El calor específico para $T > T_c$ es (4.15) y para la fase condensada, i.e., $T < T_c$, es[27, 23]

$$C_V = \frac{15}{4} N k_B \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (4.16)$$

La gráfica se observa en la figura 4.3.

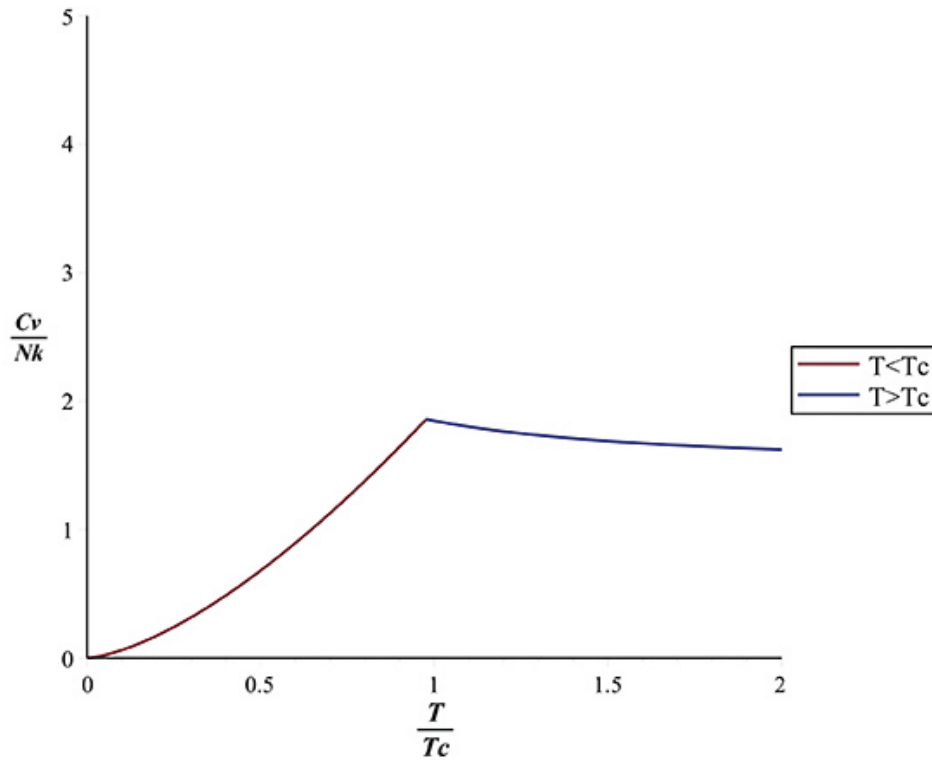


Figura 4.3: Calor específico de una gas ideal de Bose-Einstein

En la figura 4.3 podemos observar que la gráfica tiene un pico para el valor $T = T_c$ que corresponde a $z = 1$. De esto podemos inferir que la derivada de C_V tendrá una discontinuidad en ese mismo punto, lo cual nos dice que $\left(\frac{\partial^2 U}{\partial T^2} \right)$ es discontinua para $T = T_c$, esto nos diría que es una transición de segundo orden[16].

$${}^3T_c = \left(\frac{N}{V \zeta(\frac{3}{2})} \right)^{2/D} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mk_B} \right)$$

Sin embargo el orden de la transición ha sido tratado por varios autores [20, 24, 27]. Para los propósitos de nuestro trabajo y de la GTD utilizaremos el criterio de Ehrenfest para clasificar el orden de la transición de fase y la analogía con la transición vapor-líquido, que es de primer orden, como se discutió anteriormente.

Capítulo 5

GTD del Condensado de Bose-Einstein

5.1. El potencial termodinámico

En primera instancia, deberíamos utilizar el gran potencial para realizar los siguientes cálculos. Pero durante la realización de este trabajo nos encontramos con muchas discrepancias en los resultados obtenidos utilizando¹

$$\Xi = -\frac{V}{\lambda_T^3} T Li_{\frac{5}{2}}(z) = -pV. \quad (5.1)$$

Lo anterior se debe a que no es posible aplicar de manera directa el criterio de Ehrenfest a las derivadas de (5.1) para poder interpretar la condensación de Bose-Einstein como una transición de fase de primer orden. Sin embargo, recordando lo descrito en el capítulo anterior, al tomar la energía interna como potencial termodinámico, la condensación resulta ser una transición de fase, derivada del comportamiento del calor específico del sistema figura 4.3, es por esto que utilizamos la expresión de la energía interna del sistema como potencial termodinámico, modificando la dependencia en algunas variables termodinámicas: reemplazamos V por N y escribimos explícitamente la dependencia de la fugacidad con el potencial químico y la temperatura:

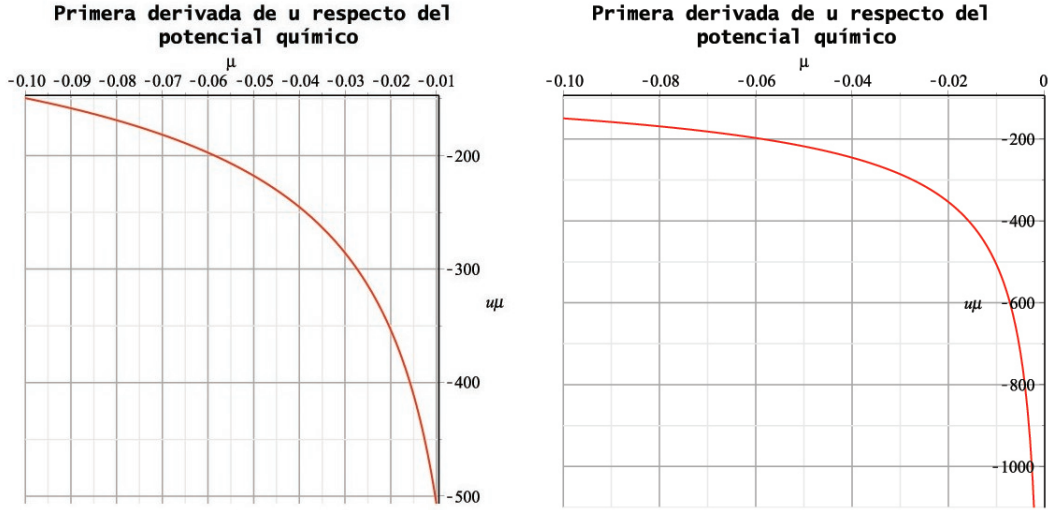
$$U/N = \frac{3}{2} T \frac{Li_{\frac{5}{2}}(\exp(\frac{\mu}{T}))}{Li_{\frac{3}{2}}(\exp(\frac{\mu}{T}))}. \quad (5.2)$$

El análisis se realizará para valores del potencial químico cercanos a cero, para poder mostrar la discontinuidad en las derivadas de este potencial así como en el escalar de

¹A partir de este momento utilizaremos en todas las ecuaciones unidades geometrizadas.

curvatura.

Graficamos las primeras derivadas de (5.2) respecto del potencial químico:



(a) Primera derivada de (5.2) respecto de μ para valores del potencial químico entre (-0.1,-0.01)

(b) Primera derivada de (5.2) respecto de μ para valores del potencial químico entre (-0.1,-0.0000001) respectivamente.

Figura 5.1: Derivadas de (5.2) respecto de μ

Observamos en la figura 5.1 que las primeras derivadas de (5.2) divergen para valores del potencial químico cercanos a cero.

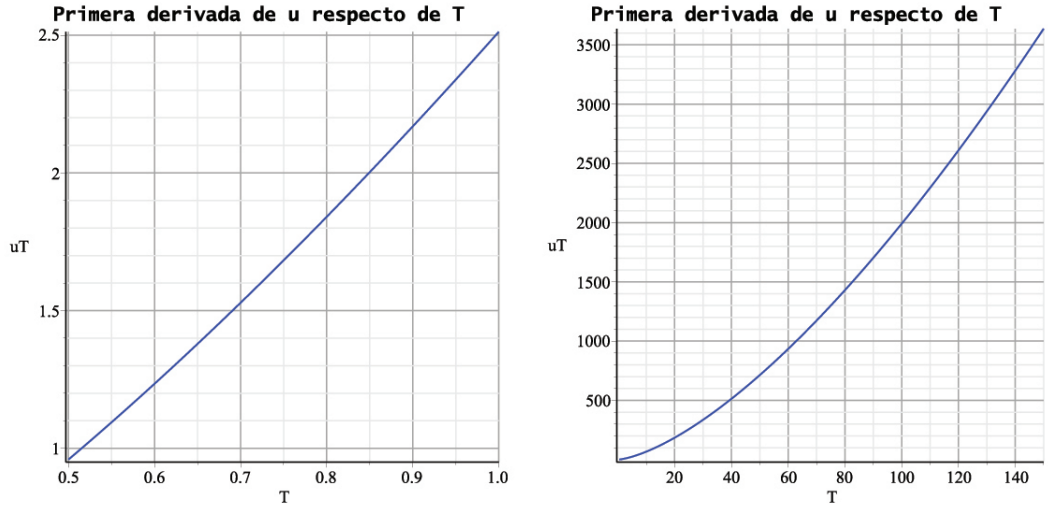
Si graficamos las primeras derivadas con respecto a la temperatura obtenemos la figura 5.2 (para distintos valores de T).

