

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS FÍSICA DE ALTAS ENERGÍAS, FÍSICA NUCLEAR, GRAVITACIÓN Y FÍSICA MATEMÁTICAS

Gases Ideales Cuánticos: Un Enfoque Geometrotermodinámico

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

PRESENTA: Sasha Alexandra Zaldívar Corichi

Tutor Principal Dr. Hernando Quevedo Cubillos Instituto De Ciencias Nucleares UNAM

Miembros Del Comité Tutor Dr. Francisco Nettel Rueda Facultad De Ciencias UNAM Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez Instituto De Física UNAM

Ciudad Universitaria, CD. MX., Febrero 2024



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS FÍSICA DE ALTAS ENERGÍAS, FÍSICA NUCLEAR, GRAVITACIÓN Y FÍSICA MATEMÁTICAS

Gases Ideales Cuánticos: Un Enfoque Geometrotermodinámico

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

PRESENTA: SASHA ALEXANDRA ZALDÍVAR CORICHI

TUTOR PRINCIPAL

DR. HERNANDO QUEVEDO CUBILLOS, INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. FRANCISCO NETTEL RUEDA, FACULTAD DE CIENCIAS UNAM

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ, INSTITUTO DE FÍSICA UNAM

MÉXICO, CIUDAD DE MÉXICO, FEBRERO 2023

Dedicatoria

"You've got a heart of gold. Don't let them take it from you." - Stockpile Thomas

A mi mamá, a mi hermano Luis Ángel, a mi papá, a Fermi, a Lolita.

Agradecimientos

Agradezco a mi familia por creer en mi. Agradezco a mi hermano Luis Ángel, sin ti, no hubiera podido terminar este trabajo, gracias por ser la persona que más admiro y por aguantarme.

Gracias papá, siempre estás ahí para nosotros haciendo todo lo posible para que salgamos adelante. A mis amigas Perla, Ale, Karo, Isel, Tanis, por siempre estar ahí. A mi Beto, por nunca abandonarme y cuidar de mi salud como el gran doctor que es. A Tredok, porqué sin él, nada es divertido. A Ale y Huicho, por brindarme su amistad y hacerme sentir como parte de la familia de Guadalajara, aguantar a mis criaturas y cuidar a mi hermano. A Sara Miau por inspirarme a seguir pintando con sus acuarelas y consejos de materiales de arte. A Jorge por todos los cafés y charlas de ciencia.

A Israel, por ser una gran persona y un amigo excepcional. A Jaber por todos los mensajes de ánimos para terminar este trabajo, consejos y risas.

Agradezco a Pedro, sin tu amistad y conocimiento estaría perdida. A Marco por estar presente sin importar la época de nuestras vidas.

A mi Atomito, por ser el amor de mi vida y haber estado junto a mi en cada una de las tesis de mi carrera académica. A mi Boris, Jeska y Porthos, gracias por hacerme sonreír y levantarme de la cama siempre.

Gracias a la familia de Mercado de Magos por aceptarme y recordarme que aparte del trabajo también hay tiempo para divertirse.

Agradezco a mi asesor, el Dr. Hernando Quevedo, por seguir creyendo en mi incluso si yo no creía en mi. Gracias por todos los consejos, apoyo y conocimiento compartido a través de los años. Gracias a mi comité tutor por toda la ayuda y apoyo.

Gracias a mis alumnos, sin ustedes, la academia, la Física y las Matemáticas carecerían de sentido.

Índice general

Dedicatoria							
Agradecimientos							
1. Introducción	3						
1.1. Transiciones de fase y estadísticas	3						
1.2. GTD	7						
1.3. Nuevos resultados obtenidos en este trabajo	10						
2. Análisis estadístico de los gases ideales cuánticos 13							
2.1. Introducción	13						
2.1.1. Caso clásico	13						
2.1.2. Caso cuántico	14						
2.1.3. Operadores de Permutación	16						
2.2. Análisis General de los gases	18						
2.3. Gas ideal de Gentile	19						
2.3.1. Cálculos	21						
2.3.2. Temperatura crítica	22						
2.3.3. Gran potencial \ldots	23						
2.4. Gas ideal de Bose-Einstein	24						
2.4.1. Temperatura crítica	28						
2.5. Gas ideal de Fermi-Dirac	29						
3. Resumen GTD	33						
3.1. Introducción	33						
3.2. Variedad diferenciable	33						

		3.2.1. Variedad Riemanniana	34		
	3.3.	Tensores	34		
		3.3.1. Tensor Métrico de Riemann	35		
	3.4.	Invariancia de Legendre	35		
	3.5.	Espacio Fase Termodinámico	37		
	3.6.	Espacio de Estados de Equilibrio	39		
	3.7.	Métrica G	40		
	3.8.	Métrica g	41		
	3.9.	Tensor de curvatura de Riemann	43		
4.	\mathbf{Apl}	icación de la GTD a los sistemas.	45		
	4.1.	Potencial $S(T, V, N(\mu))$.	45		
		4.1.1. Resultados: GTD potencial $S(T, V)$	47		
	4.2.	Gran Potencial, $\Xi(T, V, \mu)$	49		
		4.2.1. Condiciones de estabilidad	51		
		4.2.2. Sistemas de dos dimensiones	52		
		4.2.3. Escalares de Curvatura	53		
		4.2.4. Resultados GTD del Gas Ideal de Bose-Einstein y Fermi- Dirac.	. 54		
		4.2.5. Resultados GTD del Gas Ideal de Gentile	57		
5.	Con	clusiones y metas a futuro.	63		
	5.1.	Conclusiones	63		
	5.2.	Metas a futuro	64		
Α.	Art	ículo	67		
в.	B. Funciones Polilogaritmo 7				
C. Maple $S(T, V)$ 83					
D. Maple Bose-Einstein y Fermi-Dirac: métricas y escalares de curva-					
	tura. 9				
Е.	Maj	ple Gentile: métricas y escalares de curvatura.	103		
F.	F. Maple Fermi 2D: cálculos preliminares. 127				

G. Representación en serie de	
la fugacidad para un gas ideal de Gentile.	131

Capítulo 1

Introducción

1.1. Transiciones de fase y estadísticas

Comenzaremos la introducción hablando un poco de las transiciones de fase y las estadísticas para describir los gases de partículas indistinguibles. En la naturaleza existen dos tipos de partículas indistinguibles: los bosones y fermiones. Cada tipo obedece una estadística distinta. La estadística de Bose-Einstein corresponde a los bosones y la estadística de Fermi-Dirac a los fermiones. Consideremos ahora un sistema de N de éstas partículas indistinguibles como el objeto de estudio. El Hamiltoniano de dicho sistema es el siguiente: :

$$\hat{\mathscr{H}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \hat{U}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + \sum_{i=1}^{N} \hat{V}(\vec{r}_i)$$
(1.1)

El primer término es la energía cinética de las N partículas, el segundo es un potencial de interacción entre ellas y el tercero es un potencial externo o de confinamiento. Concentraremos nuestra atención en un sistema sin potencial de interacción y confinado en una caja de volumen $V = L^3$:

$$\mathbf{V} = \begin{cases} \infty & r \notin V \\ 0 & r \in V \end{cases}$$
(1.2)

Al utilizar estas consideraciones podemos simplificar (1.1) y llegar a una expresión sencilla:

$$\hat{\mathscr{H}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m}.$$
(1.3)

Observamos que la indistinguibilidad de las N partículas no se ve reflejada explícitamente en (1.3). Para hacerlo, el Hamiltoniano debe ser invariante ante cualquier intercambio de cualesquiera dos coordenadas. Lo anterior se puede expresar utilizando el conmutador de \hat{H} con un operador de permutación \hat{P} [23]:

$$\left[\hat{\mathscr{H}},\hat{P}\right] = 0 \tag{1.4}$$

Entonces aplicamos \hat{P} dos veces a la función de onda del sistema:

$$PP\Psi(r_1, r_2, ..., r_l, r_m, ..., r_N) = \lambda^2 \Psi(r_1, r_2, ..., r_m, r_l, ..., r_N)$$
(1.5)

Para que la igualdad sea válida se debe cumplir que $\lambda = \pm 1$. De este resultado se obtienen dos tipos de funciones de onda: una simétrica y otra antisimétrica. Esto nos dice que nuestro caso de estudio, un sistema de N partículas indistinguibles sin interacción confinadas en una caja de potencial de la forma (1.2), está compuesto por partículas cuya función de onda es simétrica o partículas cuya función de onda es antisimétrica:

• Bosones

~ ~

- La función de onda que caracteriza al sistema es simétrica bajo el intercambio de coordenadas y obedecen la estadística de Bose-Einstein, como habíamos mencionado en el inicio.
- Fermiones
 - La función de onda que caracteriza al sistema es antisimétrica bajo el intercambio de coordenadas y obedecen la estadística de Fermi-Dirac.

Cumplen el Principio de Exclusión de Pauli.-

Estos sistemas cuánticos son objeto de estudio en distintas áreas de investigación. En particular el gas ideal de Bose-Einstein es de gran interés debido a la condensación Bose-Einstein de la cuál hablaremos más adelante. Al ser sistemas de tanto interés podemos formular las siguientes preguntas: ¿existen sistemas de partículas indistinguibles que obedezcan una estadística intermedia? ¿cómo cambian sus propiedades termodinámicas y geométricas? ¿presentan transiciones de fase?

La respuesta a la primera pregunta es sí. Existen generalizaciones de las estadísticas de Bose-Einstein y Fermi-Dirac que se han propuesto durante los años[24].

Las transiciones de fase tienen un papel importante en la naturaleza. Ejemplos cotidianos de estos fenómenos ocurren al hervir agua o congelarla. Otros procesos más inusuales son la superconductividad o la superfluidez. Tal vez uno de los más famosos es la Condensación Bose-Einstein realizada en 1995 con el experimento de Cornell, Wieman, Anderson y sus colegas [1] quienes condensaron rubidio-87 y cuatro meses después Ketterle y su grupo en el MIT formaron un condensado de sodio-23 [13]figura 1.1. En este fenómeno una cantidad grande bosones ocupan simultáneamente el estado base del sistema. Al estudiar sistemas formados por partículas de



Figura 1.1: Distribuciones de densidad de tres nubes de átomos de rubidio. Ala izquierda se observa la distribución justo antes de la condensación. En medio se observa el momento en que se comienzan a condensar los átomos y la última imagen corresponde al momento después de la condensación. Imagen adaptada de [55].

naturaleza cuántica encontramos generalizaciones de las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein cómo lo son la estadística de Haldane-Wu [20], la estadística de Polychronakos [45] y la estadística de Gentile [16]. Nos hemos enfocado en estudiar la tercera y daremos una breve descripción de cada una.

En 1940 Gentile propuso una generalización de las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein, en esta estadística el número de ocupación máximo de cada estado cuántico depende de un parámetro que denotaremos como p. Al imponer esta condición se deriva la función de gran partición y todas las expresiones termodinámicas del sistema.

La función de distribución de un gas ideal que obedece la estadística de Gentile está dada por la siguiente expresión:

$$n_G(\varepsilon) = \frac{1}{z^{-1} \exp\left((\varepsilon/k_B T)\right) - 1} - \frac{p+1}{z^{-(p+1)} \exp\left(((p+1)\varepsilon/k_B T)\right) - 1},$$
(1.6)

donde ε es la energía del estado de una partícula, k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura, $z = \exp(\mu/k_B T)$ es la fugacidad, μ es el potencial químico y p es un parámetro que puede tomar valores en el intervalo $(1, \infty)$. En los límites $p \to 1$ y $p \to \infty$ recuperamos las estadísticas de Fermi-Dirac y Bose-Einstein respectivamente.

La geometría termodinámica del modelo de Gentile ha sido estudiada por diferentes autores. En [26] se estudia la geometría termodinámica de varias generalizaciones, entre ellas la de Gentile. En [25] se estudia un gas de bosones altamente degenerado y su geometría así como su generalización utilizando el modelo de Gentile. Los resultados que se reportan muestran un escalar de curvatura diferente de cero.

En 1991 Haldane propuso un parámetro g, llamado parámetro de estadística de exclusión definido por:

$$g = -\frac{d_{N+\Delta N} - d_N}{\Delta N},\tag{1.7}$$

donde d_N es la dimensión del espacio de estados de una partícula de un sistema de N partículas, siempre que las coordenadas de las N - 1 partículas restantes estén fijas. En 1994 Wu obtuvo la función de distribución de un gas ideal de partículas que obedecen una estadística fraccionaria utilizando la propuesta de Haldane:

$$n_H(\varepsilon) = \frac{1}{w\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)\right) + g}.$$
(1.8)

w se obtiene al resolver una ecuación trascendental, si escribimos $x = \exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{T}\right)$

entonces:

$$w(x)^{g} \left(1 + w(x)\right)^{1-g} = x.$$
(1.9)

Para g = 0 y w(x) = x - 1 recuperamos la estadística de Bose-Einstein y para g = 1 y w(x) = x recuperamos la estadística de Fermi-Dirac.

Polychronakos propuso otra generalización, en este caso la forma de la función de distribución es sencilla:

$$n_P(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + \alpha},\tag{1.10}$$

donde $\alpha = 1$ corresponde a un gas ideal de fermiones, $\alpha = -1$ corresponde a un gas ideal bosones y $\alpha = 0$ corresponde a una gas ideal de Boltzmann. En la figura 1.2 podemos observar un resumen de las estadísticas y los sistemas físicos a las que corresponden.

1.2. GTD

El estudio de sistemas termodinámicos y transiciones de fase utilizando geometría es un tema de gran interés en el ámbito científico, desde Gibbs [18] hasta Weinhold [53] y Ruppeiner [47, 48] pasando por Hermann [21] y Charatheodory [6] es imposible negar la importancia y la conexión que existe entre la geometría y la Física. Por otro lado, como mencionamos en el artículo [56], la versión final de las ecuaciones de campo gravitacionales de Einstein estaba basada en el principio de que la interacción gravitacional es igual a curvatura del espaciotiempo y ese principio fue generalizado para las cuatro interacciones conocidas en la naturaleza.

Entonces nuestro interés se enfoca en estudiar las transiciones de fase en sistemas cuánticos utilizando geometríam en particular la GTD. Cómo mencionamos en la introducción, la GTD fue propuesta en [34]. GTD consta de varios elementos, los principales son los siguientes:

- Una variedad Riemanniana a la que llamamos Espacio de Estados de Equilibrio denotada por (*ε*).
- Una métrica, g no degenerada e invariante bajo transformaciones de Lengen-

Estadísticas y sistemas físicos					
Nombre	Distribución	Sistema Físico			
Bose-Einstein	$\frac{1}{z^{-1}\exp\left(\left(\varepsilon/k_BT\right)\right) - 1}$	Condensación Bose-Einstein			
Fermi-Dirac	$\frac{1}{z^{-1}\exp\left(\left(\varepsilon/k_BT\right)\right)+1}$	Enanas blancas			
Gentile	$\frac{\frac{1}{z^{-1}\exp\left((\varepsilon/k_BT)\right) - 1}}{\frac{p+1}{z^{-(p+1)}\exp\left(((p+1)\varepsilon/k_BT)\right) - 1}}$	Sistema de bosones con número finito de partículas			
Haldane	$\frac{1}{w\left(\exp\left(\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}\right)\right)+g} \text{con}$ $g = -\frac{d_{N+\Delta N}-d_N}{\Delta N} \text{y}$ $w(x)^g \left(1+w(x)\right)^{1-g} = x$	Efecto Hall Cuánti- co fraccionario			
Polychronakos	$\frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}\right)+\alpha}$	Sistema de bosones débilmente interac- tuante			

Figura 1.2: Diferentes estadísticas y sistemas físicos.

 dre^1 ,

$$g = \sum_{\alpha,\beta} \Lambda \left(E^{\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial E^{\alpha}} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^{\alpha} \partial E^{\beta}} dE^{\alpha} \overset{s}{\otimes} dE^{\beta}, \qquad (1.11)$$

en donde Φ es el potencial termodinámico, E^{α} son variables termodinámicas de las cuáles depende el potencial, $\Lambda = 1$ en este trabajo y $a \overset{s}{\otimes} b = \frac{1}{2}(a \otimes b + b \otimes a)$.