En este caso no se presenta divergencia. Los resultados anteriores nos indican que la métrica que debemos utilizar es la más general, invariante ante transformaciones totales y parciales de Legendre, ya que se ha mostrado que describe sistemas que presentan transiciones de fase de primer orden[32].

Haremos una consideración extra al momento de calcular la métrica, reescalaremos la ecuación de la energía interna utilizando la temperatura crítica del sistema, utilizando (3.37) y (4.1)

$$u = \frac{U}{N} = \frac{3}{2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{5}{2}} \frac{Li_{\frac{5}{2}}(\exp(\frac{\mu}{T}))}{Li_{\frac{3}{2}}(1)} \quad (5.3)$$

Hacemos un cambio de variable para facilitar los cálculos: $x = \frac{T}{T_c}$. Entonces el potencial termodinámico que utilizaremos es



(a) Primeras derivadas de (5.2) respecto de T para valores de la temperatura entre (0.5,1) (b) Primera derivada de (5.2) respecto de T para valores de la temperatura entre (0.5,150)

Figura 5.2: Derivadas de (5.2) respecto de T

$$u = \frac{3}{2} T_c x^{\frac{5}{2}} \frac{Li_{\frac{5}{2}}(\exp(\frac{\mu}{xT_c}))}{Li_{\frac{3}{2}}(1)} \quad (5.4)$$

5.2. Métrica

Recordamos que la métrica en el espacio de estados de equilibrio está dada por

$$g = \sum_{\alpha, \beta} \Lambda \left(E^\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial E^\alpha} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^\alpha \partial E^\beta} dE^\alpha \otimes dE^\beta. \quad (5.5)$$

En nuestro caso tenemos que

$$\begin{aligned} \Phi &= u. \\ E^\alpha &= (x, \mu). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Entonces el elemento de línea es

$$\begin{aligned}
ds^2 = & x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx^2 + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial \mu} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial \mu^2} d\mu^2 \\
& + 2 \left[x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial \mu} \right) \right] \frac{\partial^2 u}{\partial \mu \partial x} d\mu dx.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Utilizando (5.4) y (5.7) creamos una hoja de cálculo en Maple 18² y podemos obtener la métrica explícitamente. Para facilitar su visualización generamos una matriz de 2×2 con componentes dadas por

$$\begin{aligned}
g_{11} = & \frac{9}{32\zeta(\frac{3}{2})^2 T_c} \left[5xT_c Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) - 2\mu Li_{\frac{3}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) \right] \\
& \times \left[15x^2 T_c^2 Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) - 12\mu x T_c Li_{\frac{3}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) + 4\mu^2 Li_{\frac{1}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\begin{aligned}
g_{12} = & -\frac{45x^2}{128\zeta(\frac{3}{2})^2} \left[-3xT_c Li_{\frac{3}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) \right] \\
& \times \left[\sqrt{2} Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{2\mu}{xT_c}\right) \right) - 4Li_{\frac{5}{2}} \left(-\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.9}$$

$$g_{22} = \frac{9}{4} \frac{\mu x^2 Li_{\frac{3}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right) Li_{\frac{1}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right) \right)}{\zeta(\frac{3}{2})^2 T_c} \tag{5.10}$$

y

$$g_{21} = g_{12}. \tag{5.11}$$

5.3. Tensor de curvatura y escalar de curvatura

Utilizando la matriz con componentes dadas por las ecuaciones ((5.8)-(5.10)), calculamos los símbolos de Christoffel y con estos el tensor de curvatura. Nuevamente todos los cálculos se realizan utilizando Maple 18.

El espacio de estados de equilibrio del sistema es de dos dimensiones, entonces basta con analizar el escalar de curvatura³

²La estructura del código de Maple se encuentra en el Apéndice B de este trabajo.

³Esto se debe a que en dos dimensiones el tensor de curvatura es proporcional al escalar de curvatura.

Las expresiones para el tensor de curvatura y el escalar son demasiado complicadas y largas para poder presentarlas en este trabajo. Entonces solamente haremos referencia a los resultados obtenidos en Maple 18.

Para un gas de N bosones sin interacción, obtenemos que

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^\alpha{}_{\beta\mu\nu} &\neq 0 \\ \mathcal{R}_{\alpha\beta} &\neq 0 \\ \mathcal{R} &\neq 0\end{aligned}\tag{5.12}$$

Lo anterior indica que el sistema presenta interacción termodinámica desde el punto de vista de la GTD. Esta interacción termodinámica se debe a efectos cuánticos, que no están considerados en el hamiltoniano que describe al sistema, ecuación capítulo 3, ya que podemos observar que solamente tenemos término cinético y no hay potencial de interacción entre las partículas.

De acuerdo al análisis hecho en el capítulo 4, el sistema presenta una transición de fase de primer orden para valores de μ cercanos a cero, entonces para la GTD, esta transición de fase debe observarse como una divergencia en el escalar de curvatura.

Realizamos un análisis numérico del escalar de curvatura, para x fija y graficamos. Los resultados se muestran en figura 5.3.

Observamos en la figura 5.3 que el escalar de curvatura diverge para valores del potencial químico cercanos a cero. El comportamiento se mantiene cada vez que realizamos un acercamiento, como podemos observar en el apéndice B.

Esto confirma que el sistema presenta una transición de fase de primer orden. El comportamiento del escalar de curvatura es sensible para valores de μ cercanos a cero. Entonces es importante recalcar que todos los resultados obtenidos, son válidos solamente para esos valores.

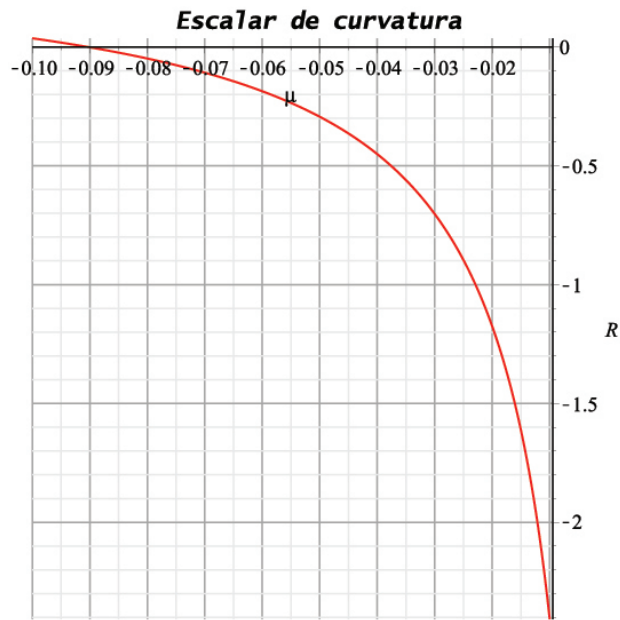
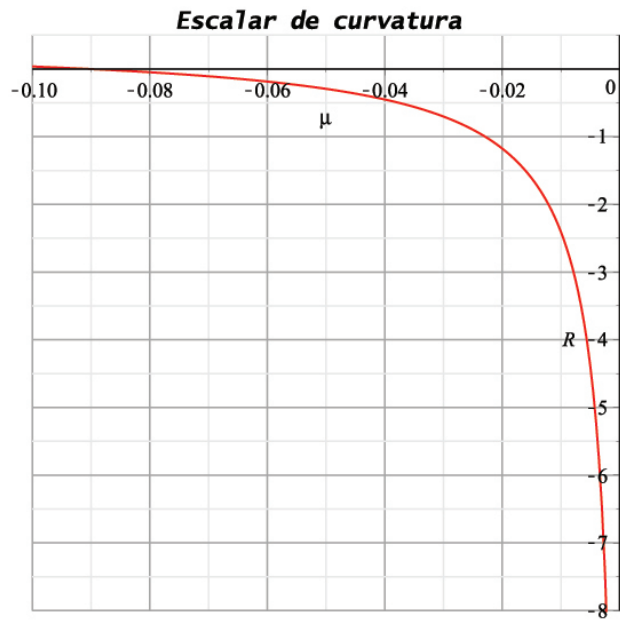
(a) Gráfica del escalar de curvatura para $x = 1$ y $\mu \in [-0,1, -0,01]$ (b) Gráfica del escalar de curvatura para $x = 1$ y $\mu \in [-0,1, -0,000001]$

Figura 5.3: Gráficas para el escalar de curvatura, tomando x fija y valores del potencial químico cercanos a cero. La figura 5.3(b) es un acercamiento de la figura 5.3(a) para mostrar la divergencia.

Capítulo 6

Termodinámica geométrica

En el capítulo anterior obtuvimos resultados sobre las propiedades geométricas del condensado de Bose-Einstein, utilizando la métrica de GTD. En este capítulo utilizaremos una métrica hessiana para describir las propiedades de nuestro sistema termodinámico. El análisis lo realizaremos para distintos potenciales utilizando en todos los casos, el potencial químico y la temperatura como coordenadas.

6.1. Métricas hessianas

Weinhold y Ruppeiner utilizaron métricas hessianas en la variedad de estados de equilibrio para describir las propiedades termodinámicas de los sistemas, como mencionamos en el capítulo 1. La métrica de Weinhold ha sido utilizada para estudiar el concepto de longitud termodinámica, las propiedades físicas de los sistemas termodinámicos, la estructura Riemanniana asociada a la variedad de estados de equilibrio, entre otras cosas. El elemento de línea es

$$ds^2 = g_{ij}^W dN^i dN^j = \frac{\partial^2 U}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j. \quad (6.1)$$

Ruppeiner intentó entender el concepto de longitud termodinámica y de esta manera introdujo una métrica con elemento de línea dado por

$$ds^2 = g_{ij}^R dN^i dN^j = -\frac{\partial^2 S}{\partial N^i \partial N^j} dN^i dN^j, \quad (6.2)$$

donde N^i son variables extensivas, S es la entropía del sistema, U es la energía interna del sistema y $i = 1, \dots, n$ con n el número de grados de libertad.

En general una métrica hessiana tiene como elemento de línea

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx^j = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^i \partial x^j} dx^i dx^j, \quad (6.3)$$

donde Φ es una función continua.

Estas métricas proporcionan información geométrica valiosa de los sistemas estudiados, sin embargo presentan un problema: no son invariantes bajo transformaciones de Legendre. Lo anterior nos dice que los resultados que se obtengan dependen de la elección de potencial termodinámico, entonces estas métricas no son físicas [28].

Por ejemplo si tomamos una sistema con dos grados de libertad, (S, V) , la métrica de Weinhold es

$$g^W = \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} dS \otimes dS + \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} dS \otimes dV + \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} dV \otimes dS + \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} dV \otimes dV. \quad (6.4)$$

En principio g^W proviene de una métrica G_W , es decir, se obtiene a través de

$$\begin{aligned} g &= \varphi^*(G) = G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial E^\alpha} \frac{\partial Z^B}{\partial E^\beta} dE^\alpha \otimes dE^\beta \\ &= g_{11} dE^1 \otimes dE^1 + g_{12} dE^1 \otimes dE^2 + g_{21} dE^2 \otimes dE^1 + g_{22} dE^2 \otimes dE^2. \end{aligned} \quad (6.5)$$

El elemento de línea es

$$\begin{aligned} ds_W^2 &= G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial E^\alpha} \frac{\partial Z^B}{\partial E^\beta} dE^\alpha dE^\beta \\ &= g_{11} (dE^1)^2 + 2g_{12} dE^1 dE^2 + g_{22} (dE^2)^2. \end{aligned} \quad (6.6)$$

En nuestro caso

$$Z^A = \{Z^0, Z^1, Z^2, Z^3, Z^4\} = \{U, S, V, T, -P\}, \quad (6.7)$$

y

$$E^\alpha = \{E^1, E^2\} = \{S, V\}. \quad (6.8)$$

Por ejemplo para g_{11} tenemos[28]

$$\begin{aligned}
g_{11} &= G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial E^1} \frac{\partial Z^B}{\partial E^1} dE^1 dE^1 \\
&= G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial S} \frac{\partial Z^B}{\partial S} dS dS.
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Desarrollamos y tenemos

$$\begin{aligned}
g_{11} &= G_{00} \frac{\partial Z^0}{\partial S} \frac{\partial Z^0}{\partial S} dS^2 + G_{01} \frac{\partial Z^0}{\partial S} \frac{\partial Z^1}{\partial S} dS^2 + G_{02} \frac{\partial Z^0}{\partial S} \frac{\partial Z^2}{\partial S} dS^2 + G_{03} \frac{\partial Z^0}{\partial S} \frac{\partial Z^3}{\partial S} dS^2 + \\
&\hspace{15em} (6.10) \\
&G_{04} \frac{\partial Z^0}{\partial S} \frac{\partial Z^4}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{10} \frac{\partial Z^1}{\partial S} \frac{\partial Z^0}{\partial S} dS^2 + G_{11} \frac{\partial Z^1}{\partial S} \frac{\partial Z^1}{\partial S} dS^2 + G_{12} \frac{\partial Z^1}{\partial S} \frac{\partial Z^2}{\partial S} dS^2 + G_{13} \frac{\partial Z^1}{\partial S} \frac{\partial Z^3}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{14} \frac{\partial Z^1}{\partial S} \frac{\partial Z^4}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{20} \frac{\partial Z^2}{\partial S} \frac{\partial Z^0}{\partial S} dS^2 + G_{21} \frac{\partial Z^2}{\partial S} \frac{\partial Z^1}{\partial S} dS^2 + G_{22} \frac{\partial Z^2}{\partial S} \frac{\partial Z^2}{\partial S} dS^2 + G_{23} \frac{\partial Z^2}{\partial S} \frac{\partial Z^3}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{24} \frac{\partial Z^2}{\partial S} \frac{\partial Z^4}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{30} \frac{\partial Z^3}{\partial S} \frac{\partial Z^0}{\partial S} dS^2 + G_{31} \frac{\partial Z^3}{\partial S} \frac{\partial Z^1}{\partial S} dS^2 + G_{32} \frac{\partial Z^3}{\partial S} \frac{\partial Z^2}{\partial S} dS^2 + G_{33} \frac{\partial Z^3}{\partial S} \frac{\partial Z^3}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{34} \frac{\partial Z^3}{\partial S} \frac{\partial Z^4}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{40} \frac{\partial Z^4}{\partial S} \frac{\partial Z^0}{\partial S} dS^2 + G_{41} \frac{\partial Z^4}{\partial S} \frac{\partial Z^1}{\partial S} dS^2 + G_{42} \frac{\partial Z^4}{\partial S} \frac{\partial Z^2}{\partial S} dS^2 + G_{43} \frac{\partial Z^4}{\partial S} \frac{\partial Z^3}{\partial S} dS^2 + \\
&G_{44} \frac{\partial Z^4}{\partial S} \frac{\partial Z^4}{\partial S} dS^2.
\end{aligned}$$

Tomando en cuenta (6.7) y (6.8) y que

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial U}{\partial S} \right) &= U_S = T \\
\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right) &= U_V = -P.
\end{aligned} \tag{6.11}$$

Llegamos a

$$g_{11} = G_{00}T^2 - 2G_{01}T + G_{11} + 2G_{03}TU_{SS} - 2G_{04}TU_{SV} + 2G_{13}U_{SS} - 2G_{14}U_{SV} + \quad (6.12)$$

$$G_{33}U_{SS}^2 - 2G_{34}U_{SV}U_{SS} + G_{44}U_{SV}^2.$$

Las componentes g_{12} y g_{22} se calculan de manera similar[28]

$$g_{12} = G_{12} - PG_{01} - PTG_{00} + G_{02}T - U_{SV}^2G_{34} + U_{SV}G_{13} + \quad (6.13)$$

$$U_{SV}TG_{03} - U_{SV}G_{24} + U_{SV}G_{04}P + U_{SV}U_{SS}G_{33} +$$

$$U_{SV}G_{44}U_{VV} + U_{SS}G_{23} - PU_{SS}G_{03} - U_{SS}G_{24}U_{VV} -$$

$$U_{VV}G_{14} - U_{VV}G_{04}T$$

$$g_{22} = G_{22} - 2G_{02}P + G_{00}P^2 + G_{33}U_{SV}^2 + G_{44}U_{VV}^2 - 2U_{VV}G_{24} + 2U_{VV}PG_{04} - \quad (6.14)$$

$$2U_{VV}G_{34}U_{SV} + 2U_{SV}G_{23} - 2U_{SV}PG_{03}$$

Utilizando las ecuaciones anteriores y las componentes de la métrica g podríamos obtener la forma general de G , a esta métrica genera g en el espacio de estados equilibrio, a través del pullback. Utilizando estas ecuaciones y las componentes de la métrica de Weinhold, la forma general de G está dada por[28, 26]

$$G^W = \Theta_G \otimes \Theta_G + dE^\alpha \otimes dI_\alpha. \quad (6.15)$$

Con nuestra elección de coordenadas tenemos

$$G^W = \Theta_G \otimes \Theta_G + dE^1 \otimes dI_1 + dE^2 \otimes dI_2 \quad (6.16)$$

$$= \Theta_G \otimes \Theta_G + dS \otimes dT + dV \otimes d(-P).$$

Una manera sencilla de comprobar que (6.16) induce g_W es calculando explícitamente el pullback:

$$\varphi^*(G^W) = \varphi^*[\Theta_G \otimes \Theta_G + dS \otimes dT + dV \otimes d(-P)]. \quad (6.17)$$