• El tensor de curvatura de Riemann y el escalar de curvatura de Ricci, ambos nos ayudan a reconocer la *interacción termodinámica* que puedan presentar los sistemas que se estudien. Si el escalar de curvatura es diferente de cero tenemos interacción termodinámica, si es cero no hay. Esto está basado en los resultados presentados por Ruppeiner en [47], en ese artículo se llega a la conclusión de que la curvatura de una variedad que representa a un sistema abierto compuesto de un gas ideal es cero, con esto asocia la curvatura con una fuerza efectiva de interacción entre partículas, todo el razonamiento se hace de manera análoga a lo que ocurre en Relatividad General. Utilizamos con cautela el término interacción termodinámica ya que no existe una definición concreta v clara de su significado, desde nuestro punto de vista se refiere a la interacción que puedan presentar las partículas que componen nuestro sistema, en el caso de este trabajo, el Hamiltoniano de nuestro sistema está dado por (1.3), en esa expresión no está presente algún potencial de interacción entre las partículas, sin embargo en [39, 40] estudiamos cómo afecta la naturaleza cuántica de los bosones y fermiones a la interacción termodinámica y la geometría del sistema. En esos trabajos encontramos que aún al carecer de un potencial de interacción entre las partículas el escalar de curvatura era diferente de cero. Con este resultado podemos decir que en la definición exacta de interacción termodinámica aún no está completa pero nos acercamos a poder aterrizarla utilizando GTD. Finalmente la conexión entre curvatura y transiciones de fase la identificamos mediante las singularidades del escalar de curvatura. En [39] obtuvimos un resultado satisfactorio para la condensación Bose-Einstein. Encontramos que el escalar de curvatura diverge en la vecindad cercana al potencial químico $\mu = 0$, lo cuál es correcto y consistente con los reportado en la literatura [23, 28, 19].

Una revisión más detallada de la Geometrotermodinámica se encuentra en [34]. Las aplicaciones de GTD son varias y se han ampliado desde sistemas clásicos cómo

¹En esta subsección g no debe confundirse con el parámetro de la estadística de Haldane-Wu.

es el Gas de Van der Waals [52], reacciones químicas [10], modelos cosmológicos [8], Física Matemática [11], Estadística [51], entre otras.

La geometría de la información de los gases ideales y sus generalizaciones también ha sido explorada, un ejemplo lo encontramos en [36]. En este artículo se realiza un análisis numérico del escalar de curvatura para un gas ideal de Gentile. Su resultado muestra un escalar distinto a cero. En [44] también se estudia la geometría de la información de los gases ideales cuánticos y se analiza el escalar de curvatura así asociado a cada sistema.

En los trabajos mencionados se estudian los gases ideales cuánticos, sus generalizaciones y su geometría con distintos enfoques. En nuestro caso aplicaremos la GTD a esos mismos sistemas para poder dar una interpretación de la geometría de cada uno utilizando nuestras herramientas partiendo de los resultados obtenidos en [39].

1.3. Nuevos resultados obtenidos en este trabajo

En este caso analicé los sistemas utilizando el Gran Potencial, que es el potencial natural del ensamble gran canónico, sin aproximar la fugacidad. Realicé el estudio del gas ideal de Gentile que es una estadística intermedia entre el gas ideal de Bose y el de Fermi. Completé el análisis estudiando el comportamiento del escalar de curvatura en distintos límites del potencial químico, los resultados que obtuve nos dicen que la GTD describe de manera correcta la naturaleza del sistema. Utilizando el escalar de curvatura podemos estudiar de manera más sencilla el gas y también recuperamos en lo límites correspondientes el gas de Bose-Einstein y el de Fermi-Dirac, también se observa el condensado en el límite de potencial químico cerca de cero. El escalar del gas de Gentile se comporta de manera adecuada en los límites, de esta manera observamos que codifica bien la naturaleza del sistema, cuando estamos en el límite de Bose, se comporta como el escalar de Bose y lo mismo ocurre en el límite de Fermi. En la parte intermedia de la estadística observamos cómo cambia el comportamiento del escalar dependiendo el valor del parámetro p, que es lo que controla qué tan cerca o lejos está el sistema de ser un gas ideal de Bose o de Fermi. Todo lo anterior sin utilizar aproximaciones numéricas para el valor de p. Queda a futuro terminar el análisis de los gases ideales de Bose-Einstein y Fermi-Dirac en el límite semiclásico utilzando una aproximación de la serie para la fugacidad, pero con el Gran Potencial. También analizar las otras generalizaciones de las estadísticas de Bose y Fermi así como estudiar los gases ideales de Bose y Fermi en dos dimensiones.

Capítulo 2

Análisis estadístico de los gases ideales cuánticos

2.1. Introducción

Los sistemas que se estudiarán están compuestos de partículas indistinguibles, de partículas idénticas. ¿Cuál es su definición? Considerando todas sus propiedades intrínsecas, es decir, masa, carga, espín, etc., dos partículas son indénticas si esas propiedades son exactamente iguales. Esto quiere decir que ningún experimento puede distinguir una de la otra sin importar las condiciones experimentales. Por ejemplo, todos los fotones del universo son idénticos, todos los protones del universo son idénticos. Pero un electrón es diferente de un protón, aunque tienen la misma masa y espín, la carga eléctrica es distinta. Pensando en lo anterior, al tener un sistema con dos partículas idénticas e intercambiar sus papeles, no existe ningún cambio en su evolución o en sus propiedades. [7]

2.1.1. Caso clásico

En el caso clásico, no existe mayor dificultad al estudiar partículas idénticas. Cada partícula tiene una trayectoria definida, podemos seguir su evolución temporal sin ningún problema. Si consideramos un sistema de dos partículas, una la etiquetamos como 1 y la otra como 2, con sus respectivas trayectorias en al tiempo inicial t_i , $r_1(t_i)$ y $r_2(t_i)$. Sus velocidades iniciales serían $\dot{r}_1(t_i)$ y $\dot{r}_2(t_i)$. Después de su evolución temporal el estado final del sistema es $r_1(t_f)$ y $r_2(t_f)$, $\dot{r}_1(t_f)$ y $\dot{r}_2(t_f)$.



Figura 2.1: Evolución temporal del estado de un sistema de dos partículas.

Se pueden seguir las trayectorias de cada partícula del sistema punto por punto, para todos los tiempos. Debido a lo anterior, siempre es posible diferenciar a cada partícula y el Hamiltoniano del sistema es $\mathcal{H}(\mathbf{r_1}, \mathbf{p_1}; \mathbf{r_2}, \mathbf{p_2})^1$. En mecánica cuántica, esto no es posible.

2.1.2. Caso cuántico

En Mecánica Cuántica la situación es diferente, en este caso no se tienen trayectorias. Al tiempo inicial t_i , se pueden tener dos paquetes de onda diferentes para cada partícula del sistema pero durante la evolución temporal se pueden traslapar y se pierde la manera de diferenciar a cada partícula.

Se pueden detectar regiones en el espacio donde una partícula tenga momento igual a cero pero no existe manera de saber si es la 1 o la 2, en la figura 2.2 observamos un ejemplo esquemático²

 $^{{}^{1}\}mathbf{p_{1}}$ y $\mathbf{p_{2}}$ son los momentos conjugados correspondientes a cada partícula.

 $^{^{2}}$ En casos especiales en los cuales no se traslapan los paquetes de onda, las etiquetas asignadas a cada partícula son ambiguas ya que al realizar la medición de su posición no existe manera de saber cómo o cuál "camino" tomaron para llegar al estado final del sistema.



Figura 2.3: Segunda posibilidad de camino.

Para ejemplificar este problema, podemos considerar un sistema de dos niveles: dos partículas con espín 1/2 cuyas componentes en la dirección \hat{k} son $+\frac{\hbar}{2}$ para una partícula y $-\frac{\hbar}{2}$ para la otra. Utilizamos etiquetas auxiliares para poder realizar los cálculos correspondientes, sin embargo es necesario hacer énfasis en el hecho de que no estamos diferenciando una partícula de la otra. Tendremos los observables correspondientes, $\mathbf{S_1y} \mathbf{S_2}$. La base ortonormal del espacio de estados del sistema la forman vectores propios comúnes a las dos observables de espín: $|+, -\rangle$, $|-, +\rangle$, $|-, -\rangle$, $|+, +\rangle$. La descripción del sistema se puede realizar con cualquiera de los dos kets. Sin embargo también es posible,por el principio de superposición describir al sistema utilizando $\alpha |+, -\rangle + \beta |-, +\rangle$ donde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Entonces, la descripción del sistema se puede hacer con cualquiera de los kets anteriores, esto se conoce como degeneración de intercambio. La probabilidad dependerá de los coeficientes, por lo tanto no es posible especificar de manera satisfactoria el estado final del sistema. La solución es remover la degeneración. En general se pueden tener sistemas con mayor número de partículas y esta degeneración aparecerá y creará dificultades en la descripción. ³

Si tenemos más de dos partículas el espacio de estados del sistema se hace más grande, por ejemplo para tres partículas tendríamos el producto tensorial de los espacios de estado de una partícula, es decir, $\mathfrak{E} = \mathfrak{e}_1 \otimes \mathfrak{e}_2 \otimes \mathfrak{e}_3^4$. Un observable O_1 definido en \mathfrak{e}_1 constituye un conjunto completo de observables que conmutan, lo mismo para las otras partículas con sus observables O_2 y O_3 . El espectro es el mismo y utilizando sus bases se puede construir una base para el espacio \mathfrak{E} . Pero las partículas son idénticas, entonces no se pueden medir O_1 , O_2 y O_3 , recordemos que las etiquetas son auxiliares. Lo único que se puede medir es la observable Opara cada partícula, entonces aparece la degeneración de intercambio. Si obtenemos tres valores propios como resultado de la medición entonces un subespacio de \mathfrak{E} es generado por seis vectores base y en principio cualquier ket de ese subespacio puede describir al sistema. Por lo tanto una medición completa realizada a cada particular no permite que tengamos un ket único para describir al sistema[7].

2.1.3. Operadores de Permutación

Para resolver el problema completamente se utiliza el postulado de simetrización con ayuda de los operadores de permutación. Si tomamos un sistema de dos partículas con el mismo espín, no necesariamente idénticas. En \mathbf{e}_1 escogemos una base $|a_i\rangle$, como tienen el mismo espín \mathbf{e}_2 es isomorfo a \mathbf{e}_1 y lo genera la misma base. La base de \mathfrak{E} la construimos con el producto tensorial de $|a_i\rangle$ y $|a_j\rangle$, lo que resulta en { $|1:a_i; 2:a_j\rangle$ }.

³Utilizaremos la notación de [7].

 $^{{}^{4}\}mathfrak{E}$ denota el espacio de estados del sistema y \mathfrak{e}_{i} , i = 1, 2, 3 los espacios de estado de una partícula.

Nos fijamos en $i \neq j$ y obervamos que $|1:a_i; 2:a_j\rangle \neq |1:a_j; 2:a_i\rangle$, con esto se define el operador de permutación **P**₂₁ como el operador lineal cuya acción en el ket $|1:a_i; 2:a_j\rangle$ es:

$$\mathbf{P_{21}} | 1:a_i; 2:a_j \rangle = | 2:a_i; 1:a_j \rangle = | 1:a_j; 2:a_i \rangle.$$
(2.1)

En la base en la que los operadores de posición y de espín (en la dirección k) conmutan, la acción del operador de permitación \mathbf{P}_{21} en el ket $|1:\mathbf{r}, \alpha; 2:\mathbf{r}', \alpha'\rangle$ está dada por:

$$\mathbf{P_{21}} | 1: \mathbf{r}, \alpha; 2: \mathbf{r}', \alpha' \rangle = | 1: \mathbf{r}', \alpha'; 2: \mathbf{r}, \alpha \rangle.$$
(2.2)

Las propiedades del operador de permutación se siguen de su definición (2.1)

$$\mathbf{P_{21}P_{21}} = 1. \tag{2.3}$$

$$\mathbf{P_{21}}^{\dagger} = \mathbf{P_{21}}.\tag{2.4}$$

$$\mathbf{P_{21}P_{21}}^{\dagger} = \mathbf{P_{21}}^{\dagger} \mathbf{P_{21}} = 1.$$
 (2.5)

Es importante enfatizar que para un sistema de N partículas se pueden definir N! operadores de permutación, sin embargo las propiedades cambiarán para N > 2. Una discución más detallada se encuentra en [7].

De lo anterior podemos definir un estado completamente simétrico si cumple que $P_{\beta} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ y completamente antisimétrico si $P_{\beta} |\Psi\rangle = \epsilon_{\beta} |\Psi\rangle$, donde $\epsilon_{\beta} = 1, -1.5$ Ahora mencionamos el postulado de simetrización y cómo nos ayuda a eliminar el problema de la degenaración de intercambio.

El postulado nos dice que para un sistema compuesto de muchas partículas idénticas, solamente ciertos kets de su espacio de estados pueden describir los estados físicos. Los kets físicos pueden ser simétricos o antisimétricos dependiendo del tipo de partícula:

- Los kets simétricos corresponden a los bosones
- Los kets antisimétricos corresponden a los fermiones.⁶

Cada tipo de partícula está descrita por una estadística diferente:

⁵Donde $\epsilon_{\beta} = 1$ indica una permutación par y $\epsilon_{\beta} = -1$ una impar.

⁶Los fermioes también cumplen con el principio de exclusión de Pauli.

- Los bosones obedecen la estadística de Bose-Einstein.
- Los fermiones obedecen la estadística de Fermi-Dirac.

2.2. Análisis General de los gases

Siguiendo el procedimiento estándard en Mecánica Estadística estudiamos al sistema utilizando el ensamble gran canónico: El potencial termodinámico fundamental en este ensamble es el gran potencial, el cual denotaremos como $\Xi(T, V, \mu)$, se obtiene de la siguiente manera⁷

$$\Xi(T, V, \mu) = -k_B T ln \left\{ Tr \left[\exp^{[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu \hat{\mathbf{N}})]} \right] \right\}$$

$$= \left\langle \hat{\mathscr{H}} \right\rangle - TS - \mu \left\langle \hat{\mathbf{N}} \right\rangle$$
(2.6)

Todas las cantidades termodinámicas se calculan a partir del gran potencial mediante las siguientes relaciones.[19, 23, 30]

$$S = -\left(\frac{\partial \Xi}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

$$P = -\left(\frac{\partial \Xi}{\partial V}\right)_{T,\mu}$$

$$N = -\left(\frac{\partial \Xi}{\partial \mu}\right)_{T,V}.$$
(2.7)

⁷El promedio de las cantidades físicas
s calcula como $\left<\hat{O}\right>=Tr(\hat{\rho}\hat{O}).$

Recordando que:

$$\left\langle \hat{\mathbf{N}} \right\rangle = \frac{Tr\left(\exp\left[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})\right]\hat{\mathbf{N}}\right)}{Tr\left\{\exp\left[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})\right]\right\}} = k_B T \frac{\partial}{\partial\mu} \left(\ln \mathscr{Z}\right)$$
(2.8)
$$\left\langle \hat{\mathscr{H}} \right\rangle = \frac{Tr\left(\exp\left[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})\right]\hat{\mathscr{H}}\right)}{Tr\left\{\exp\left[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu\hat{\mathbf{N}})\right]\right\}} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \left(\ln \mathscr{Z}\right).$$

El gran potencial está dado por

$$\Xi(T, V, \mu) = -k_B T \ln(\mathscr{Z}) = -k_B T \sum_k \ln(1 - \beta(\varepsilon - \mu)), \qquad (2.9)$$

dónde el índice k hace referencia al estado k de una partícula.