De donde tenemos que

$$\begin{aligned}\varphi^*(\Theta_G \otimes \Theta_G) &= \varphi^*(\Theta_G) \otimes \varphi^*(\Theta_G) = 0. \\ \varphi^*(dS \otimes dT) &= \varphi^*(dS) \otimes \varphi^*(dT) = dS \otimes d\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right). \\ \varphi^*(dV \otimes d(-P)) &= \varphi^*(dV) \otimes \varphi^*(d(-P)) = dV \otimes d\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right).\end{aligned}\tag{6.18}$$

Entonces obtenemos

$$g^W = \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} dS \otimes dS + \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} dS \otimes dV + \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} dV \otimes dS + \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} dV \otimes dV,\tag{6.19}$$

donde usamos que

$$\begin{aligned}d\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right) &= \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} dS + \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} dV \\ d\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right) &= \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} dS + \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} dV.\end{aligned}\tag{6.20}$$

Ahora hacemos una transformación total de Legendre a (6.16), que corresponde a:

$$\tilde{U} = U - TS + PV, \quad S = -\tilde{T}, \quad T = \tilde{S}, \quad V = \tilde{P}, \quad -P = \tilde{V}\tag{6.21}$$

Y de (2.10) sabemos que la 1-forma fundamental de Gibbs es invariante bajo transformaciones totales de Legendre, entonces tenemos

$$\begin{aligned}\tilde{G}^W &= \tilde{\Theta}_G \otimes \tilde{\Theta}_G - d\tilde{T} \otimes d\tilde{S} + d\tilde{P} \otimes d\tilde{V} \\ &= \Theta_G \otimes \Theta_G - d\tilde{T} \otimes d\tilde{S} + d\tilde{P} \otimes d\tilde{V}.\end{aligned}\tag{6.22}$$

Ahora calculamos el pullback y obtenemos

$$\begin{aligned}
g^W &= \varphi^* \left[\Theta_G \otimes \Theta_G - d\tilde{T} \otimes d\tilde{S} + d\tilde{P} \otimes d\tilde{V} \right] \\
&= -d \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{S}} \right) \otimes d\tilde{S} + d \left(-\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{V}} \right) \otimes d\tilde{V}.
\end{aligned} \tag{6.23}$$

Simplificando las diferenciales llegamos a

$$\tilde{g}^W = - \left[\frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \tilde{S}^2} d\tilde{S} \otimes d\tilde{S} + \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \tilde{S} \partial \tilde{V}} d\tilde{S} \otimes d\tilde{V} + \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \tilde{V} \partial \tilde{S}} d\tilde{V} \otimes d\tilde{S} + \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \tilde{V}^2} d\tilde{V} \otimes d\tilde{V} \right]. \tag{6.24}$$

Observamos que (6.24) no coincide con (6.4). Esto es un ejemplo de que las métricas hessianas no son invariantes bajo transformaciones de Legendre.

6.2. Gas ideal de Bose-Einstein

Presentamos los resultados para una gas ideal de Bose-Einstein, nuevamente el análisis se realizó para valores del potencial químico cercanos a cero. Utilizaremos los potenciales presentados en [20] para este sistema y la métrica (6.3).

6.2.1. Entropía

Utilizamos

$$s = S/N = \frac{5}{2} VT^{3/2} \frac{Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \right)}{N} - \ln \left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \right). \tag{6.25}$$

La métrica es

$$g^H = \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} dT \otimes dT + \frac{\partial^2 s}{\partial T \partial \mu} dT \otimes d\mu + \frac{\partial^2 s}{\partial \mu \partial T} d\mu \otimes dT + \frac{\partial^2 s}{\partial \mu^2} d\mu \otimes d\mu. \tag{6.26}$$

Realizando los cálculos explícitos en Maple 18, obtenemos un escalar de curvatura (figura 6.1) que presenta un comportamiento distinto al que se obtuvo utilizando la métrica de GTD, aunque la elección de coordenadas no fue la misma y la representación sea la de la entropía.

Observamos que en este caso el escalar parece tener una discontinuidad, para puntos cercanos a $\mu = -0,05$, lo cual no coincide con los resultados obtenidos utilizando la métrica de GTD.

Para poder comparar directamente realizamos un procedimiento similar al descrito en el capítulo 5 y reescalamos la ecuación del potencial utilizando la temperatura crítica del sistema.



Figura 6.1: Gráfica del escalar de curvatura para $T = 0,5$, $N = 1$, $V = 1$ y $\mu \in [-0,1, -0,01]$

La ecuación queda como

$$s = \frac{5}{2}x^{3/2} \frac{Li_{\frac{5}{2}}\left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right)\right)}{Li_{\frac{3}{2}}(1)} - \ln\left(\exp\left(\frac{\mu}{xT_c}\right)\right). \quad (6.27)$$

Las coordenadas son (x, μ) al igual que en el capítulo 5, entonces la métrica es

$$g^H = \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} dx \otimes dx + \frac{\partial^2 s}{\partial x \partial \mu} dx \otimes d\mu + \frac{\partial^2 s}{\partial \mu \partial x} d\mu \otimes dx + \frac{\partial^2 s}{\partial \mu^2} d\mu \otimes d\mu. \quad (6.28)$$

Nuevamente realizamos los cálculo en Maple 18 y obtenemos un escalar de curvatura (figura figura 6.2) idéntico al que se muestra en la figura figura 6.1.

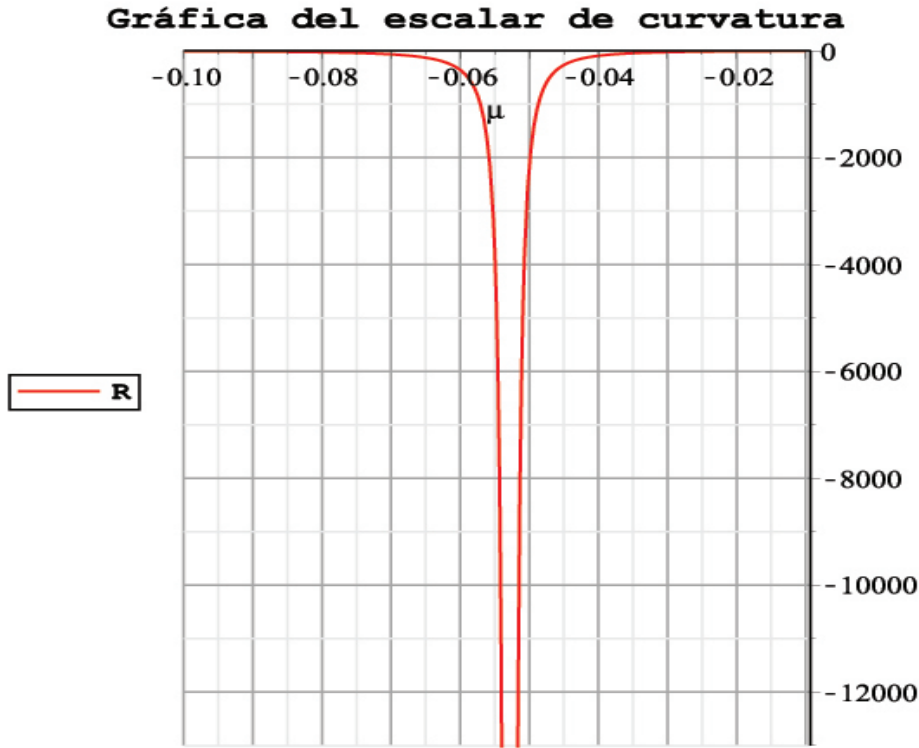


Figura 6.2: Gráfica del escalar de curvatura para $T_c = 0,5$, $x = 1$ y $\mu \in [-0,1, -0,01]$

6.2.2. Energía interna

En este caso el potencial a utilizar es

$$u = U/N = \frac{3}{2}VT^{5/2} \frac{Li_{\frac{5}{2}}(\exp(\frac{\mu}{T}))}{N}. \quad (6.29)$$

La métrica es

$$g^H = \frac{\partial^2 u}{\partial T^2} dT \otimes dT + \frac{\partial^2 u}{\partial T \partial \mu} dT \otimes d\mu + \frac{\partial^2 u}{\partial \mu \partial T} d\mu \otimes dT + \frac{\partial^2 u}{\partial \mu^2} d\mu \otimes d\mu. \quad (6.30)$$

Al realizar los cálculos en Maple 18, obtenemos un escalar de curvatura idéntico a cero. Lo mismo ocurre para la energía libre de Helmholtz y para el potencial de Gibbs, la métrica es degenerada. Al reecalar las ecuaciones utilizando la temperatura crítica los resultados no cambian.

Si tomamos el escalar de curvatura como medida de la interacción termodinámica esto nos dice que el sistema carece de interacción termodinámica y como no existe ninguna divergencia para valores del potencial químico cercanos a cero, no podemos hablar de

condensación Bose-Einstein.

Los resultados anteriores nos muestran que utilizando una métrica hessiana no se obtiene información física del sistema.

Capítulo 7

Conclusiones

Para finalizar este trabajo, recapitularemos los resultados obtenidos:

- I. Se dio una breve introducción a la historia de la Geometría y su relación con la Física, tomando esto como punto de partida para explicar los fundamentos de la GTD.
- II. Utilizando las herramientas que proporciona la Geometría Diferencial se describieron los fundamentos principales de la GTD, se construyeron los objetos geométricos importantes que más adelante se utilizaron para obtener los resultados del capítulo 5.
- III. Después se dio una breve introducción al formalismo de segunda cuantización para ayudarnos a evaluar de manera más rápida y sencilla la función de partición del sistema y poder obtener el potencial termodinámico que después utilizamos para hacer el análisis de acuerdo a la GTD.
- IV. Presentamos una breve descripción de los resultados importantes sobre el condensado de Bose-Einstein (para el caso ideal). En esta parte tratamos el orden de la transición de fase, recalando que existe una discrepancia, algunos autores la consideran de primer orden, otros de segundo orden.
- V. En el capítulo 5 presentamos los resultados de GTD para el gas ideal de bosones y el condensado de Bose-Einstein. El análisis se hizo para valores del potencial químico cercanos a cero. Entonces al calcular el escalar de curvatura se observó que es distinto de cero y al graficarlo en función de μ , encontramos que diverge (siempre y cuando μ tome valores cercanos a cero).
- VI. Finalmente se presentó un análisis rápido de nuestro sistema utilizando métricas hessianas, en donde comprobamos que este tipo de métricas no son invariantes bajo transformaciones de Legendre y los resultados que nos proporcionan no son físicos

Discutamos los resultados que se obtuvieron. Como se mostró en este trabajo existen varias formas de analizar las propiedades de un gas ideal de bosones y de la condensación Bose-Einstein, sin embargo, existen también muchas dificultades para poder proporcionar una descripción completa y satisfactoria del condensado. Una de las metas al comenzar este trabajo era mostrar que a través de la GTD se podría llegar a un mejor entendimiento del condensado. Logramos mostrar que el sistema tiene interacción termodinámica, desde el punto de vista de GTD. Lo anterior no se esperaba, debido a que el hamiltoniano del sistema carece de un potencial de interacción entre los bosones.

El potencial termodinámico que se utilizó no fue la energía interna, fue un potencial auxiliar en términos de las variables naturales del ensamble gran canónico. Idealmente necesitaríamos tener una relación fundamental como $S = S(U, V, N)$ o $U = U(S, V, N)$ sin embargo, para este tipo de sistema se presentan complicaciones respecto a los cálculos que se deben hacer para poder obtener alguna de las anteriores. No obstante los resultados obtenidos son consistentes y el escalar de curvatura diverge cerca de la región de transición reportada en la literatura[19, 27].

El comportamiento del escalar es bastante delicado, y cabe mencionar que se tuvieron que hacer distintos trucos matemáticos para poder visualizarlo y estudiarlo, esto es otro indicio de que la condensación Bose-Einstein no es un fenómeno sencillo y su descripción y análisis requieren de gran detalle y cuidado.

Respecto al orden de la transición de fase, al analizar las derivadas del potencial se encontró que la primera derivada de (5.2) diverge entonces utilizando el criterio de Ehrenfest podemos decir que la transición es de primer orden. Esto nos permitió elegir (2.16) como la métrica para analizar el sistema, ya que se ha mostrado que esa métrica reproduce transiciones de fase de primer orden [29].

Es importante mencionar que este trabajo muestra que la GTD es un enfoque distinto a la manera usual de estudiar este tipo de sistemas y el escalar de curvatura proporciona una manera más sencilla de entender el comportamiento.

El análisis que se realizó utilizando métricas hessianas nos mostró el problema que tienen estas métricas, no podemos utilizar los resultados que nos proporcionan ya que dependen de la elección de potencial.

Después de una búsqueda exhaustiva, no se encontraron trabajos similares para poder comparar los resultados obtenidos. Sin embargo una de las metas a futuro es utilizar un hamiltoniano más completo y obtener mejores resultados para el escalar que describe al condensado.

Este trabajo muestra que las propiedades geométricas de los sistemas físicos no son abstractas y su conexión con la termodinámica tiene sentido físico.

Entonces el enfoque proporcionado por la Geometrotermodinámica nos permite geometrizar y recuperar todas las propiedades termodinámicas del sistema.

plano z con el corte a lo largo del intervalo $(1, \infty)$, donde es continua por debajo.

Otras propiedades importantes de la función polilogaritmo son [11, 25]

- **Relación con la función zeta de Riemann**

$$Li_s(z) = \begin{cases} \zeta(s) & s > 1 \\ \infty & s \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

En tres dimensiones, esta propiedad es la base para la existencia de condensación Bose-Einstein. Y también es la base para la no existencia del mismo en dimensiones menores o iguales a 2.

- **Derivada**

$$z \frac{d}{dz} Li_{s+1}(z) = Li_s(z) \quad (\text{A.4})$$

- **Suma**

$$Li_s(z) + Li_s(-z) = 2^{1-s} Li_s(z^2) \quad (\text{A.5})$$

Con $s = n = 2$ se recupera la fórmula de Euler para el dilogaritmo y con $s = n = 3$ se recupera la fórmula de Landen para el trilogaritmo.

-

$$|Li_s(z = -1)| < \infty \quad (\text{A.6})$$

ya que el polilogaritmo es analítico en $z = -1$.

Apéndice A

Algunas propiedades de las funciones polilogaritmo

A continuación presentamos un resumen de las propiedades más importantes de las funciones polilogaritmo.

Existen muchas representaciones de la función polilogaritmo, en forma integral, en serie, con formas cuadráticas, en términos de valores especiales, etc.

Una de las más conocidas es

$$Li_s(z) = \frac{z}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t - z} dt \quad (Re(s) > 0, z \notin (1, \infty)). \quad (\text{A.1})$$

La función polilogaritmo o función de Jonquiére está definida como la continuación analítica de la serie de Dirichlet[11] para cualesquiera números complejos s y z :

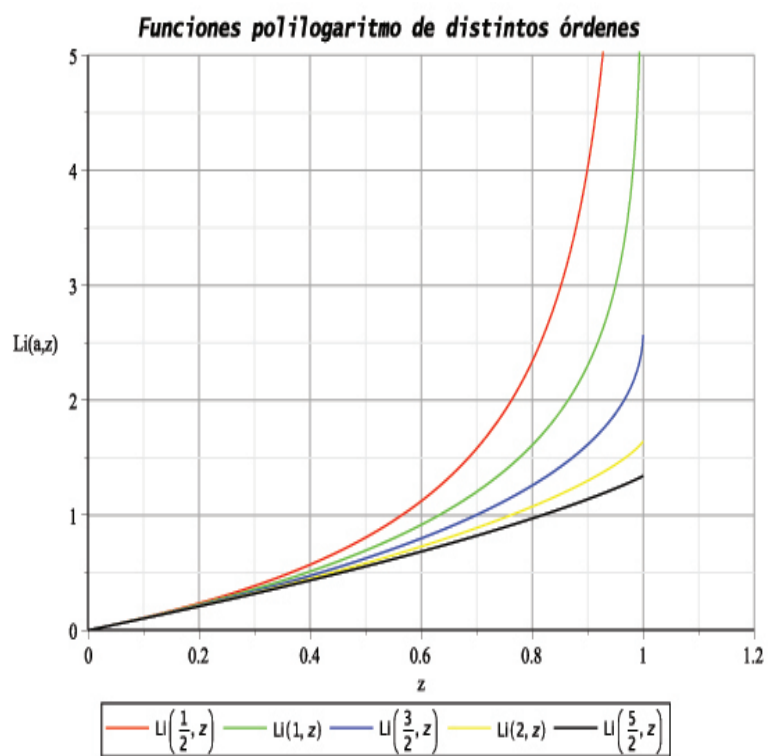
$$Li_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s} \quad (|z| < 1; z \in \mathbb{C}), \quad (\text{A.2})$$

La cual converge absolutamente para todos s y z dentro el disco unitario complejo. Varios autores se refieren a (A.2) como el polilogaritmo de orden s y argumento z .

La función polilogaritmo para un valor fijo de s no tiene polos ni singularidades esenciales en el plano z complejo (finito), y para z fijo tampoco posee singularidades esenciales ni polos en el plano s complejo (finito). La única singularidad esencial que posee está en el punto $s = \infty$.

La rama principal del polilogaritmo es la rama para la cual $Li_s(z)$ es real con $z \in \mathbb{R}$, cuando s es real y $0 \leq z \leq 1$. En la rama principal el polilogaritmo es continuo, excepto en el eje real positivo, en donde se hace un corte de $z = 1$ hasta $z = \infty$, tal que el corte traslada el eje real a la parte inferior del medio plano z , de esta manera $Li_s(z)$ es univaluado en el

Presentamos una gráfica del polilogaritmo para distintos órdenes.