2.3. Gas ideal de Gentile

La función de gran partición está dada por:

$$\mathscr{Z} = \sum_{\{n_k=0\}} g\{n_k\} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right].$$
(2.10)

En el caso de gases ideales cuánticos $g\{n_k\} = 1$, con esto se simplifica la suma sobre los n_k en (2.10):

$$\mathscr{Z} = \sum_{\{n_k=0\}} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k (\varepsilon_k - \mu)\right]$$
(2.11)
$$= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^p \exp\left\{-\beta \left[n_1 (\varepsilon_1 - \mu) + n_2 (\varepsilon_2 - \mu) + n_3 (\varepsilon_3 - \mu) + \dots\right]\right\}$$
$$= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^p \exp\left\{-\beta \left[n_1 (\varepsilon_1 - \mu)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_2 (\varepsilon_2 - \mu)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_3 (\varepsilon_3 - \mu)\right]\right\} \dots$$
$$= \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k=0}^p \left\{\exp\left[-\beta (\varepsilon_k - \mu)\right]\right\}^{n_k}.$$

Calculando la suma parcial se tiene que:

$$\sum_{n=0}^{s} x^{n} = \frac{x^{n+1} - 1}{x - 1},$$
(2.12)

donde $x = \exp \left[-\beta \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right]$. Entonces llegamos a:

$$\prod_{k=1}^{\infty} \frac{\left[\exp\left(-\beta\left(\varepsilon_{k}-\mu\right)\right)\right]^{p+1}-1}{\exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{k}-\mu\right)\right]-1}.$$
(2.13)

Finalmente con $z = \exp(\beta \mu)$ la función de gran partición del gas ideal de Gentile queda cómo:

$$\mathscr{Z} = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{\left(z \exp(-\beta \varepsilon_k)\right)^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta \varepsilon_k) - 1}.$$
(2.14)

Con lo anterior calculamos el gran potencial, Ξ :

$$\Xi = -k_B T \ln \mathscr{Z}$$

$$= -k_B T \ln \left[\prod_{k=1}^{\infty} \frac{(z \exp(-\beta\varepsilon_k))^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta\varepsilon_k) - 1} \right]$$

$$= -k_B T \ln \left[\left(\frac{(z \exp(-\beta\varepsilon_1))^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta\varepsilon_1) - 1} \right) \left(\frac{(z \exp(-\beta\varepsilon_2))^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta\varepsilon_2) - 1} \right) \left(\frac{(z \exp(-\beta\varepsilon_3))^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta\varepsilon_3) - 1} \right) \dots \right]$$

$$= -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln \left[\left(\frac{(z \exp(-\beta\varepsilon_k))^{p+1} - 1}{z \exp(-\beta\varepsilon_k) - 1} \right) \right].$$
(2.15)

De dónde:

$$\Xi = -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \left[\ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k)^{p+1} - 1 \right) - \ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k) - 1 \right) \right].$$
(2.16)

2.3.1. Cálculos

Utilizando (2.16) calculamos el número de partículas: $N = -\left(\frac{\partial \Xi}{\partial \mu}\right)_{T,V}$:

$$N = \frac{\partial}{\partial \mu} \left[-k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \left[\ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k)^{p+1} - 1 \right) - \ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k) - 1 \right) \right] \right].$$
(2.17)

Calculamos la derivada:

$$N = k_B T \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(p+1)\beta(\exp(\beta\mu)\exp(-\beta\varepsilon_k))^{p+1}}{(\exp(\beta\mu)\exp(-\beta\varepsilon_k))^{p+1} - 1} - \frac{\beta(\exp(\beta\mu)\exp(-\beta\varepsilon_k))}{(\exp(\beta\mu)\exp(-\beta\varepsilon_k)) - 1} \right\}.$$
(2.18)

Simplificando llegamos a:

$$N = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1} - \frac{(p+1)}{(z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k))^{p+1} - 1},$$
 (2.19)

De (2.19) obtenemos la distribución de probabilidad de Gentile:

$$G = \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1} - \frac{(p+1)}{(z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k))^{p+1} - 1}$$
(2.20)

En el límite de volúmen muy grande reemplazamos la suma discreta por una integral con ayuda de la densidad de estados en una caja de volumen V:

$$D(\varepsilon) = \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{3/2}, \qquad (2.21)$$

dónde g = 2s + 1 es la degeneración debida al espín, entonces

$$\Xi = -k_B T \int d\varepsilon D(\varepsilon) \left[\ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k)^{p+1} - 1 \right) - \ln \left(z \exp(-\beta \varepsilon_k) - 1 \right) \right]$$
(2.22)

El número de partículas y la energía interna se obtienen a partir de las siguientes

expresiones:

$$N = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \left(\frac{1}{z^{-1} e^{(\varepsilon/k_B T)} - 1} - \frac{p+1}{z^{-(p+1)} e^{((p+1)\varepsilon/k_B T)} - 1} \right)$$
(2.23)
$$U = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon \left(\frac{1}{z^{-1} e^{(\varepsilon/k_B T)} - 1} - \frac{p+1}{z^{-(p+1)} e^{((p+1)\varepsilon/k_B T)} - 1} \right).$$

Seguimos el procedimiento estándar para calcular el número de partículas y la energía interna en el ensamble gran canónico. Con un cambio de variable $x = \beta \varepsilon$ reescribimos todas las integrales:

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} \int_0^\infty \frac{(p+1)x^{\frac{1}{2}}dx}{z^{-(p+1)}e^{(p+1)x} - 1} + \frac{z}{1-z} - \frac{(p+1)}{(z^{-1})^{p+1} - 1},$$
 (2.24)

en dónde agregamos la contribución del estado base.

$$U = \frac{V}{\lambda_T^3} \int_0^\infty \frac{(p+1)x^{\frac{3}{2}}dx}{z^{-(p+1)}e^{(p+1)x} - 1}.$$
 (2.25)

Utilizando una generalización de las funciones polilogaritmo apéndice B llegamos a:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} P_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z} - \frac{(p+1)}{(z^{-1})^{p+1} - 1}.$$
(2.26)

Y para U se tiene que:

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} P_{5/2}(z), \qquad (2.27)$$

dónde

$$P_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{z^k}{k^n} - \frac{1}{(p+1)^{n-1}} \frac{(z^{p+1})^k}{k^n} \right).$$
(2.28)

2.3.2. Temperatura crítica

Nos concentramos en (G.1) y podemos escribirla como $N = N_{\varepsilon} + N_0$, dónde N_{ε} es el número de partículas en estados excitados y N_0 el número de partículas en el estado base.

Observamos que en el límite termodinámico y para T alta los términos asociados al estado base no contribuyen y todas las partículas se encuentran en estados excitados. Con esto calculamos el número máximo de partículas que ocupan estados excitados, N_{max} , para cierta temperatura T_c . Lo anterior sucede cuándo $P_{3/2}(z)$ alcanza su valor máximo, esto es en z = 1:

$$N_{max} = \frac{gV}{\lambda_{T_c}^3} P_{3/2}(1), \qquad (2.29)$$

dónde $\lambda_{T_c} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2}$ Despejamos de (2.29) T_c y llegamos a:

$$T_{c} = \frac{2\pi\hbar^{2}}{mk_{B}} \left[\frac{N}{gVP_{3/2}(1)} \right],$$
(2.30)

dónde $P_{3/2}(1) = \zeta(3/2) - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \zeta(3/2)^8$. En el límite $p \to \infty$ recuperamos la temperatura crítica correspondiente a un gas ideal de Bose-Einstein, dado que el término $\frac{1}{(p+1)^{1/2}} \zeta(3/2)$ tiende a cero en este límite. Esto nos indica que (2.30) expresa de manera correcta la temperatura del sistema y en el límite adecuado obtenemos el caso exacto.

2.3.3. Gran potencial

Durante los estudios anteriores se ha utilizado la energía libre de Helmholtz y la energía interna [40] cómo potencial termodinámico para estudiar a los gases ideales cuánticos. En este caso utilizaremos el gran potencial, esto se debe a que es el potencial natural del ensamble gran canónico. Partiendo de la ecuación (2.22), integramos por partes y realizamos un cambio de variable para llegar al siguiente resultado⁹:

$$\Xi(T,\mu) = -\frac{k_B T V}{\lambda_T^3} \left(Li_{5/2}(z) - \frac{1}{(p+1)^{3/2}} Li_{5/2}(z^{p+1}) \right) - k_B T \ln\left(1 - z^{p+1}\right) + k_B T \ln\left(1 - z\right)$$
(2.31)

En (2.31) observamos la contribución explícita del estado base, lo cuál nos ofre-

⁸Para ahorrar notación $N_{max} = N$.

 $^{{}^{9}}Li_{n}(z)$ son las funciones polilogaritmo de orden n.

ce una ventaja al estudiar el gas ideal de Gentile en el límite de Bose-Eistein. Es necesario tomar en cuenta el estado $\varepsilon = 0$ debido a la condensación Bose-Einstein, utilizando la energía interna esa contribución desaparece pero con el gran potencial esto no ocurre.

2.4. Gas ideal de Bose-Einstein

Calculamos nuevamente la función de gran partición. El procedimiento es similar al realizado en la sección anterior. Tenemos entonces:

$$\mathscr{Z} = \sum_{\{n_k=0\}} g\{n_k\} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right].$$
(2.32)

Nuevamente $g\{n_k\} = 1$. Entonces:

$$\mathscr{Z} = \sum_{\{n_k=0\}} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k (\varepsilon_k - \mu)\right]$$
(2.33)
$$= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^{\infty} \exp\left\{-\beta \left[n_1 (\varepsilon_1 - \mu) + n_2 (\varepsilon_2 - \mu) + n_3 (\varepsilon_3 - \mu) + \dots\right]\right\}$$
$$= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^{\infty} \exp\left\{-\beta \left[n_1 (\varepsilon_1 - \mu)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_2 (\varepsilon_2 - \mu)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_3 (\varepsilon_3 - \mu)\right]\right\} \dots$$
$$= \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k=0}^{\infty} \left\{\exp\left[-\beta (\varepsilon_k - \mu)\right]\right\}^{n_k}.$$

En este caso debemos calcular una suma geométrica:

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x},\tag{2.34}$$

donde $x = \exp\left[-\beta \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right]$.

Y con $z = \exp(\beta \mu)$ la función de gran partición del gas ideal de Bose-Einstein queda cómo:

$$\mathscr{Z} = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - z \exp(-\beta \varepsilon_k)}.$$
(2.35)

Con lo anterior encontramos el gran potencial:

$$\Xi = -k_B T \ln \mathscr{Z}$$

$$= -k_B T \ln \left[\prod_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_k)} \right]$$

$$= -k_B T \ln \left[\left(\frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_1)} \right) \left(\frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_2)} \right) \left(\frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_3)} \right) \dots \right]$$

$$= -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln \left[\frac{1}{1 - z \exp(-\beta\varepsilon_k)} \right].$$
(2.36)

Obtenemos:

$$\Xi = -k_B T \left[\ln\left(1\right) - \sum_{k=0}^{\infty} \ln\left[1 - z \exp(-\beta \varepsilon_k)\right] \right]$$

$$= k_B T \sum_{k=0}^{\infty} \ln\left[1 - z \exp(-\beta \varepsilon_k)\right]$$
(2.37)

Vamos a calcular el número de partículas recordando (2.8):

$$N = \left\langle \hat{\mathbf{N}} \right\rangle = \frac{Tr\left(\exp[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu \hat{\mathbf{N}})]\hat{\mathbf{N}}\right)}{Tr\left\{\exp[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu \hat{\mathbf{N}})]\right\}}.$$
(2.38)

y la energía interna está dada por

$$U = \left\langle \hat{\mathscr{H}} \right\rangle = \frac{Tr\left(\exp[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu \hat{\mathbf{N}})]\hat{\mathscr{H}}\right)}{Tr\left\{\exp[-\beta(\hat{\mathscr{H}} - \mu \hat{\mathbf{N}})]\right\}}.$$
(2.39)

De lo anterior se sigue que:

$$N = \sum_{k} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1}$$

$$U = \sum_{k} \frac{\varepsilon_k}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1}.$$
(2.40)

Con esto podemos ver una propiedad importante del potencial químico y la energía del estado k-ésimo, se debe cumplir que $\exp(\beta \varepsilon_k - \mu) > 1$, eso nos dice que el potencial químico de los bosones debe ser menor a la energía ε_k , $\forall k$. Entonces, si tomamos el nivel de energía más bajo, es decir, $\varepsilon = 0$, el potencial químico debe ser menor que cero, por lo tanto, concluimos que los bosones sienten un potencial atractivo y agregar más bosones al sistema no tiene un costo energético. Lo anterior en términos de la fugacidad se puede expresar como $0 \le z \le 1$. Entonces la fugacidad está acotada entre cero y uno. En el caso de los fermiones veremos más adelante que esto no es así.

Nos fijamos en (2.40) y reconocemos la distribución de probabilidad de Bose-Einstein:

$$n_{BE} = \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1}.$$
(2.41)

Seguimos el mismo procedimiento de la sección aterior para obtener las cantidades termodinámicas en el límite de volúmen muy grande utilizando (2.21):

$$\Xi_{BE} = k_B T \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ln \left[1 - z \exp(-\beta \varepsilon_k)\right].$$
(2.42)

Ahora utilizando (2.23), (2.40) y (2.41) podemos calcular las cantidades termodinámicas en el límite de volúmen muy grande. Las expresiones son similares a lo realizado en la sección anterior:

$$N = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \left(\frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1} \right)$$

$$U = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon \left(\frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) - 1} \right).$$
(2.43)

Con un cambio de variable $x = \beta \varepsilon$ se reescriben las integrales:

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{z^{-1} e^x - 1} + \frac{z}{1 - z},$$
(2.44)

Nuevamente debemos agregar la contribución del estado base. Ese término siempre juega un papel importante en el análisis del gase ideal de Bose y como vimos en la sección anterior, también en el gas ideal de Gentile. La energía interna es similar:

$$U = \frac{V}{\lambda_T^3} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{3}{2}} dx}{z^{-1} e^x - 1}.$$
 (2.45)

Reconociendo nuevamente las funciones polilogaritmo obtenemos:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} Li_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z}$$
(2.46)

Y para U se tiene que:

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} Li_{5/2}(z), \qquad (2.47)$$

Para aplicar la GTD estos gases, utilizaremos el gran potencial, como mencionamos, es el potencial natural del ensamble gran canónico. En estudios anteriores [39] se ha utilizado la energía interna por número de partículas para poder hacer el análisis, esto no representa problema debido a que de las propiedades de la GTD y de la Termodinámica los resultados no dependen del potencial termodinámico utilizado.