(a) Comportamiento de las funciones polilogaritmo, se graficaron distintos órdenes.

Apéndice B

Estructura de la hoja de cálculo de Maple

Incluimos la estructura de la hoja de cálculo de Maple. La versión utilizada fue la 18.00. La última modificación del archivo fue realizada el 18-02-15.

Las expresiones para el tensor de curvatura de Riemann, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura son demasiado grandes, ocupando más de 200 hojas, por ese motivo no se despliegan en la hoja de cálculo.

###Programa para calcular el escalar de curvatura para un sistema en tres dimensiones de N bosones sin interacción utilizando una métrica termodinámica###

###Autora: Sasha Alexandra Zaldívar Corichi###

###Última modificación: 18-02-15 12:53pm###

###CONVENCIÓN DE UNIDADES Y DEFINICIÓN DE VARIABLES: $c=\hbar=k_B=1$, $m=2\pi$, α =factor de degeneración del espín=1, $\lambda=1/T^{(1/2)}$ longitud de onda térmica, $u=U/N$ ###

Cálculos

```

> restart;
> with(plots) :
> with(tensor) :
>
> ##N:=\frac{V}{\lambda^3} \cdot \left( \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, z\right) \right) ##Ecuación para el número de partículas##
> ##U:=\frac{3}{2} \cdot T \cdot \frac{V}{\lambda^3} \cdot \left( \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, z\right) \right) ##Expresión para U, utilizando U = \frac{3}{2}pV
##
> ##\frac{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, z\right)}{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)} := \left(\frac{Tc}{T}\right)^{\frac{3}{2}}
##Reescribimos el polilogaritmo en términos de la
temperatura crítica##
> ##U:=\frac{3}{2} \cdot \frac{N \cdot T^{\frac{5}{2}} \cdot \left( \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, z\right) \right)}{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, z\right)} #
##Expresión para U con nuestra convención de unidades y con V en
términos de N##
> ##z:=\exp\left(\frac{\mu}{T}\right)##Fugacidad##
> ##x=\frac{T}{Tc}
##Definimos una variable nueva en términos la temperatura
(T) y la temperstura crítica (Tc) de nuestro sistema##
> ##u:=\frac{3}{2} \cdot \frac{x^{\frac{5}{2}} \cdot Tc \cdot \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right)}{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)} ##Sustituimos lo anterior en U,
ahora las variables del sistema son (x , \mu)##
>
###Calculamos las derivadas, la métrica y el escalar de

```

curvatura del sistema utilizando $u=U/N$ ###

> `coord := [x, μ]: ##Definimos las coordenadas##`

> `u := $\frac{3}{2} \cdot \frac{x^{\frac{5}{2}} \cdot Tc \cdot \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, \exp\left(\frac{\mu}{x \cdot Tc}\right)\right)}{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)}$; ##Declaramos u##`

$$u := \frac{3}{2} \frac{x^{5/2} Tc \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \quad (1.1)$$

> `g_compts := array(symmetric, sparse, 1..2, 1..2);
##Creamos un arreglo vacío que llenaremos con las derivadas de u###`

`g_compts := array(symmetric, sparse, 1..2, 1..2, [])` (1.2)

> `###Procedemos a calcular las derivadas###`

> `ux := simplify(diff(u, x));`

$$ux := \frac{3}{4} \frac{\sqrt{x} \left(5 x Tc \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) - 2 \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) \mu \right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \quad (1.3)$$

> `uμ := simplify(diff(u, μ));`

$$u\mu := \frac{3}{2} \frac{x^{3/2} \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \quad (1.4)$$

> `uxμ := simplify(diff(u, x, μ));`

$$ux\mu := -\frac{3}{4} \frac{-3 x \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) Tc + 2 \text{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) \mu}{\sqrt{x} Tc \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \quad (1.5)$$

> `uxx := simplify(diff(u, x, x));`

`uxx :=`

$$\frac{3}{8} \frac{1}{x^{3/2} Tc \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \left(15 x^2 Tc^2 \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) - 12 \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) \mu x Tc \right. \\ \left. + 4 \text{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{x Tc}}\right) \mu^2 \right) \quad (1.6)$$

> `uμμ := simplify(diff(u, μ, μ));`

$$u\mu\mu := \frac{3}{2} \frac{\sqrt{x} \operatorname{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right)}{Tc \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \quad (1.7)$$

###Generamos cada componente con las derivadas, llenamos el arreglo y desplegamos g###

> g_compts[1, 1] := simplify(x·ux·uxx) :

> g_compts[1, 2] := simplify\left(\frac{1}{2} \cdot ux\mu \cdot (x \cdot ux + \mu \cdot u\mu)\right) :

> g_compts[2, 2] := simplify(\mu \cdot u\mu \cdot u\mu\mu) :

> g := create([-1, -1], eval(g_compts));

$$g := \text{table}\left(\left[\begin{array}{l} \text{index_char} = [-1, -1], \text{compts} = \left[\left[\frac{9}{32} \frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^2 Tc} \left(\left(5 x Tc \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) - 2 \operatorname{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \mu\right) \left(15 x^2 Tc^2 \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) - 12 \operatorname{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \mu x Tc + 4 \operatorname{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \mu^2\right)\right], -\frac{45}{128} \frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^2} \left(\left(-3 x \operatorname{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) Tc + 2 \operatorname{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \mu\right) x^2 \left(\sqrt{2} \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{2\mu}{xTc}}\right) - 4 \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, -e^{\frac{\mu}{xTc}}\right)\right)\right)\right], \left[-\frac{45}{128} \frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^2} \left(\left(-3 x \operatorname{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) Tc + 2 \operatorname{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \mu\right) x^2 \left(\sqrt{2} \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{2\mu}{xTc}}\right) - 4 \operatorname{polylog}\left(\frac{5}{2}, -e^{\frac{\mu}{xTc}}\right)\right)\right)\right], \frac{9}{4} \frac{\mu x^2 \operatorname{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right) \operatorname{polylog}\left(\frac{1}{2}, e^{\frac{\mu}{xTc}}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^2 Tc} \right]\right], \quad (1.8)$$


```

###Checamos que g sea un tensor###
> type(g, tensor_type);
                                     true
(1.9)
###Calculamos los símbolos de Christoffel, el tensor de curvatura
de Riemann, el tensor de Ricci y el escalar de curvatura###
[> ginv := invert(g, 'detg') :
[> D1g := d1metric(g, coord) :
[> D2g := d2metric(D1g, coord) :
[> Cf1 := Christoffel1(D1g) :
[> RMN := Riemann(ginv, D2g, Cf1) :
[> RICCI := Ricci(ginv, RMN) :
[> R := Ricciscalar(ginv, RICCI) :
###Ahora extraemos R para poder utilizarlo###
[> esc := get_compts(R) :
###Definimos un nuevo escalar haciendo dos sustituciones###
[> r1 := subs(x=1, Tc=0.5, esc) :
###Evaluamos numéricamente las sustituciones asegurando que los
resultados sean flotantes###
[> r2 := evalf(r1) :
[>