El procedimiento para obtener el gran potencial para el gas de Bose-Einstein es similar al realizado para el gas ideal de Gentile. En este caso el gran potencial es:

$$\Xi(T,\mu) = -\frac{k_B T V}{\lambda_T^3} L i_{5/2}(z) + k_B T \ln(1-z). \qquad (2.48)$$

Nuevamente agregamos el término que corresponde al estado base.
2.4.1. Temperatura crítica

Utilizando (2.46) podemos analizar las propiedades termodinámicas del este gas. Reescribimos la ecuación como:

$$N = N_{\varepsilon} + N_0$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{N_{\varepsilon}}{N} + \frac{N_0}{N}$$
(2.49)

Recordando la sección anterior, en (2.49) tenemos el número de partículas en estado excitados y el número de partículas en el estado base. El comportamiento de las funciones polilogaritmo para diferentes valores de su argumento nos proporciona características físicas de nuestro sistema. En el límite $z \rightarrow 1$, que corresponde a $\mu = 0$, las funciones $Li_n(z)$ toman la forma de la función Zeta de Riemann, para n > 1:

$$\lim_{z \to 1} Li_n(z) = \zeta(n). \tag{2.50}$$

En cambio para valores $n \leq 1$:

$$\lim_{z \to 1} Li_n(z) \to \infty.$$
(2.51)

La función $Li_{3/2}(z)$ está acotada entre dos valores: $0 \leq Li_{3/2}(z) \leq \zeta(3/2)$, en donde $\zeta(3/2) \approx 2.612$. Si fijamos la temperatura y el volumen, las partículas en estados excitados tienen un valor máximo dado por:

$$N_{\varepsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda_T^3} \zeta(3/2). \tag{2.52}$$

Si nos fijamos ahora en el límite termodinámico de (2.49) tendremos dos casos: $z \to 1$ y $z \neq 1$. Para el caso de fugacidad distinta de uno, el término que corresponde a las partículas en el estado base tiene a cero, es decir, $\frac{N_0}{N}$ es finito, donde $N_0 = \frac{z}{1-z}$. Por lo tanto el número de partículas en el estado base es despreciable, entonces todos los bosones ocupan estados excitados. Pero si la fugacidad tiende a uno, el número de bosones en estado excitados alcanza su máximo valor (2.52) y $\frac{N_0}{N}$ diverge, pero podemos obetenr una expresión para N_0 utilizando (2.49):

$$N_0 = N - N_{\varepsilon}^{max} \tag{2.53}$$

Esta ecuación es un exceso de partículas, es decir, los estados excitados ya no pueden contener a todos los bosones, entonces se hace favorable que el estado base se llene con este exceso. Las partículas se condensan al estado base. El fenómeno anterior se conoce como Condensación de Bose-Einstein. Si fjamos la densidad de partículas como función de la temperatura podemos obtener la temperatura a la cual ocurre la condensación, es decir, una temperatura crítica T_c . Por debajo de ella ocurre la condensación. Entonces partiendo de (2.52) tenemos ¹⁰:

$$\frac{N}{V} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_{T_c}^3}$$

$$\Rightarrow T_c = \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B \left(\zeta(3/2)\right)^{2/3}}\right)$$
(2.54)

2.5. Gas ideal de Fermi-Dirac

Para este sistema de fermiones ideales, calculamos la función de gran particón, el procedimiento es similar a las dos secciones anteriores:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_k=0\}} g\{n_k\} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right].$$
(2.55)

¹⁰Nuevamente por notación tomaremos $N = N_{\varepsilon}^{max}$.

Luego usando que $g\left\{ n_{k}\right\} =1$ tenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{n_k=0\}} \exp\left[-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right] \end{aligned} (2.56) \\ &= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^{1} \exp\left\{-\beta \left[n_1 \left(\varepsilon_1 - \mu\right) + n_2 \left(\varepsilon_2 - \mu\right) + n_3 \left(\varepsilon_3 - \mu\right) + \dots\right]\right\} \\ &= \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots}^{1} \exp\left\{-\beta \left[n_1 \left(\varepsilon_1 - \mu\right)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_2 \left(\varepsilon_2 - \mu\right)\right]\right\} \exp\left\{-\beta \left[n_3 \left(\varepsilon_3 - \mu\right)\right]\right\} \dots \\ &= \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k=0}^{1} \left\{\exp\left[-\beta \left(\varepsilon_k - \mu\right)\right]\right\}^{n_k} \\ &= \prod_{k=1}^{\infty} \left\{1 + z \exp\left[-\beta \varepsilon_k\right]\right\}. \end{aligned}$$

En (2.56) la suma va desde cero a uno debido al Principio de Exclusión de Pauli que nos dice que dos electrones no pueden ocupar el mismo estado cuántico, por ejemplo dos fermiones en un átomo no pueden tener el mismo conjunto de número cuánticos. Entonces el gran potencial está dado por:

$$\Xi = -k_B T \ln \mathcal{Z}$$

$$= -k_B T \ln \left\{ \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + z \exp\left[-\beta \varepsilon_k\right] \right) \right\}.$$
(2.57)

Obtenemos:

$$\Xi = -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln\left(1 + z \exp\left[-\beta \varepsilon_k\right]\right).$$
(2.58)

Finalmente nos fijamos en el límite de volumen muy grande. De igual manera que en las secciones anteriores reemplazamos la suma discreta por una integral con la ayuda de la densidad de estados (2.21):

$$\Xi_{FD} = -k_B T \int d\varepsilon D(\varepsilon) ln \left(1 + z \exp\left[-\beta \varepsilon_k\right]\right).$$
(2.59)

Usando un cambio de variable $x = \beta \varepsilon$ se reescribe la integral y se integra por partes, finalmente llegando a:

$$\Xi(T,\mu) = -\frac{k_B T V}{\lambda_T^3} Li_{5/2}(-z).$$
(2.60)

Finalmente para la energía interna y el número de partículas las obtenemos de la misma manera que en los dos gases anteriores, entonces:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} Li_{3/2}(-z).$$
(2.61)

Y para U se tiene que:

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} L i_{5/2}(-z).$$
 (2.62)

Capítulo 3

Resumen GTD

3.1. Introducción

El formalismo que utilizaremos para analizar los sistemas descritos en el capítulo anterior es la Geometrotermodinámica, GTD para abreviar. Este formalismo fue propuesto por el Dr. Hernando Quevedo Cubllios en su artículo Geometrothermodynamics publicado en el 2007 [34]. Desde entonces la GTD ha sido utilizada en el estudio de diferentes sistemas físicos, desde agujeros negros, sistemas clásicos como el gas de Van der Waals, reacciones químicas hasta sistemas cuánticos como los gases ideales cuánticos [10, 40, 51, 52].

Para comenzar la revisión de la GTD, recordemos los conceptos clave estudiados en los libros de Geometría Diferencial y en los cursos de Cálculo Tensorial.

3.2. Variedad diferenciable

Una variedad diferenciable es un espacio métrico localmente homeomorfo a \mathbb{R}^n [37]. Ejemplos de variedades son la esfera, un toro, una botella de Klein, una variedad en tres dimensiones. En la figura figura 3.1 podemos observar como se ven estos ejemplos. Es importante mencionar que las definiciones formales y un tratado extensivo de estos conceptos se encuentran en [37, 50, 49].



Figura 3.1: *Ejemplos de variedades: observamos un toro, una esfera y una variedad en tres dimensiones.*

3.2.1. Variedad Riemanniana

Una variedad Riemanniana es una pareja (M, g) en donde, M es una variedad diferenciable y g es una métrica Riemanniana.

3.3. Tensores

De acuerdo con la Geometría Diferencial la definición de tensor es la siguiente: Un tensor del tipo $\binom{M}{N}$ es un mapeo multilineal a los reales que se escribe como:

$$T: \underbrace{V \times V \cdots \times V}_{N \, veces} \times \underbrace{V^{\star} \times \cdots \times V^{\star}}_{M \, veces} \to \mathbb{R}, \tag{3.1}$$

donde V es un espacio vectorial y V^* es su espacio dual. Otra manera de definirlo, más intuitivamente, es como un objeto geométrico que es invariante bajo cambios de coordenadas. Las componentes del tensor cambian de una manera específica bajo esos cambios de coordenadas. Un ejemplo de un tensor tipo $\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$ es un vector, cuyo argumento será un vector dual. Otro tipo de tensor, que será muy importante más adelante es el tipo $\begin{pmatrix} 0\\2 \end{pmatrix}$. Ejemplos de este tipo de tensores son los tensores métricos de los que hablaremos más adelante. Las componentes en una base de uno en concreto son [50]:

$$\eta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(3.2)

3.3.1. Tensor Métrico de Riemann

El tensor métrico es un tensor tipo $\binom{0}{2}$, también llamado de orden dos. Toma dos elementos del espacio vectorial. En particular si tomamos un punto en la variedad M y consideramos el plano tangente a ese punto p, al que llamaremos T_pM y dos vectores tangentes a p que llamaremos X y Y, el tensor métrico Riemanniano cumple las siguientes propiedades importantes:

- 1. Es **positivo definido**. Para todo $X \in T_pM$ se cumple que: $g(X, X) \ge 0$
- 2. Es **no degenerado**. Si Para todo $X \in T_pM$ se cumple que: g(X,Y) = 0entonces Y = 0.
- 3. Es **simétrico**. Para todo $X, Y \in T_pM$ se cumple que: g(X, Y) = g(Y, X).

Ahora veamos concretamente a la Geometrotermodinámica.

3.4. Invariancia de Legendre

Uno de los elementos más importantes de la GTD es la **Invariancia de Legen**dre. En Termodinámica hablamos de las transformaciones de Legendre, [4] es una texto con un estudio detallado de esto. Estas transformaciones nos ayudan a estudiar diferentes sistemas termodinámicos utilizando diferentes potenciales, dependiendo de las variables termodinámicas que sean relevantes al problema. Considerando la representación de la energía interna, U(S, V, N), donde S es la entropía, V el volumen y N el número de partículas, se obtienen diferentes potenciales a través de las transformaciones de Legendre. En este caso se tienen la energía libre de Helmholtz, la energía libre de Gibbs, el Gran Potencial y la Entalpía. La descripción del sistema físico y sus propiedades no dependen de la elección del potencial, es decir, el resultado es invariante bajo transformaciones de Legendre. Lo anterior lo podemos traducir a un lenguaje geométrico a través de un cambio de coordenadas¹ [2] :

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

$$(3.3)$$

tales que:

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l$$

$$E^i = -\tilde{I}^i$$

$$E^j = \tilde{E}^j$$

$$I^i = \tilde{E}^i$$

$$I^j = \tilde{I}^j.$$
(3.4)

Si tomamos un conjunto de índices, $\{1, ..., n\}$ y hacemos una partición en dos subconjuntos disjuntos tales que $I \bigcup J$, tenemos que $i \in I$ y $j \in J$, k, l = 1, ...I y se cumple lo siguiente:

- Si $I = \emptyset$ las transformaciones de Legendre son las transformación identidad.
- Si $J \neq \emptyset$ se obtienen transformaciones parciales de Legendre.
- Si $J = \emptyset$ con $I = \{1, ..., n\}$, se obtiene una transformación total de Legendre.

Más adelante identificaremos a Φ como el potencial termodinámico, E^{α} como las variables termodinámicas extensivas y I^{α} como las variables termodinámicas intensivas siempre y cuando el potencial sea (U, S, V). Por el momento supongamos que tenemos las siguientes coordenadas (U, S, V, T, -P) y aplicamos (3.4), obtendríamos

¹Utilizamos la convención de Einstein para índices repetidos

 $^{2}:$

$$\tilde{U}_1 = \mathbf{U} - \mathbf{TS}, \ S = -\tilde{T}, \ T = \tilde{S}, \ V = \tilde{V}, \ P = \tilde{P}$$

$$(3.5)$$

$$\tilde{U}_2 = \mathbf{U} + \mathbf{PV}, \ S = \tilde{S}, \ T = \tilde{T}, \ V = \tilde{P}, \ -P = \tilde{V}$$

$$(3.6)$$

$$\widetilde{U}_3 = \mathbf{U} - \mathbf{TS} + \mathbf{PV}, \ S = -\widetilde{T}, \ T = \widetilde{S}, \ V = \widetilde{P}, \ -P = \widetilde{V}$$
(3.7)

Si U representa la energía interna, S la entropía, V el volumen y N el número de partículas, entonces, (3.5) son la energía libre de Helmholtz, la entalpía y la energía libre de Gibbs, respectivamente.

3.5. Espacio Fase Termodinámico

El espacio fase termodinámco es otro de los elementos importantes de la GTD. Se construye con las coordenadas de las que hablamos en la sección anterior. Para traducir correctamente la transformación de Legendre como un cambio de coordenadas debemos considerarlas independientes. Entonces introducimos el espacio fase al que llamaremos \mathcal{T} . La dimensión de \mathcal{T} es 2n + 1, al conjunto de coordenadas con las que lo construimos lo llamaremos Z^A para ser consistentes con la notación de los trabajos realizados en GTD.

Entonces, sea $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ el conjunto de coordenadas independientes de \mathcal{T} . El índice *a* corre desde 1, ..., *n*. Tenemos entonces 2*n* coordenadas independientes E^a, I^a y una extra Φ , con esto la dimensión de \mathcal{T} es 2n + 1 como habíamos mencionado. Reescribimos entonces la transformación de Legendre formalmente como:

$$\left\{Z^A\right\} \to \left\{\tilde{Z}^A\right\} = \left\{\tilde{\Phi}, \tilde{E}^a, \tilde{I}^a\right\},\tag{3.8}$$

²Aquí nombramos las variables de esa manera para el ejemplo, sin embargo aún no podemos identificarlas exactamente como las variables termodinámicas.

38

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} E^k I^l$$

$$E^i = -\tilde{I}^i$$

$$E^j = \tilde{E}^j$$

$$I^i = \tilde{E}^i$$

$$I^j = \tilde{I}^j.$$
(3.9)

De manera similar a lo mencionado en la sección anterior, $I \bigcup J$ es una partición disjunta del conjunto de índices $\{1, ..., n\}$. Tenemos también $i \in I, j \in J, k, l = 1, ...I$. (3.9) define una transformación total de Legendre si $I = \{1, ..., n\}$, si $I = \emptyset$ define la transformación identidad y si $j \neq \emptyset$ define transformaciones parciales de Legendre.

Supongamos ahora que \mathcal{T} es una variedad diferenciable con coordenadas $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ de dimensión 2n + 1. De acuerdo al teorema de Darboux[5, 21] utilizando las coordenadas definidas como Z^A en \mathcal{T} podemos escribir la 1-forma fundamental de manera canónica como (forma de contacto):

$$\Theta = d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b, \quad \delta_{ab} = diag(1, 1, \dots, 1), \tag{3.10}$$

que satisface la condición de no integrabilidad:

$$\Theta \wedge (d\Theta)^n \neq 0. \tag{3.11}$$

Al par (\mathcal{T}, Θ) se le llama variedad de contacto. Una propiedad importante de esta 1-forma y de la construcción del espacio fase, es que (3.10) es invariante bajo transformaciones de Legendre. Esto lo podemos escribir de la siguiente manera:

$$\Theta = d\Phi - \delta_{ab}I^{a}dE^{b}$$

$$= d\left(\tilde{\Phi} - \delta_{kl}\tilde{E}^{k}\tilde{I}^{l}\right) - \delta_{ab}I^{a}dE^{b}$$

$$= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl}d\tilde{E}^{k}\tilde{I}^{l} - \delta_{rs}\tilde{E}^{r}d\tilde{I}^{s} - \delta_{ab}I^{a}dE^{b}$$

$$= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl}d\tilde{E}^{k}\tilde{I}^{l} - \delta_{rs}\tilde{E}^{r}d\tilde{I}^{s} - \delta_{ab}\tilde{E}^{a}d(-\tilde{I}^{b})$$

$$= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl}d\tilde{E}^{k}\tilde{I}^{l} - \delta_{rs}\tilde{E}^{r}d\tilde{I}^{s} + \delta_{ab}\tilde{E}^{a}d\tilde{I}^{b}$$
(3.12)

Como a, b, r, s son índices mudos, entonces podemos simplificar a:

$$\Theta = d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} d\tilde{E}^k \tilde{I}^l - \delta_{rs} \tilde{E}^r d\tilde{I}^s + \delta_{rs} \tilde{E}^r d\tilde{I}^s$$

$$= d\tilde{\Phi} - \delta_{kl} d\tilde{E}^k \tilde{I}^l$$

$$\therefore \Theta = \tilde{\Theta}$$
(3.13)

Esto nos dice que la dependencia funcional de Θ no cambia y con esto podemos decir que una variedad de contacto, por ejemplo \mathcal{T} , es invariante de Legendre.

3.6. Espacio de Estados de Equilibrio

El espacio de estados de equilibrio de la GTD, al cual denotaremos como \mathcal{E} , es una variedad diferenciable de dimensión n, es una sub-variedad del espacio fase, es decir, $\mathcal{E} \subset \mathcal{T}$. Los puntos en esta variedad representan estados de equilibrio del sistema termodinámico que se esté estudiando. Intuitivamente podemos decir que en este espacio podemos describir un sistema termodinámico, con n grados de libertad, en equilibrio.

Está construido de tal manera que podamos interpretar geométricamente las propiedades termodinámicas del sistema través de un mapeo suave, que llamaremos φ , tal que:

$$\varphi: \mathcal{E} \to \mathcal{T}. \tag{3.14}$$

(3.14) también es un encaje [34] ³⁴ La coordenadas del espacio de estados de equilibrio son las variables de nuestro sistema termodinámico, entonces tenemos el conjunto { E^a } Utilizando φ se tiene que: $\varphi : {E^a} \rightarrow {Z^A(E^a)}$ que es equivalente a { $\Phi(E^a), E^a, I^a(E^a)$ }. Observando lo anterior, reconocemos que $\Phi(E^a)$ es la ecuación fundamental del sistema. Entonces el mapeo definido por (3.14) también es equivalente a especificar la ecuación fundamental del sistema. Finalmente es necesario obtener las ecuaciones de estado del sistema. Para poder incorporarlas a \mathcal{E} calcula-

³Siguiendo la definición de [29] un encaje está definido como una mapeo suave $f: M \to N$ en donde $dimM \leq dimN$ tal que f es inyectivo y una inmersión de M en N. La imagen f(M) es una sub-variedad de N.

 $^{{}^4}f$ es una inmersión de M en N si $f_{\star}: T_pM \to T_{f(p)}N$ es inyectivo, es decir, su rango es igual a la dimensión de M.

mos el pullback de la uno forma fundamental, el cual actúa del espacio cotangente de \mathcal{T} al espacio cotangente de \mathcal{E} . También imponemos la condición $\varphi^*(\Theta) = 0$, entonces:

$$\varphi^*: T^*_{\varphi(p)}\mathcal{T} \to T^*_p\mathcal{E}, \tag{3.15}$$

tal que se cumple:

$$\varphi^{\star}(\Theta) = \varphi^{\star}(d\Phi - \delta_{ab}I^a dE^b) = 0.$$
(3.16)

Ahora recordamos cómo opera el pullback: $\varphi^* d = d\varphi^*$ y

$$\varphi^* E^a = E^a \tag{3.17}$$
$$\varphi^* I_a = \frac{\partial \Phi}{\partial E^a},$$

debido a que E^a y I_a son funciones en el espacio fase. De todo lo anterior obtenemos lo siguiente:

$$d\Phi = \delta_{ab} I^a dE^b \tag{3.18}$$
$$\frac{\partial \Phi}{\partial E^a} = \delta_{ab} I^b.$$

Reconocemos a (3.18) como la Primera Ley de la Termodinámica y las ecuaciones de estado del sistema. Finalmente se pide que la ecuación fundamental también satisfaga la Segunda Ley de la Termodinámica y la Tercera Ley.

3.7. Métrica G

La siguiente parte de la estructura geométrica de la GTD es introducir una métrica, G, en el espacio fase \mathcal{T} . G debe cumplir con la invariancia de Legendre. Como habíamos mencionado anteriormente, la ivariancia de Legendre en la Termodinúrica es un elemento de extrema importancia para poder estudiar un sistema físico. Al imponer que G cumpla con esa invariancia, la incorporamos a la estructura de la GTD. Con esta métrica, podemos concluir que (\mathcal{T}, Θ, G) es una variedad Riemanniana de contacto que cumple con la invariancia de Legendre.

Tenemos tres clases de métricas en GTD, las tres cumplen con la invariancia bajo

transformaciones de Legendre [34]. En componentes la transformación de la métrica G está dada por:

$$G_{AB} \to \tilde{G}_{AB} = \frac{\partial Z^C}{\partial \tilde{Z}^A} \frac{\partial Z^D}{\partial \tilde{Z}^B} G_{CD},$$
 (3.19)

donde se utiliza (3.8). Entonces si denotamos como \tilde{G}_{AB} a la métrica obtenida de aplicar (3.8) directamente y \bar{G}_{AB} a la métrica formada con las coordenadas \tilde{Z}^{A} , entonces $\tilde{G}_{AB} = \bar{G}_{AB}$. La nombraremos G_1, G_2, G_3 . Todas tienen la forma $G = G_{AB} dZ^A dZ^B$. Concretamente son:

$$G_1 = (d\Phi - \delta_{ab}I^a dE^b)^2 + (\epsilon_{ab}E^a I^b)(\delta_{cd}dE^c dI^d), \qquad (3.20)$$

$$G_{2} = (d\Phi - \delta_{ab}I^{a}dE^{b})^{2} + (\epsilon_{ab}E^{a}I^{b})(\eta_{cd}dE^{c}dI^{d}), \qquad (3.21)$$

$$G_3 = (d\Phi - \delta_{ab}I^a dE^b)^2 + \sum_{a=1}^n E_a I_a dE^a dI^a, \qquad (3.22)$$

en donde ϵ_{ab} es una matriz diagonal constante de tamaño $n \times n$, $\delta_{cd} = diag(1, 1..., 1)$ y $\eta_{cd} = diag(-1, 1, ..., 1)$. Se ha encontrado que G_1 y G_2 son métricas invariantes bajo transformaciones totales de Legendre y G_3 es invariante bajo transformaciones parciales de Legendre [34].

3.8. Métrica g

Con la métrica G la estructura del espacio fase está completa. Ahora nos concentramos en la estructura del espacio de estados de equilibrio. Utilizando el pullback de la métrica G inducimos una métrica en \mathcal{E} :

$$\varphi^{\star}(G) = g, \tag{3.23}$$

de esta manera, g hereda las propiedades de la métrica G. Explícitamente:

$$g = \varphi^*(G) = G_{AB} \frac{\partial Z^A}{\partial E^{\alpha}} \frac{\partial Z^B}{\partial E^{\beta}} dE^{\alpha} \otimes dE^{\beta}.$$
 (3.24)

Por ejemplo si tomamos G_3 y calculamos su pullback obtenemos:

$$\varphi^*\left((d\Phi - \delta_{ab}I^a dE^b)^2 + \sum_{a=1}^n E_a I_a dE^a dI^a\right) = \sum_a \varphi^*\left(E^a I_\alpha dE^a dI_a\right). \tag{3.25}$$

donde hemos utilizado (3.16). Ahora por las propiedades del pullback y la derivada exterior nos queda:

$$\varphi^* dI_a = d \left(\varphi^* I_a\right) = d \left(\frac{\partial \Phi}{\partial E^a}\right)$$

$$= \sum_b \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^a \partial E^b} dE^b$$
(3.26)

Por lo tanto tenemos:

$$g_{3} = \sum_{a,b} \left(E^{a} \frac{\partial \Phi}{\partial E^{a}} \right) \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial E^{a} \partial E^{b}} dE^{a} dE^{b}$$

$$= \sum_{a=1}^{n} \left(\delta_{ad} E^{d} \frac{\partial \Phi}{\partial E^{a}} \right) \delta^{ab} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial E^{b} \partial E^{c}} dE^{a} dE^{c},$$
(3.27)

donde $\delta_{ab} = diag(1, 1, ..., 1)$. Realizando el mismo procedimiento para las métricas uno y dos obtenemos la familia de métricas para el espacio ed estados de equilibrio:

$$g_1 = \beta_{\Phi} \Phi \delta_a^{\ c} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c} dE^a dE^c.$$
(3.28)

$$g_2 = \beta_\Phi \Phi \eta_a \,^c \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c} dE^a dE^c. \tag{3.29}$$

$$g_3 = \sum_{a=1}^n \left(\delta_{ad} E^d \frac{\partial \Phi}{\partial E^a} \right) \delta^{ab} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c} dE^a dE^c.$$
(3.30)

En las ecuaciones anteriores $\delta_{ab} = diag(1, 1, ..., 1)$ y $\eta_a{}^c = diag(-1, 1, ..., 1)$. La constante β_{Φ} que aparece en (3.28) y (3.29) representa el grado de homogeneidad del potencial termodinámico Φ tomando en cuenta la identidad de Euler ⁵: $\Phi(\lambda^{\beta_i} E^i) =$

⁵En las métricas se utilizó $\beta_{ab} = I^a E^b \beta_{\Phi}$, donde $\beta_{ab} = \epsilon_{ab} = diag(\beta_1, \beta_2, \beta_3, ..., \beta_n)$ se determinan por el grado de cuasi homogeneidad de las variables de las que depende Φ .

 $\lambda^{\beta_{\Phi}} \Phi(E^i)$. Esta constante no afecta las propiedades geométricas de las métricas y está determinada por el grado de cuasi-homogeneidad del potencial termodinámico. En el siguiente capítulo examinaremos un ejemplo de esto.

3.9. Tensor de curvatura de Riemann

Concluimos este capítulo con el tensor de curvatura, el cuál nos ayuda a cuantificar qué tanto se desvía una variedad de ser plana. Lo calculamos de la manera estándar utilizando las derivadas de la métrica a través de los símbolos de Christoffel⁶:

$$\Gamma^{a}_{bc} = \frac{1}{2} g^{da} \left(g_{db,c} + g_{dc,b} - g_{bc,d} \right).$$
(3.31)

Entonces las componentes del Riemann quedan como:

$$R^a{}_{bcd} = \Gamma^a{}_{bd,c} - \Gamma^a{}_{b,d} + \Gamma^a{}_{ec}\Gamma^e{}_{bd} - \Gamma^a{}_{ed}\Gamma^e{}_{bc}.$$
(3.32)

En (3.31) y (3.32) la coma denota la derivada parcial.

En GTD la curvatura y sus singularidades son muy importantes. Se ha encontrado que las singularidades en el tensor de Riemann corresponden a transiciones de fase y también tomando inspiración de la teoría de la Relatividad General de Einstein, una curvatura diferente de cero representa una interacción termodinámica. Se ha tratado de encontrar una definición de interacción termodinámica utilizando la GTD, hasta el momento la curvatura diferente de cero nos dice que el sistema no es un gas ideal, de manera intuitiva. Con esto concluimos este capítulo y procedemos a la sección de resultados y análisis de los mismos.

Finalmente haremos una observación que será de utilidad en el siguiente capítulo. Para sistemas de **dos dimensiones**, el escalar de curvatura de Ricci es proporcional a la componente independiente del tensor de curvatura [50, 54], entonces basta con analizar el escalar para los sistemas que utilizaremos.

⁶Aquí la notación $f_{,a}$ indica derivada parcial respecto a la coordenada x^a , es decir, $\frac{\partial f}{\partial x^a}$.

Capítulo 4

Aplicación de la GTD a los sistemas.

En este capítulo presentamos los resultados de aplicar la GTD a los gases ideales cuánticos, en partícular, a cómo se comportan sus propiedades geométricas dependiendo de los límites de temperatura en los que se encuentren. El gas idea de Gentile será en el que nos concentraremos más. Debido a ser una generalización es interesante observar y entender cómo su comportamiento geométrico cambia dependiendo su comportamiento físico. Esta conexión es la motivación de la Física para utilizar Geometría. Comenzaremos entonces con los potenciales termodinámicos que utilizaremos para realzar el estudio y sus resultados y análisis respectivos.

4.1. Potencial $S(T, V, N(\mu))$.

En el capítulo 2 obtuvimos el potencial termodinámico correspondiente a los gases ideales cuánticos, de Bose-Einstein, Fermi-Dirac y Gentile. En esta primera sección utilizaremos el potencial $S(T, V, N(\mu))$ para los gases ideales de Bose-Einstein y Fermi-Dirac y analizaremos el límite de fugacidad mucho menor a 1 considerando las primeras desviaciones del límite clásico. Estos resultados son parte del artículo publicado [56]. Obtuvimos en el capítulo 2 las siguientes expresiones para la energía interna y el número de partículas de los gases ideales de Bose-Einstein y Fermi-Dirac [39, 40, 56]:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} Li_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z}$$
(4.1)

у

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} L i_{5/2}(z)$$
(4.2)

Para Fermi-Dirac:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} Li_{3/2}(-z) \tag{4.3}$$

у

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} L i_{5/2}(-z).$$
(4.4)

Ahora utilizando la expresión para la energía libre de Helmholtz $F = U - TS \rightarrow S = \frac{1}{T}(U - F)$ y la indentidad $F = -pV + \mu N$ junto con las ecuaciones de estado del gas ideal¹ obtenemos el potencial siguiente:

$$S = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{3} U - \mu N \right). \tag{4.5}$$

Notemos ahora que este potencial depende implícitamente del potencial químico, a través del número de partículas. Para poder continuar invertiremos la expresión de N. Consideraremos el límite de fugacidad pequeña, es decir, $z \ll 1$. En este límite utilizamos la representación en serie de los polilogaritmos y con ayuda de una constante $\alpha = -1$ o $\alpha = 1$, dependiendo de si el sistema es una gas ideal de Bose-Einstein o uno de Fermi-Dirac, podemos escribir todo de manera compacta:

$$Li_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha)^{k+1} \frac{z^k}{k^n}.$$
(4.6)

En el límite de $z \ll 1$, temperatura alta, nos quedamos con los términos de orden dos en la serie ya que los siguientes son despreciables e invertimos la expresión para (4.1) y (4.3):

$$\frac{N\lambda_T^3}{gV} = z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \dots$$
(4.7)

у

$$\frac{V\lambda_T^3}{gV} = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \dots$$
(4.8)

Con ayuda de

$${}^1pV = Nk_BT$$
 y $U = \frac{3}{2}Nk_BT$.

$$z = b_1 \left(\frac{N}{V}\right) + b_2 \left(\frac{N}{V}\right)^2, \qquad (4.9)$$

donde b_1 y b_2 son constantes a determinar, podemos invertir cada una de las series, llegando a:

$$z = \frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2} + \frac{\alpha}{2^{3/2}} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^3.$$
 (4.10)

Finalmente sustituyendo en (4.5) y simplificando, obtenemos el potencial para los cálculos de está sección:

$$S = \frac{5}{2}Nk_B - Nk_B \ln\left(\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2}\right) + \frac{\alpha N^2 k_B}{2^{7/2}V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2}.$$
 (4.11)

4.1.1. Resultados: GTD potencial S(T, V).

De acuerdo a la sección anterior, tenemos un potencial termodinámico que depende de tres variables, sin embargo observamos que podemos mantener fijo el número de partículas, esto se debe a que la entropía es de la forma $S = S_0 + f(T, V, N = cte)$. Por lo tanto reescribimos (4.11):

$$S = S_0 - N \ln\left(\frac{N}{V} \left(\frac{1}{T}\right)^{3/2}\right) + \frac{\alpha A N^2}{V} \left(\frac{1}{T}\right)^{3/2}, \qquad (4.12)$$

donde $A = 1/2^{7/2}$ y $\alpha = -1$ o $\alpha = 1$. Para los cálculos de las métricas las coordenadas del espacio de estados de equilibrio serán $E^a = (T, V)$ con $\Phi = S(T, V)$.