```

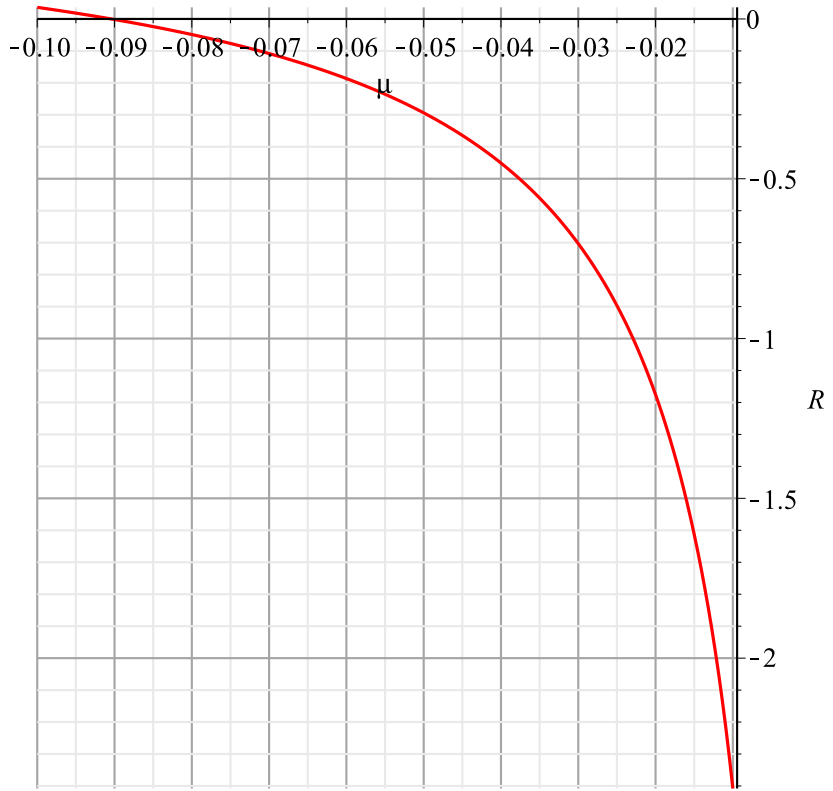
Gráficas del escalar de curvatura para valores del potencial químico cercanos a cero

```

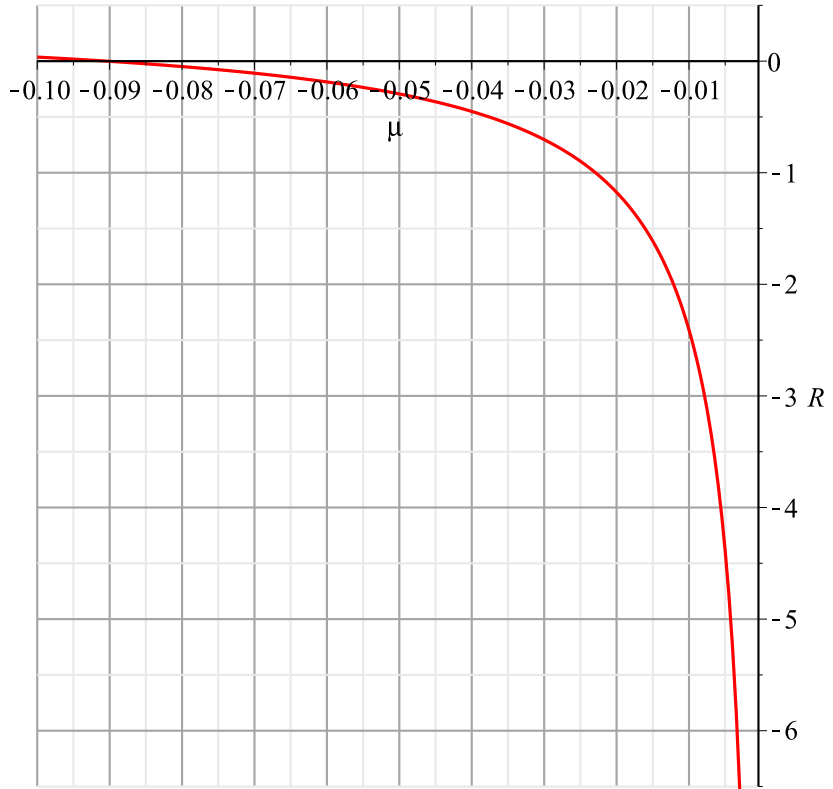
###Utilizamos una sentencia de control para graficar el escalar de
curvatura en distintos intervalos (a,b). Todos tienen a=-0.1 y b
está controlado por i. El ciclo se repite hasta que se agotan los
valores que i puede tomar. En cada ciclo se genera una gráfica de
R###
[> for i in [-0.01, -0.001, -0.0001, -0.00001, -0.000001, -0.0000001] do plot(r2, μ=-0.1 ..i,
color = red, gridlines = true, style = line, title = 'Escalar de curvatura', titlefont = ['Courier
', bold, 12], labels = ['μ', 'R']) end do