Calculamos cada métrica utilizando el software Maple 18 ??:

$$g_{1} = \left(\mathbf{S}_{0} - \mathbf{N}\ln\left(\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{V}}\left(\frac{1}{\mathbf{T}}\right)^{3/2}\right) + \frac{\mathbf{AN^{2}}}{\mathbf{V}}\left(\frac{1}{\mathbf{T}}\right)^{3/2}\right)$$

$$\left[\frac{3}{2}\left(\frac{5\alpha AN}{VT^{3/2}} - 1\right)\frac{dT^{2}}{T^{2}} + \frac{3\alpha AN}{V^{2}T^{5/2}}dVdT + \left(\frac{2\alpha AN}{VT^{3/2}}\right)\frac{dV^{2}}{V^{2}}\right],$$

$$(4.13)$$

donce observamos que la expresión (4.12) aparece en la métrica y también aparecerá

en g_2 y g_3 . Entonces obtenemos:

$$g_{1} = SN \left[\frac{3}{2} \left(\frac{5\alpha AN}{VT^{3/2}} - 1 \right) \frac{dT^{2}}{T^{2}} + \frac{3\alpha AN}{V^{2}T^{5/2}} dV dT + \left(\frac{2\alpha AN}{VT^{3/2}} - 1 \right) \frac{dV^{2}}{V^{2}} \right], \quad (4.14)$$

$$g_{2} = SN \left[-\frac{3}{2} \left(\frac{5\alpha AN}{2VT^{3/2}} - 1 \right) \frac{dT^{2}}{T^{2}} + \left(\frac{2\alpha AN}{VT^{3/2}} - 1 \right) \frac{dV^{2}}{V^{2}} \right], \quad (4.14)$$

$$g_{3} = N^{2} \left(\frac{\alpha AN}{VT^{3/2}} - 1 \right) \left[\frac{9}{4} \left(-\frac{5\alpha AN}{2VT^{3/2}} + 1 \right) \frac{dT^{2}}{T^{2}} + \frac{3\alpha AN}{V^{2}T^{5/2}} dV dT + \left(-\frac{2\alpha AN}{4VT^{3/2}} + 1 \right) \frac{dV^{2}}{V^{2}} \right]$$

$$(4.15)$$

Podemos notar en las tres métricas que la signatura depende del valor de α , es decir, depende del tipo de partícula. Esto nos muestra que la naturaleza cuántica de las partículas cambia las propiedades geométricas del espacio de estados de equilibrio y los resultados ponen fuertemente en evidencia que utilizando GTD podemos analizar propiedades físicas de manera sencilla. Para las singularidades de curvatura, calculamos el escalar de curvatura de Ricci y analizamos el denominador. Las siguientes condiciones, nos proporcionan la información en dónde el escalar diverge:

$$1 \to 7A^{2}N^{2}\alpha^{2} - 9ANT^{3/2}V\alpha + 2T^{3}V^{2} = 0$$

$$2 \to \left(\frac{2N\alpha A}{VT^{3/2}} - 1\right) \left(\frac{5N\alpha A}{2VT^{3/2}} - 1\right) = 0$$

$$3 \to \left(T^{3/2}V - \alpha AN\right)^{2} \left(55A^{2}N^{2}\alpha^{2} - 77ANT^{3/2}V\alpha + 16T^{3}V^{2}\right) = 0$$
(4.16)

La dos primeras condiciones nos proporcionan soluciones reales, la tercera no tiene soluciones físicas. Entonces tomando esto podemos resolver y encontrar los siguientes valores²:

$$1 \to \frac{NA\alpha}{VT^{3/2}} = 1, 2/7$$

$$2 \to \frac{NA\alpha}{VT^{3/2}} = 1/2, 2/5.$$
(4.17)

Sustituyendo los valores de la constante A y los dos posibles valores de α , las raíces caen fuera del intervalo de válidez en el que se inició a trabajar. Necesitamos que se cumpla el límite clásico, que fue la suposición que hicimos y en estos casos no es

 $^{^{2}}$ La hoja de cálculo se encuentra en el apéndice C

así. Los escalares de curvatura son diferentes de cero sin embargo las singularidad no son físicas para nuestros sistemas, entonces en este límite los gases no presentan transiciones de fase.

4.2. Gran Potencial, $\Xi(T, V, \mu)$.

El potencial termodinámico que utilizaremos para aplicar GTD a los sistemas de gases ideales cuánticos será el Gran Potencial. En principio podríamos utilizar la Energía Interna como función de las variables extensivas, es decir, S(U, V, N). Para sistemas clásicos no es un problema obtenerla, por ejemplo para el gas ideal es muy sencillo como uno puede revisar en [4, 23]. Para sistemas cuánticos es diferente, esto se debe a que la forma funcional de las relaciones termodinámicas se complican por la presencia de los polilogaritmos. En el capítulo 2 hicimos el análisis estadístico y termodinámico de los gases, obtuvimos las expresiones y hablamos de la forma funcional. Los sistemas los tratamos en el ensamble gran canónico, este ensamble es el natural para los gases ideales cuánticos, como habíamos discutido con anterioridad. Gracias a la invariancia de Legendre, no tenemos problema al utilizar el gran potencial o cualquiera de las otras transformadas de Legendre de la Energía Interna y como en GTD nuestra estructura geométrica tampoco depende de la elección del potencial, podemos proceder sin problemas. Entonces, solamente haremos referencia a lo obtenido en el capítulo 2, de esta forma para el gas ideal de Bose-Einstein el gran potencial está dado por la siguiente expresión:

$$\Xi(T, V, \mu) = -T^{\frac{5}{2}}VLi_{\frac{5}{2}}\left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right)\right),\tag{4.18}$$

en donde no se ha escrito el término correspondiente al estado base.

Para el gas ideal de Fermi-Dirac se tiene lo siguiente:

$$\Xi(T, V, \mu) = T^{\frac{5}{2}} V Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \right).$$
(4.19)

Y finalmente para el gas ideal de Gentile:

$$\Xi(T, V, \mu) = -T^{\frac{5}{2}} V \left[Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \right) - \frac{1}{(p+1)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}} \left(\exp\left(\frac{\mu}{T}\right)^{p+1} \right) \right], \quad (4.20)$$

en donde nuevamente no se ha escrito el término correspondiente al estado base. Para las expresiones anteriores se ha tomado $k_B = 1$, $m = 2\pi$ y $\hbar = 1$ y T denota la temperatura, V el volumen y μ el potencial químico.

Las ecuaciones (4.18), (4.19) y (4.20) no son funciones homogéneas de grado 1. Pero cumplen con la definición de cuasi-homogeneidad como se verá a continuación.

Comenzamos con el gran potencial de un gas ideal de Bose-Einstein, (4.18), y con la definición de función cuasi-homogénea de grado s [3]:

Sea f una función diferenciable de un conjunto de variables $x^1, ..., x^n$ y sean $\lambda, s \in \mathbb{R}$ con $\lambda \neq 0$. Si

$$f(\lambda^{\beta_1} x^1, ..., \lambda^{\beta_n} x^n) = \lambda^s f(x^1, ..., x^n),$$
(4.21)

decimos que f es cuasi-homogénea de grado m. Donde $\beta_i = (\beta_1, ..., \beta_n) \in \mathbb{R}^n$.

Si queremos obtener una relación de Euler análoga a la que se tiene para funciones homógeneas, derivamos (4.21) respecto al parámetro λ :

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda^{\beta_1} x^1} \left(\frac{\partial \lambda^{\beta_1} x^1}{\partial \lambda} \right) + \dots + \frac{\partial f}{\partial \lambda^{\beta_n} x^n} \left(\frac{\partial \lambda^{\beta_n} x^n}{\partial \lambda} \right) = m \lambda^{m-1} f(x^1, \dots, x^n).$$
(4.22)

De donde llegamos a :

$$\frac{\partial f}{\partial \lambda^{\beta_1} x^1} \beta_1 x^1 \lambda^{\beta_1 - 1} + \dots + \frac{\partial f}{\partial \lambda^{\beta_n} x^n} \beta n x^n \lambda^{\beta_n - 1} = m \lambda^{m - 1} f(x^1, \dots, x^n).$$
(4.23)

Dado que λ es arbitraria, la tomamos como $\lambda = 1$ y finalmente llegamos a la relación de Euler para funciones cuasi-homogéneas:

$$\frac{\partial f}{\partial x^1}\beta_1 x^1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x^n}\beta_n x^n = mf(x^1, \dots, x^n).$$
(4.24)

Ahora podemos calcular los valores de β_1 , β_2 y β_3 , que corresponden a T, V y μ respectivamente, para los potenciales (4.18), (4.19) y (4.20).

Reemplazamos las variables (T, V, μ) por $(\lambda^{\beta_1}T, \lambda^{\beta_2}V, \lambda^{\beta_3}\mu)$ en (4.18), (4.19) y (4.20). Después de realizar las simplificaciones correspondientes y utilizar la definición (4.21), llegamos a los valores para cada β_i , i = 1, 2, 3.

$$\beta_1 = \frac{1}{5}m$$

$$\beta_2 = \frac{1}{2}m$$

$$\beta_3 = \beta_1 = \frac{1}{5}m$$

$$(4.25)$$

Renombramos los índices haciendo una correspondencia con las variables y el grado de homogeneidad con el Gran Potencial, es decir, $(1, 2, 3) \rightarrow (T, V, \mu)$ y $m \rightarrow \beta_{\Xi}$:

$$\beta_T = \frac{1}{5} \beta_{\Xi}$$

$$\beta_V = \frac{1}{2} \beta_{\Xi}$$

$$\beta_\mu = \beta_1 = \frac{1}{5} \beta_{\Xi}$$

$$(4.26)$$

Con todo lo anterior, podemos decir que el Gran Potencial es una función homogénea de grado β_{Ξ} , donde β_{Ξ} es arbitraria.

Explícitamente la relación de Euler es:

$$\frac{1}{5}\beta_{\Xi}\Xi_{T}T + \frac{1}{2}\beta_{\Xi}\Xi_{V}V + \frac{1}{5}\beta_{\Xi}\Xi_{\mu}\mu = \beta_{\Xi}\Xi, \qquad (4.27)$$

donde $\Xi_T = \frac{\partial \Xi}{\partial T}, \ \Xi_V = \frac{\partial \Xi}{\partial V}, \ \Xi_\mu = \frac{\partial \Xi}{\partial \mu}.$

4.2.1. Condiciones de estabilidad.

Antes de continuar, revisemos las condiciones de estabilidad para el potencial de interés para asegurarnos de que se cumplen sin problema.

El Gran Potencial, $\Xi(T, V, \mu)$ es una transformada de Legendre de la Energía Interna, U(S, V, N), donde S es la Entropía, V el volumen y N el número de partículas. Para U(S, V, N) las condiciones de estabilidad son [4]:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \end{pmatrix} \ge 0,$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \end{pmatrix} \ge 0,$$

$$(4.28)$$

es decir, la energía interna es convexa en sus variables extensivas. Y para variaciones cooperativas de $S \ge V$:

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right) \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}\right)^2 \ge 0.$$
(4.29)

Al calcular la transformación de Legendre de U reemplazando la entropía por la temperatura y el número de partículas por el potencial químico, llegamos a las siguientes condiciones de estabilidad:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Xi}{\partial T^2} \end{pmatrix} \le 0,$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Xi}{\partial \mu^2} \end{pmatrix} \le 0,$$

$$(4.30)$$

es decir, el gran potencial es cóncavo en sus variables intensivas. Y para variaciones cooperativas de $T \ge \mu$:

$$\left(\frac{\partial^2 \Xi}{\partial T^2}\right) \left(\frac{\partial^2 \Xi}{\partial \mu^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 \Xi}{\partial T \partial \mu}\right)^2 \ge 0.$$
(4.31)

La expresiones (4.20), (4.18) y (4.19) serán los potenciales a utilizar para realizar los cálculos de GTD. Recordando la forma de la métrica, lo único que se necesita para aplicar la GTD es precisamente el potencial termodinámico del sistema.

4.2.2. Sistemas de dos dimensiones.

Para continuar el análisis fijaremos el volumen de los gases, esto nos deja con solamente dos variables termodinámicas, es decir, con dos coordenadas o un sistema en dos dimensiones. Esto simplifica la aplicación de la geometría. Entonces para un sistema termodinámico de dos grados de libertad podemos escribir cada una de las métricas g de la siguiente manera $[56]^3$:

$$g_1 = \Phi\left(\Phi_{,11} \left(dE^1\right)^2 + 2\Phi_{,12} dE^1 dE^2 + \Phi_{,22} \left(dE^2\right)^2\right),\tag{4.32}$$

$$g_2 = \Phi\left(-\Phi_{,11} \left(dE^1\right)^2 + \Phi_{,22} \left(dE^2\right)^2\right),\tag{4.33}$$

$$g_{3} = E^{1} \Phi_{,1} \Phi_{,11} \left(dE^{1} \right)^{2} + \left(E^{1} \Phi_{,1} + E^{2} \Phi_{,2} \right) \Phi_{,12} dE^{1} dE^{2} + E^{2} \Phi_{,2} \Phi_{,22} \left(dE^{2} \right)^{2}, \quad (4.34)$$

donde $\Phi = \Xi(T, \mu)$ y $E^a = (T, \mu)$. Entonces cada elemento de línea queda como:

$$g_1 = \Xi \left(\Xi_{,11} \left(dT \right)^2 + 2\Xi_{,12} dT d\mu + \Xi_{,22} \left(d\mu \right)^2 \right), \tag{4.35}$$

$$g_2 = \Xi \left(-\Xi_{,11} \left(dT \right)^2 + \Xi_{,22} \left(d\mu \right)^2 \right), \tag{4.36}$$

$$g_3 = T\Xi_{,1}\Xi_{,11} (dT)^2 + (T\Xi_{,1} + \mu\Xi_{,2}) \Xi_{,12} dT d\mu + \mu\Xi_{,2}\Xi_{,22} (d\mu)^2.$$
(4.37)

Sin pérdida de generalidad, tomamos $\beta_{\Xi} = 1$ en (4.27), recordando que es una constante que podemos absorber en los cálculos explícitos y no afecta los resultados. Las métricas anteriores y el escalar de curvatura nos proporcionarán las condiciones para encontrar singularidades de curvatura y hacer la conexión con las transiciones de fase, como mencionamos en el capítulo anterior, este es uno de los objetivos de aplicar la GTD a estos sistemas. Las condiciones generales para encontrar las singularidades de curvatura las obtenemos al analizar el denominador para un potencial general de dos dimensiones, en este caso el gran potencial, tenemos entonces:

$$1 \to \Xi_{,11} \Xi_{,22} - (\Xi_{,12})^2 = 0$$

$$2 \to \Xi_{,11} \Xi_{,22} = 0$$

$$3 \to \Xi_{,12} = 0,$$
(4.38)

para cada métrica respectivamente.

4.2.3. Escalares de Curvatura.

Ahora presentamos los escalares de curvatura del gas ideal de Gentile. Los cálculos se encuentran en el apéndice E. La expresión de los escalares es muy grande y no se puede desplegar en pantalla de manera satisfactoria, es por esto que presentamos gráficas. donde $\Phi = \Xi(T, \mu)$ y $E^a = (T, \mu) = (x, u)$. En el código de Maple que

 $^{^{3}}$ Los elementos de línea.

utilizaremos $u = \mu$ para denotar al potencial químico.

Las formas explícitas de la métrica y del escalar de curvatura son demasiado grandes para ser desplegadas en pantalla. Los cálculos para los escalares se hacen utilizando las tres métricas. Presentamos primero lo cálculos con la métrica g_3 , en forma tensorial es:

$$g_{3} = x \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x}\right) \frac{\partial^{2}\Xi}{\partial x^{2}} dx \otimes dx + u \left(\frac{\partial \Xi}{\partial u}\right) \frac{\partial^{2}\Xi}{\partial u^{2}} du \otimes du \qquad (4.39)$$
$$+ \frac{1}{2} \left[x \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x}\right) + u \left(\frac{\partial \Xi}{\partial u}\right) \right] \frac{\partial^{2}\Xi}{\partial u \partial x} dx \otimes du$$
$$+ \frac{1}{2} \left[x \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x}\right) + u \left(\frac{\partial \Xi}{\partial u}\right) \right] \frac{\partial^{2}\Xi}{\partial u \partial x} du \otimes dx,$$

en dónde la x representa a la temperatura y u al potencial químico. De ahora en adelante los cálculos estarán hechos de manera simbólica y en general para un potencial termodinámico en dos dimensiones y posteriormente se sustituyen los valores y formas explícitas para poder realizar las gráficas. Mostramos los resultados en la hoja de cálculo de Maple en el apéndice E.

La métrica g_1 es la siguiente:

$$g_1 = \Xi \left(\frac{\partial^2 \Xi}{\partial x^2} dx \otimes dx + \frac{\partial^2 \Xi}{\partial u \partial x} dx \otimes du + \frac{\partial^2 \Xi}{\partial u \partial x} du \otimes dx + \frac{\partial^2 \Xi}{\partial u^2} du \otimes du \right).$$
(4.40)

Y la métrica g_2 está dada por:

$$g_2 = \Xi \left(-\frac{\partial^2 \Xi}{\partial x^2} dx \otimes dx + \frac{\partial^2 \Xi}{\partial u^2} du \otimes du \right).$$
(4.41)

La forma explícita de cada una de las métricas excede el tamaño de salida del programa, es decir, no es posible desplegarlo en pantalla. Sin embargo, no es necesario mostrar cada una de las expresiones, basta con guardar el valor calculado en una variable en el programa y utilizarla para calcular el escalar de curvatura de Ricci.

4.2.4. Resultados GTD del Gas Ideal de Bose-Einstein y Fermi- Dirac.

Mostramos primero los resultados para los gases ideales de Bose-Einstein y Fermi-Dirac. En estos dos casos, utilizamos el gran potencial sin tomar alguna aproximación como se hizo en la sección anterior. Para el gas de Fermi-Dirac es posible mostrar las componentes de la métrica de manera explícita. 4

$$g_{3} = T \left(\frac{5T^{3/2}VLi_{5/2}\left(\exp\left(\frac{u}{T}\right)\right)}{2} - T^{1/2}VuLi_{3/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right) \right)$$

$$\left(\frac{15T^{1/2}Li_{5/2}\left(\exp\left(\frac{u}{T}\right)\right)}{4} - \frac{3VuLi_{3/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right)}{T^{1/2}} + \frac{Vu^{2}Li_{1/2}\left(-\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right)}{T^{3/2}} \right) d\mathbf{T}^{2}$$

$$+ \frac{1}{2} \left[\left(T \left(\frac{5T^{3/2}VLi_{5/2}\left(\exp\left(\frac{u}{T}\right)\right)}{2} - T^{1/2}VuLi_{3/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right) \right) + T^{3/2}uVLi_{5/2}\left(\exp\left(\frac{u}{T}\right)\right) \right) \right]$$

$$\left(\frac{3T^{3/2}Li_{3/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right)}{2} - \frac{uVLi_{1/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right)}{T^{1/2}} \right) d\mathbf{T}^{4}$$

$$+ \left(T^{2}V^{2}uLi_{1/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right) Li_{3/2}\left(\exp\left(-\frac{u}{T}\right)\right) \right) d\mathbf{u}^{2}$$

$$(4.42)$$

En principio deberíamos poder utilizar las condiciones (4.38), sin embargo, el tamaño de las expresiones es muy grande, es por esto que presentamos una gráfica del escalar de curvatura de Ricci de un gas ideal de Fermi-Dirac, ver figura 4.1. Observamos que el comportamiento no muestra ninguna divergencia, esto está de acuerdo con lo reportado en la literatura. Pero el escalar es diferente de cero, esto nos indica la presencia de una interacción termodinámica.

El sistema es considerado ideal, pero en el marco de la GTD podemos decir que esta interacción se debe a la naturaleza cuántica de los fermiones, aunque en su Hamiltoniano no exista un término de interacción a través de un potencial, podemos decir que el carácter simétrico de la función de onda del sistema y el principio de exclusión de Pauli, que afecta a los fermiones ya sea un sistema ideal o no, deben de presentarse de alguna manera. Una conclusión sería que el escalar muestra esas propiedades.

⁴También se encuentran en la hoja de cálculo en apéndice D.



Escalar de Curvatura Gas Ideal de Fermi-Dirac

Figura 4.1: Escalar de curvatura de un gas ideal de Fermi-Dirac. Observamos que el escalar no presenta ningún tipo de divergencia.

Para el gas ideal de Bose-Einstein presentamos una gráfica del escalar de curvatura. La forma de la métrica se puede observar en el apéndice D, es considerablemente más grande que la del gas ideal de Fermi y más complicada. Lo anterior se debe a que para el gas ideal de Bose, tenemos un término extra, que corresponde a la contribución del estado base. Como se estudió en capítulo 2 el término que corresponde a $\varepsilon = 0$ juega un papel crucial en el fenómeno de la condensación de Bose-Einstein. En este caso utilizamos el potencial natural del ensamble gran canónico, a diferencia del trabajo realizado en [40]. Observamos en la figura 4.2 que el escalar diverge para valores del potencial químico que se acercan a cero, esto es precisamente el valor para el cual ocurre la condensación de Bose-Einstein, lo cuál es equivalente a fugacidad tendiendo a uno.



Figura 4.2: Escalar de curvatura de un gas ideal de Bose-Einstein. Observamos que el escalar diverge para valores del potencial químico que están cercanos a cero, lo cuál coincide con la condensación de Bose-Einstein.

4.2.5. Resultados GTD del Gas Ideal de Gentile.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para el escalar de curvatura del gas ideal de Gentile, para p = 1,1000. ⁵ En este caso la métrica que se utilizó fue g_3 como se muestra en la sección anterior.



Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile Límite de Fermi-Dirac, p=1

Figura 4.3: Escalar de curvatura gas de Gentile, p=1

En la figura 4.4 se observa que el escalar diverge en un intervalo para el potencial químico entre (-367, -350). Este comportamiento se repite en las demás gráficas del

⁵Las gráficas para todos los casos p = 1, 10, 100, 10000, 1000000, que corresponden al límite del gas ideal de Fermi, gas ideal de Gentile y gas ideal de Bose respectivamente se encuentran en el apéndice E.



Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile, p=1000

Figura 4.4: Escalar de curvatura gas de Gentile, p=1000

escalar de curvatura para diferentes casos del parámetro p. En la figura 4.3 se observa un comportamiento del escalar de curvatura sin divergencias o discontinuidades, lo cuál está de acuerdo con lo que se espera para un gas ideal de Fermi. Al analizar los otros casos, ver apéndice E, se observa que el escalar comienza a cambiar de comportamiento mientras el parámetro se acerca más al límite de Bose-Einstein, matemáticamente corresponde a $p \to \infty$ pero en el caso numérico se ha tomado el límite como $p \to 1000000$. La precisión de los valores a graficar depende del poder de cómputo y la epsilón machine de la computadora.

En figura 4.6 y figura 4.5 se observan dos gráficas comparando el comportamiento

del escalar de curvatura para el gas ideal de Gentile y el gas ideal de Fermi-Dirac así como para el gas ideal de Gentile y el gas ideal de Bose-Einstein. Se puede concluir que los límites son correctos y el comportamiento del escalar es el mismo. El desplazamiento del escalar de Gentile en cada gráfica se debe a la optimización de los cálculos analíticos al evaluar las funciones polilogaritmo y los valores de p, estamos trabajando para poder obtener expresiones más detalladas que permitan empatar todas las gráficas en los límites correspondientes pero hasta el momento no se ha encontrado una manera de hacerlo. Sin embargo el comportamiento en los intervalos y límites nos indica que utilizando GTD podemos extraer la información física del sistema en cuestión y analizar su comportamiento, es decir el escalar de curvatura codifica de manera exitosa la naturaleza de las partículas.

En el caso de figura 4.6 se observa como el escalar diverge al acercarse al valor u = 0, lo cuál se esperaba debido a la condensación de Bose-Einstein. Es de vital importancia poder recuperar este comportamiento y la transición de fase ya que en el campo experimental la condensación de Bose-Einstein es un fenómeno que se ha observado exitosamente y que la teoría predice. En el caso del gas ideal de Gentile, como discutimos en el capítulo 2 también se predice durante el estudio estadístico del sistema. Utilizando la GTD nuevamente podemos extraer información. Esto es valioso debido a que al estar trabajando con una estadística generalizada, los cálculos se hacen más complicados debido a las funciones que resultan de las integraciones correspondientes pero con nuestro formalismo podemos estudiar al gas ideal de Gentile utilizando sus propiedades geométricas, que como hemos mostrado, codifican la naturaleza de las partículas.

Los resultados para las métricas g_1 y g_2 se muestran en apéndice E. El análisis de estos resultados es parte del trabajo a futuro. La cuasi-homogeneidad del gran potencial presentó problemas para estas dos métricas. Aún así mostramos los resultados junto con cuatro gráficas del escalar de curvatura.



Escalar de Curvatura del Gas Ideal de Gentile y del Gas Ideal de Fermi-Dirac

Figura 4.5: Comparación escalar de curvatura del gas ideal de Gentile (p=1) y del gas ideal de Fermi-Dirac.



Escalar de Curvatura del Gas Ideal de Gentile y del Gas Ideal de Bose-Einstein

Figura 4.6: Comparación escalar de curvatura del gas ideal de Gentile (p=1000000) y del gas ideal de Bose-Einstein.

Capítulo 5

Conclusiones y metas a futuro.

5.1. Conclusiones

- Durante la realización del presente trabajo de investigación se encontraron resultados que ayudan a justificar el uso de la GTD como herramienta para analizar sistemas de partículas idénticas, en este caso, los gases ideales de Bose-Einstein, Fermi-Dirac y Gentile. Los primeros dos fueron tratados en diferentes límites físicos. El primer límite, el límite clásico, nos mostró que tomando las primeras dos desviaciones del gas ideal clásico para estos gases se comenzaban a observar efectos debidos a la naturaleza cuántica de los bosones y fermiones. En el siguiente caso, solamente utilizamos los valores de la fugacidad permitidos para cada gas y su potencial termodinámico natural, el gran potencial. Aquí es importante resaltar que obtuvimos el comportamiento deseado para los valores del potencial químico cercanos a cero, o de manera equivalente, la fugacidad cercana a uno. En figura 4.6 se observa la divergencia correspondiente, en el marco de la GTD, a la condensación de Bose-Einstein. Analizar estos dos casos de esta manera fue necesario para hacer una comparación directa con la parte referente al gas ideal de Gentile.
- Para el gas ideal de Gentile obtuvimos su función de gran partición así como su energía interna y número de partículas. La estadística de Gentile es una de las generalizaciones de las estadísticas de Bose-Einstein y de Fermi-Dirac, en este trabajo realizamos un primer acercamiento a su análisis utilizando Geometrotermodinámica.
- El valor del parámetro p, que controla el límite en el que se encuentra el sistema, es de gran importancia tanto para las propiedades físicas como para las geométricas. En las gráficas que presentamos y en apéndice E podemos observar que su comportamiento es muy sensible al valor de p y la presencia de los polilogaritmos en términos de ese parámetro deben tratarse con extremo cuidado. Aún así logramos analizar al sistema para varios valores de p, observamos como cambia el escalar de curvatura desde el límite de Fermi-Dirac al comportamiento intermedio hasta pasar al límite de Bose-Einstein. En este último límite recuperamos el comportamiento para la condensación de Bose-Einstein. Al hacer la comparación entre lo casos exactos y los casos límite obtuvimos gráficas con el mismo comportamiento y forma pero con un desplazamiento debido a los cálculos analíticos y a la precisión de los valores al graficar.
- Acerca de las condiciones para singularidades de curvatura, podemos concluir que al utilizar el gran potencial, que es un función cuasi-homogénea, las simplificaciones correspondiente a sistemas de dos dimensiones no son directas. Esto no afecta los resultados, al final calculamos todos los resultados sin utilizarlas directamente para g_3 . Pero el análisis para g_1 y g_2 no ha sido completado. Con todo esto podemos decir que la cuasi-homogéneidad pone en evidencia que aunque el gran potencial sea el potencial termodinámico natural para los gases ideales cuánticos, se debe utilizar con cuidado, sin embargo gracias GTD podemos utilizarlo en g_3 y estudiar nuestro sistema.

5.2. Metas a futuro

Tratamos una de las generalizaciones de las estadísticas de Bose-Einstein y Fermi-Dirac, existen otras [26, 36]. Una del mas metas a futuro es estudiar gases que obedezcan esas estadísticas y recuperar de manera correcta los límites de Bose y Fermi. En particular, la condensación de Bose-Einstein, tiene extrema importancia como transición de fase y singularidad de curvatura. Experimentalmente es uno de los fenómenos más interesantes que se han realizado en el laboratorio. Pero no es la única transición de fase, por ejemplo, como mencionamos en capítulo 1, en la vida cotidiana observamos y experimentamos todo tipo de fenómenos de transición de fase, congelando agua o la condensación del agua. También existe la superfluidez. El problema qe hemos encontrado desde los trabajos de licenciatura es que utilizando la manera en la que se clasifican las transiciones de manera clásica, la condensación de Bose-Einstein no tiene una clasificación consistente [4, 23, 19], una de las metas más a futuro más importantes, es construir un esquema de clasificación utilizando GTD. Con esto podríamos estudiar y analizar a las transiciones de fase en sistemas cuánticos utilizando una herramienta que es invariante y consistente, la Geometría, en nuestro caso utilizando GTD. Finalmente se ha quedado como trabajo y meta a futuro el estudio de los gases de ese trabajo de investigación en dos dimensiones, cálculos preliminares se pueden consultar en apéndice F.

Las dificultades conceptuales y de cálculo que se presentaron probaron ser una herramienta para poder estudiar sistemas de gases ideales cuánticos con un enfoque geométrico. Esto nos abre la puerta a posibilidades para empezar a estudiar e investigar gases que ya no sean ideales, en particular para un gas de Bose-Einstein con interacción, esto acercaría más a la Geometría Diferencial y a la GTD a describir lo que se observa experimentalmente. Concluimos que hemos mostrado que elegir las herramientas de la Geometría Diferencial para estudiar sistemas físicos simplifica los análisis, codifica comportamientos físicos y proporciona una manera invariante y consistente para estudiar fenómenos que se observan en el laboratorio.



Conclusiones y metas a futuro.

Apéndice A

Artículo

Anexo en donde se encuentra adjunto el artículo: Ideal quantum gases: A geometrothermodynamic approach. Publicado el 16 de Abril del 2023 en la revista Journal og Geometry and Physics. Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Geometry and Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/geomphys

Ideal quantum gases: A geometrothermodynamic approach

Sasha A. Zaldivar^a, Hernando Quevedo^{a,b,*}

^a Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 70543, México, DF 04510, Mexico ^b Dipartimento di Fisica and ICRA, Università di Roma "La Sapienza", Piazzale Aldo Moro 5, I-00185 Roma, Italy

ARTICLE INFO

Article history: Received 29 December 2022 Accepted 9 April 2023 Available online 17 April 2023

Keywords: Geometrothermodynamics Ideal quantum gases Bose-Einstein condensation

ABSTRACT

We derive the fundamental thermodynamic equation for Fermi-Dirac and Bose-Einstein quantum gases, which contains the first order contribution due to the quantum nature of the gas particles. Then, we analyze the fundamental equation in the context of geometrothermodynamics. Although the corresponding Hamiltonian does not contain a potential, indicating the lack of classical thermodynamic interaction, we show that the curvature of the equilibrium space is non-zero and can be interpreted as a measure of the effective quantum interaction between the gas particles. In the limiting case of a classical Boltzmann gas, we show that the equilibrium space becomes flat, as expected from the physical viewpoint. In addition, we derive a thermodynamic fundamental equation for the Bose-Einstein condensation and, using the Ehrenfest scheme, we show that it can be considered as a first order phase transition which in the equilibrium space corresponds to a curvature singularity. This result indicates that the curvature of the equilibrium space can be used to measure in an invariant way the thermodynamic interaction in classical and quantum ideal gases.