```

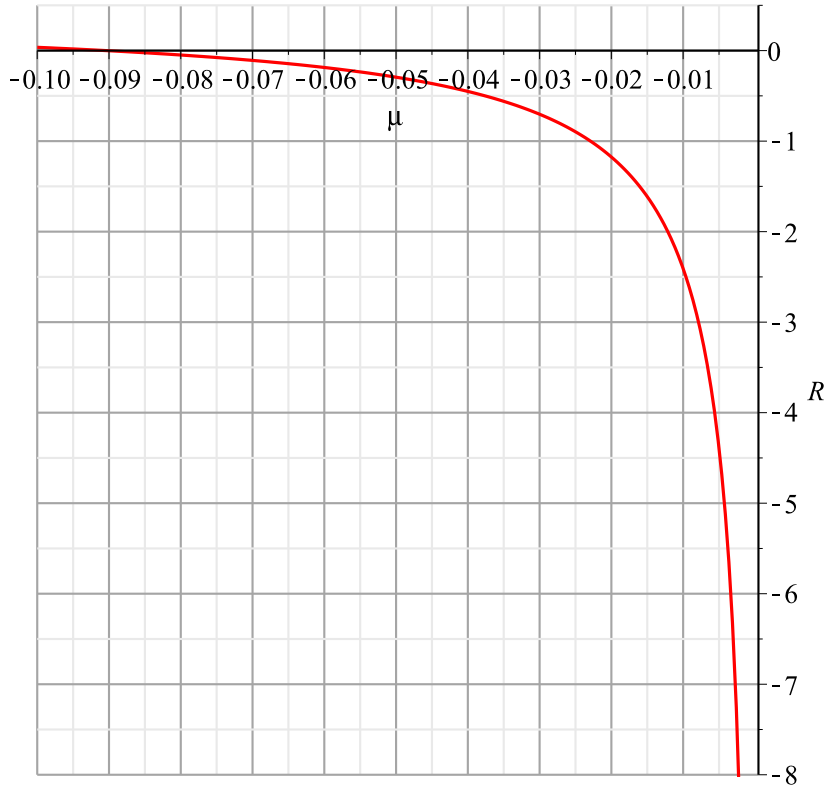
Escaġar de curvatura



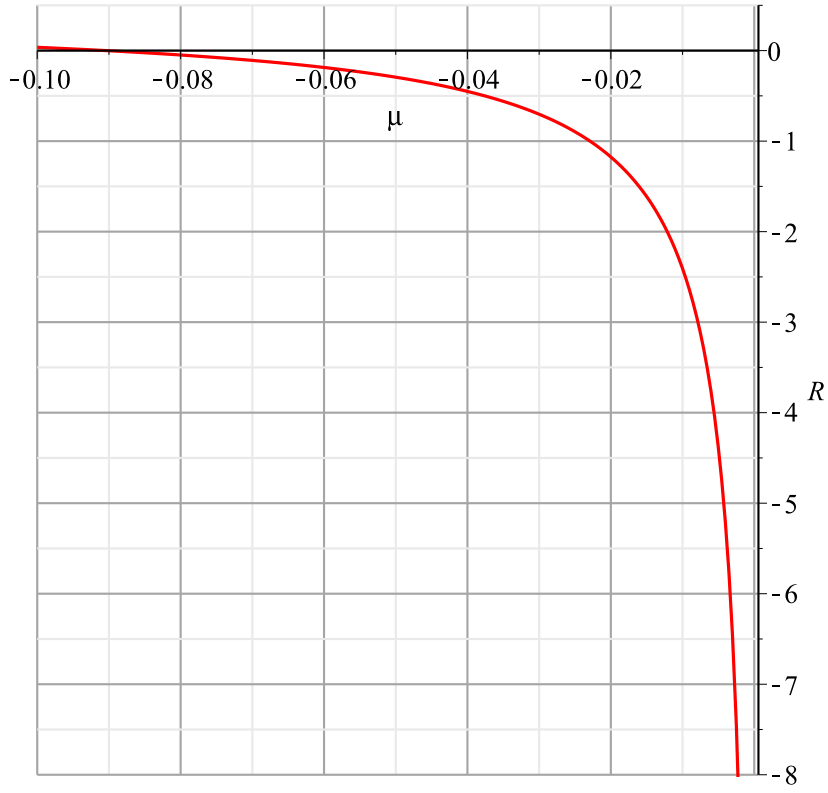
Escaīar de curvatura



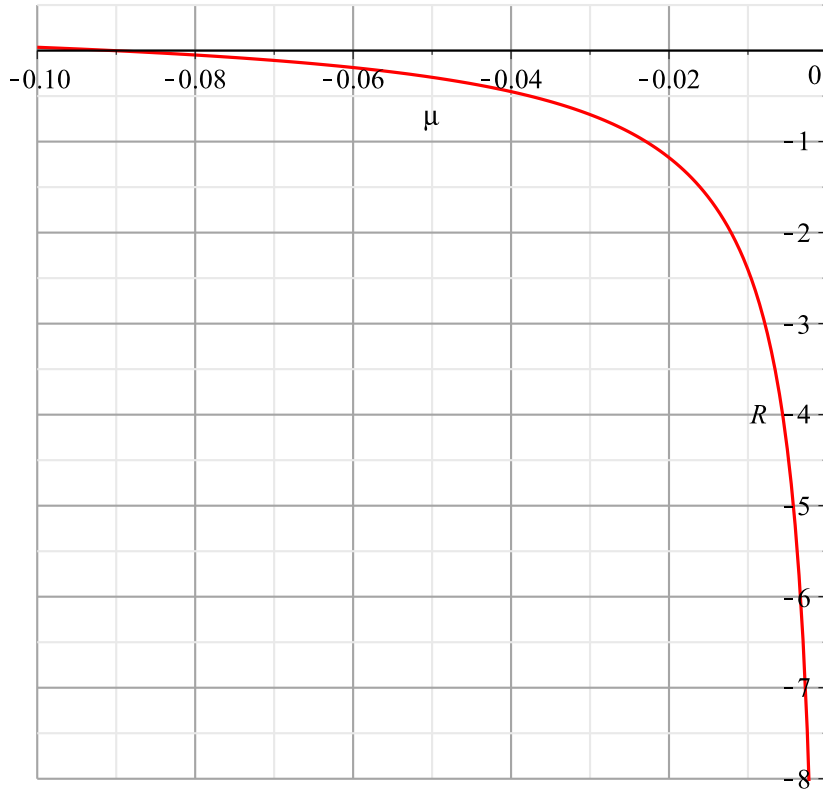
Escaġar de curvatura



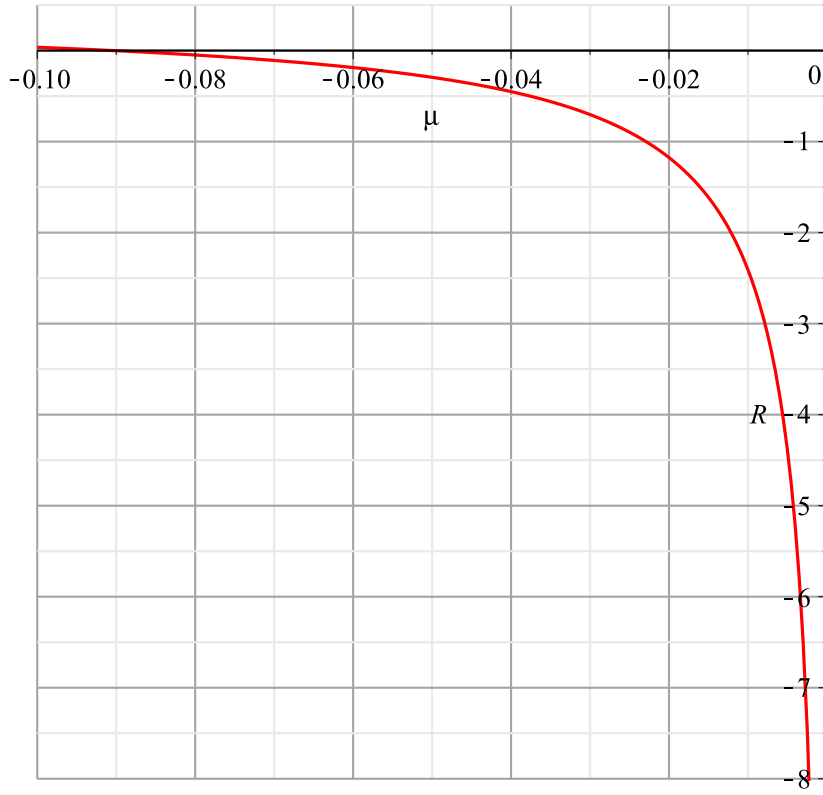
Escaīar de curvatura



Escaġar de curvatura



EscaĤar de curvatura



Bibliografía

- [1] J. L. Álvarez, H. Quevedo, and A. Sánchez, *Phys. Rev. D* **77**, 084004 (2008).
- [2] W. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press, United States of America, 2005)
- [3] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1980)
- [4] A. Aviles, A. B. Almodovar, L.Campuzano and H. Quevedo. Extending the generalized Chaplygin gas model by using geometrothermodynamics, *Phys. Rev. D* **86** (2012) 063508 [arXiv:1203.4637].
- [5] A. Bravetti, C. S. López-Monsalvo, F. Nettel and H. Quevedo, The conformal metric structure of Geometrothermodynamics, *J. Math. Phys.* **54**, 033513, (2013)
- [6] A. Bravetti, C. S. López-Monsalvo, F. Nettel, Contact Symmetries and Hamiltonian Thermodynamics, arXiv:1409.7340v2 [math-ph]
- [7] Burke L. William, *Applied Differential Geometry* (Cambridge University Press, United States of America, 1987)
- [8] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985)
- [9] C. Charatheodory, *Untersuchungen über die Grundlagen der Thermodynamik*, *Math. Ann.* **67**, 335 (1909)
- [10] E. A. Cornell and C. E. Wieman, Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas: The first 70 years and some recent experiments, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 875-893 (2002).
- [11] D. Cvijovic, New integral representations of the polylogarithm function, *Proc. R. Soc. A* **2007** 463, (doi: 10.1098/rspa.2006.1794)

- [12] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover, New York, 2003).
- [13] R A Fisher 1925 Theory of statistical estimation Proc. Camb. Phil. Soc. 122 700?25
- [14] D. García-Peláez , C. S. López-Monsalvo. Infinitesimal Legendre symmetry in the Geometrothermodynamics programme. *Journal of Mathematical Physics* 2014; 55: 083515.
- [15] J. Gibbs, *The Collected Works*, Vol. 1, Thermodynamics (Yale University Press, 1948)
- [16] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, *Thermodynamics and Statitcal Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1997)
- [17] R. Hermann, *Geometry, physics and systems* (Marcel Dekker, new York, 1973)
- [18] Yiwen Han and XiaoXiong Zeng, ?Legendre Invariance and Geometrothermodynamics Description of the 3D Charged-Dilaton Black Hole,? *Advances in High Energy Physics*, vol. 2013, Article ID 865354, 5 pages, 2013. doi:10.1155/2013/865354
- [19] K. Huang, *Introduction to Statistical Physics*, (Taylor & Francis Group, United States of America, 2010)
- [20] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987)
- [21] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, London, UK, 1908)
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, London, UK, 1908)
- [23] M. Le Bellac, F. Mortessagne, G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics* (Cambridge University Press, 2004)
- [24] L. Olivares-Quiroz and V. Romero-Rochin 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 43 205302
- [25] S. R. Mondal, A. Swaminathan (2010) Geometric properties of generalized polylogarithm, *Integral Transforms and Special Functions*, 21:9, 691-701, (DOI: 10.1080/10652461003593328)
- [26] R. Mrugala, *J. Phys. A: Math. Gen.* 38 (2005) 10905?10916
- [27] R. K. Pahlria, P. B. Beale, *Statistical Mechanics*(Elsevier, 2011)

- [28] H. Quevedo, *Geometrothermodynamics*, J. Math. Phys. **48**, 013506 (2007)
- [29] H. Quevedo and M. N. Quevedo "Fundamentals of Geometrothermodynamics in The Mathematical Beauty of Symmetry, Proceedings of the 2010 Zacatecas Workshop on Mathematical Physics II, México (Zacatecas, México, December, 2010), edited by V. V. Dvoeglazov, A. Molgado, C. Ortiz (Electronic Journal of Theoretical Physics, November 2011) pp. 1-16.
- [30] H. Quevedo and A. Ramirez, A geometric approach to the thermodynamics of the van der Waals system, (2012); arXiv:1205.3544 [math-ph].
- [31] H. Quevedo, A. Sánchez, and A. Vázquez, *Invariant geometry of the ideal gas*, arXiv:0811.0222v1[math-ph] (2008)
- [32] H. Quevedo, A. Sánchez, S. Taj, and A. Vázquez, Gen. Rel. Grav. **43** 1153 (2011).
- [33] H. Quevedo, A. Sánchez, and S. Zaldívar. *Geometrothermodynamic approach to quantum ideal gases*(2014) in preparation.
- [34] H. Quevedo and D. Tapias, arXiv:1301.0262.
- [35] C R Rao 1945 Information and the accuracy attainable in the estimation of statistical parameters Bull. Calcutta Math. Soc. **37** 81-91
- [36] C R Rao 1947 The problem of classification and distance between two populations Nature **159** 30-1
- [37] C R Rao 1954 On the use and interpretation of distance functions in statistics Bull. Inst. Int. Stat. **34** 90-7
- [38] V Romero-Rochin, *Notes on many body theory of Bose and Fermi gases at low temperatures*
- [39] G. Ruppeiner, *Thermodynamics: A Riemannian geometric model*, Phys. Rev. **A 20**, 1608 (1979)
- [40] G. Ruppeiner, *Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory*, Rev. Mod. Phys. **67**, 605 (1995); **68**, 313 (1996)
- [41] B. F. Schutz, *A First Course in General Relativity*, (Cambridge University Press, New York, 2009)
- [42] B. F. Schutz, *Geometrical Methods of Mathematical Physics*, (Cambridge University Press, Great Britain, 1982)

-
- [43] "The 2001 Nobel Prize in Physics - Popular Information". Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014. Web. 5 Mar 2015. <http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2001/popular.html>
- [44] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1972)
- [45] F. Weinhold, *Metric Geometry of Equilibrium Thermodynamics I, II, III, IV, V, J.* Chem Phys. **63**, 2479, 2484, 2488, 2496 (1975); **65**, 558 (1976)
- [46] R.M. Wald, *General Relativity*, (The University of Chicago Press, 1984)