© 2023 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

In 1915, Einstein formulated the final version of the gravitational field equations that were based upon the astonishing principle "gravitational interaction = curvature". In this case, the curvature is the Riemannian curvature of the 4-dimensional spacetime. This principle has been generalized to include all the four interactions known in nature (see, for instance, Ref. [4]). Indeed, Yang and Mills [22] demonstrated in 1953 that the field strength (Faraday tensor) of the electromagnetic field can be interpreted as the curvature of a principal fiber bundle, with the Minkowski spacetime as the base manifold and the symmetry group U(1) as the standard fiber. Today, it is well known [4] that the weak interaction and the strong interaction can be described by the curvature of a principal fiber bundle with standard fiber SU(2) and SU(3), respectively. In this sense, we can say that all the field theories have a well-formulated geometric description.

On the other hand, Riemannian geometry has been also applied in statistical physics and thermodynamics. To this end, one can consider the equilibrium states of the thermodynamic system as points of an abstract space (the equilibrium space). Then, one of the goals of applying differential geometry in thermodynamics is to interpret the curvature of the equilibrium space as a measure of the thermodynamic interaction. In 1945, Rao [17] introduced in the equilibrium space a Riemannian metric whose components in local coordinates coincide with the Fisher information matrix. Rao's original work has been followed up and extended by a large number of authors (see, e.g., [1] for a review). On the other hand, Riemannian geometry

* Corresponding author.

https://doi.org/10.1016/j.geomphys.2023.104837 0393-0440/© 2023 Elsevier B.V. All rights reserved.







E-mail addresses: sashatf141@gmail.com (S.A. Zaldivar), quevedo@nucleares.unam.mx (H. Quevedo).

in the space of equilibrium states was introduced by Weinhold [21] and Ruppeiner [18,19], who defined metric structures as the Hessian of the internal energy and (minus) the entropy, respectively.

Geometrothermodynamics (GTD) [12] was proposed recently to take into account the invariance of classical thermodynamics under a change of thermodynamic potential [3], a property which is not shared by Hessian metrics. In contrast to other geometric approaches, GTD resembles the approach of field theories in the sense that the symmetry of the theory plays a fundamental role in its geometric description. Since different thermodynamic potentials are related by means of Legendre transformations [2], the formalism of GTD makes use of the Riemannian contact structure of the thermodynamic phase space [6] to handle the interchanges of thermodynamic potentials as coordinate transformations on the phase space. The equilibrium space can then be considered as a particular subspace of the phase space. As a result, the formalism of GTD uses as starting point a Legendre invariant metric of the phase space which induces a metric in the equilibrium space whose curvature should describe the thermodynamic interaction. In the case of a classical ideal gas, for which in statistical physics the corresponding Hamiltonian does not contain a potential term that could represent any interaction between the gas particles [7], no thermodynamic interaction is present and one would expect that the corresponding equilibrium space be flat. In fact, this physical condition has been used to fix the metric of the phase space [12]. The flat equilibrium manifold of a classical ideal gas has been investigated in detail in [16]. In particular, it was found that there exists a deep relationship between geodesics and quasi-static processes, which gives rise to a relativistic like structure of the equilibrium manifold.

In the case of ideal quantum gases, as described in statistical physics, the Hamiltonian also does not contain a potential term and the gas particles are assumed to have no interaction between them [5,7]. This means that from the point of view of the Hamiltonian approach a quantum gas is a system without thermodynamic interaction. One would then expect that the corresponding equilibrium manifold is also flat due to the lack of interaction. Nevertheless, we know that the physical properties of ideal quantum gases are different from those of a classical ideal gas. The question arises whether our geometric approach is able to take into account those physical differences in a consistent manner. The main purpose of the present work is to show that in the framework of GTD the ideal quantum gases are represented by non-flat equilibrium manifolds, taking into account the quantum nature of the gas particles. This we show in the case of Fermi-Dirac and Bose-Einstein quantum gases. Moreover, we analyze the limiting case of Bose-Einstein condensation and show that it can be interpreted in the Ehrenfest scheme and in GTD as a first order phase transition.

This paper is organized as follows. In Sec. 2, we review the main aspects of GTD which are necessary in order to take into account the Legendre invariance of classical thermodynamics. In Sec. 3, we analyze ideal quantum gases satisfying the Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics and derive the corresponding fundamental equation, which is necessary to carry out the geometrothermodynamic approach. In Sec. 4, we investigate the thermodynamic and geometrothermodynamic properties of Bose-Einstein condensates. Finally, in Sec. 5, we discuss our results.

2. Review of geometrothermodynamics

The starting point of the GTD formalism is the thermodynamic phase space \mathcal{T} which is constructed as follows. A thermodynamic system with *n* degrees of freedom is described by a set of *n* extensive variables, E^a , *n* intensive variables, I^a (a = 1, ..., n), and a thermodynamic potential, Φ . Let us consider $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ as the coordinates of the (2n + 1)-dimensional space \mathcal{T} , where E^a and I^a are interpreted as independent variables. The phase space is necessary in GTD in order to treat the Legendre transformations of classical thermodynamics as a change of coordinates. Formally, a Legendre transformation is defined as [2] (we assume throughout Einstein's summation convention for repeated indices)

$$\{Z^A\} \to \{\tilde{Z}^A\} = \{\tilde{\Phi}, \tilde{E}^a, \tilde{I}^a\}$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l, \quad E^i = -\tilde{I}^i, E^j = \tilde{E}^j, \ I^i = \tilde{E}^i, \ I^j = \tilde{I}^j,$$

$$(1)$$

where $i \cup j$ is any disjoint decomposition of the set of indices $\{1, ..., n\}$, and k, l = 1, ..., i. In particular, for $i = \emptyset$ a Legendre transformation reduces to the identity transformation, for any $j \neq \emptyset$ we obtain partial Legendre transformations, and for $i = \{1, ..., n\}$, i.e. $j = \emptyset$, Eq. (2) defines a total Legendre transformation.

The phase space \mathcal{T} is endowed with a family of tangent hyperplanes (contact structure) defined by the fundamental 1-form Θ that satisfies the non-integrability condition [6]

$$\Theta \wedge (d\Theta)^n \neq 0. \tag{3}$$

According to the Darboux theorem [6], if we use the coordinates $\{Z^A\}$ of \mathcal{T} , the fundamental 1-form Θ can be written canonically as

$$\Theta = d\Phi - I_a dE^a , \quad I_a = \delta_{ab} I^b . \tag{4}$$

If we apply a Legendre transformation to Θ , the new 1-form $\tilde{\Theta}$ in coordinates $\{\tilde{Z}^A\}$ reads

$$\tilde{\Theta} = d\tilde{\Phi} - \tilde{I}_a d\tilde{E}^a \,. \tag{5}$$

In this sense, it is said that the contact 1-form Θ is invariant with respect to Legendre transformations.

In classical thermodynamics, a thermodynamic system is described equivalently either by a set of equations of state $I^a = I^a(E^b)$ or by a fundamental equation $\Phi = \Phi(E^a)$. In GTD, it is convenient to use the second option and we assume that for any thermodynamic system the fundamental equation is known. Furthermore, the specification of a particular system is realized in GTD by an embedding φ of an *n*-dimensional submanifold $\mathcal{E} \in \mathcal{T}$ into the phase space \mathcal{T} given by

$$\varphi: \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{T}, \tag{6}$$

or, in coordinates,

$$\varphi: \{E^a\} \longrightarrow \{\Phi(E^a), E^a, I^b(E^a)\}.$$
⁽⁷⁾

Accordingly, the space \mathcal{E} is determined through the embedding (6), which is equivalent to specifying the fundamental equation of the system $\Phi(E^a)$. To complete the GTD scheme, it is necessary to incorporate the relations of standard equilibrium thermodynamics into the definition of the space \mathcal{E} . This can be done by demanding that the embedding (6) satisfies the condition

$$\varphi^*(\Theta) = 0 , \tag{8}$$

where φ^* is the pullback of φ . In coordinates, it takes the form

$$\varphi^*(\Theta) = \varphi^* \left(d\Phi - I_a dE^a \right) = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial E^a} - I_a \right) dE^a = 0.$$
(9)

Then, it follows that

,

$$d\Phi = I_a dE^a, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial E^a} = I_a , \qquad (10)$$

which is the first law of thermodynamics. The manifold \mathcal{E} is called the equilibrium space. Moreover, it is demanded that the fundamental equation $\Phi = \Phi(E^a)$ satisfies all the remaining laws of equilibrium thermodynamics.

The next step to construct the formalism of GTD consists in equipping the phase space with a metric *G*, which must be invariant with respect to Legendre transformations. This is necessary in order to incorporate the Legendre invariance of classical thermodynamics in the entire geometric structure of GTD. Consequently, the triad (\mathcal{T}, Θ, G) becomes a Riemannian contact manifold that is also Legendre invariant. It turns out that Legendre invariant metrics $G = G_{AB} dZ^A dZ^B$ in \mathcal{T} can be split into three different classes that can be written as

$$G'_{I} = (d\Phi - I_a dE^a)^2 + (\xi_{ab} E^a I^b) (\delta_{cd} dE^c dI^d) , \qquad (11)$$

$$G^{II} = (d\Phi - I_a dE^a)^2 + (\xi_{ab} E^a I^b) (\eta_{cd} dE^c dI^d) , \qquad (12)$$

$$G^{III} = (d\Phi - I_a dE^a)^2 + \sum_{a=1}^n E_a I_a dE^a dI^a ,$$
(13)

where ξ_{ab} is a diagonal constant $(n \times n)$ -matrix, $\delta_{ab} = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$, and $\eta_{ab} = \text{diag}(-1, 1, \dots, 1)$. Moreover, G^I and G^{II} are invariant with respect to total Legendre transformations whereas G^{III} is also invariant under partial transformations.

One interesting feature of the formalism of GTD is that the equilibrium space \mathcal{E} can be endowed with a metric g in a canonical way, namely, by means of the pullback $\varphi^*(G) = g$ so that g inherits the properties of G. Then, from Eqs. (11), (12), and (13), we obtain

$$g_{ab}^{I} = \beta_{\Phi} \Phi \delta_{a}^{\ c} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial F^{b} \partial F^{c}},\tag{14}$$

$$g_{ab}^{II} = \beta_{\Phi} \Phi \eta_a^c \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c},\tag{15}$$

$$g^{III} = \sum_{a=1}^{n} \left(\delta_{ad} E^{d} \frac{\partial \Phi}{\partial E^{a}} \right) \delta^{ab} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial E^{b} \partial E^{c}} dE^{a} dE^{c} , \qquad (16)$$

respectively, where $\delta_a^c = \text{diag}(1, \dots, 1)$, $\eta_a^c = \text{diag}(-1, 1, \dots, 1)$. The constant β_{Φ} does not affect the geometric properties of *g*, and represents the degree of homogeneity of the thermodynamic potential Φ [13]. In obtaining the above metrics we have used the first law of thermodynamics (10) and the Euler identity

$$\beta_{ab}I^{a}E^{b} = \beta_{\Phi}\Phi \,, \tag{17}$$

where the coefficients $\beta_{ab} = \xi_{ab} = \text{diag}(\beta_1, \beta_2, ..., \beta_n)$ are determined by the degrees of (quasi)homogeneity of the variables E^a , entering the fundamental equation $\Phi = \Phi(E^a)$, i.e., the constants β_a that satisfy the quasi-homogeneity condition $\Phi(\lambda^{\beta_a}E^a) = \lambda^{\beta_{\Phi}}\Phi(E^a)$.

For later use consider the case of a system with two degrees of freedom, n = 2. Then, $\Phi = \Phi(E^1, E^2)$ and

$$g^{I} = \Phi \left[\Phi_{,11} (dE^{1})^{2} + 2\Phi_{,12} dE^{1} dE^{2} + \Phi_{,22} (dE^{2})^{2} \right],$$
(18)

$$g^{II} = \Phi \left[-\Phi_{,11} (dE^1)^2 + \Phi_{,22} (dE^2)^2 \right], \tag{19}$$

$$g^{III} = E^{1}\Phi_{,1}\Phi_{,11}(dE^{1})^{2} + \left(E^{1}\Phi_{,1} + E^{2}\Phi_{,2}\right)\Phi_{,12}dE^{1}dE^{2} + E^{2}\Phi_{,2}\Phi_{,22}(dE^{2})^{2}, \qquad (20)$$

where $\phi_{,a} = \frac{\partial \phi}{\partial E^a}$, and we have set $\beta_{\Phi} = 1$, without loss of generality. One of the goals of GTD is to represent phase transitions as singularities of the equilibrium space. The idea is simple. During a phase transition the laws of equilibrium thermodynamics break down and non-equilibrium effects appear that cannot be considered with the standard formalism. A curvature singularity represents a location where the formalism of classical differential geometry breaks down. Therefore, we expect intuitively a connection between curvature singularities and phase transitions. This has been shown explicitly in the case of 2-dimensional GTD by using Euler's identity (17). In fact, it turns out that the curvature singularities of the above metrics are determined by the conditions [14,15]

$$I: \quad \Phi_{,11}\Phi_{,22} - (\Phi_{,12})^2 = 0, \tag{21}$$

$$II: \quad \Phi_{,11}\Phi_{,22} = 0 \,, \tag{22}$$

$$III: \quad \Phi_{,12} = 0.$$
 (23)

Condition *I* corresponds to the stability condition in classical thermodynamics, and is usually associated with first order phase transitions [3]. Conditions *II* and *III* involve the second order derivatives of the thermodynamic potential Φ and usually are associated with second order phase transitions, according to Ehrenfest's scheme [3].

3. Fermi-Dirac and Bose-Einstein ideal quantum gases

Let us consider an ideal gas consisting of *N* non-interacting identical particles, with mass *m* and momentum p_i , inside a 3-dimensional box of volume *V*. According to the standard approach of statistical physics, this system can be described by the Hamiltonian [7]

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \,. \tag{24}$$

If we take into account the physical nature of the particles with a maximum occupation number of one or infinity, the ideal gas can be either a Fermi gas, a Bose gas or a Boltzmann gas. In the first two cases, the quantum nature of the particles (fermions or bosons) is the main characteristic of the system, whereas the Boltzmann gas is composed of classical identical particles. From a statistical point of view, the fact that no potential is present in the Hamiltonian (24) indicates the lack of thermodynamic interaction.

The purpose of this section is to express the thermodynamic properties of the ideal quantum gases in such a representation that it can be used in the context of GTD. Although there are several possibilities to derive the statistical model from which the thermodynamic limit could be computed, in the case of spin-less quantum particles, it is convenient to use the grand partition function [7]

$$\mathcal{Q}(V,T,\mu) = \prod_{p} \left[1 + \epsilon e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)} \right]^{\epsilon}, \quad \beta = \frac{1}{k_{\scriptscriptstyle B}T}, \quad \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}, \quad \epsilon = \pm 1$$
(25)

where $k_{\rm B}$ is the Boltzmann constant, *T* is the temperature, *V* the volume, and μ represents the chemical potential. The constant ϵ indicates the type of gas, with $\epsilon = +1$ for a Fermi gas and $\epsilon = -1$ for a Bose gas. The main thermodynamic quantities can be obtained in a straightforward manner from the grand partition function as

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \mathcal{Q} , \quad N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} \ln \mathcal{Q} , \qquad (26)$$

where U is the internal energy and N is the particle number. In the case of quantum gases, we obtain

$$U = \sum_{p} \frac{\varepsilon_{p}}{e^{\beta(\varepsilon_{p}-\mu)} + \epsilon}, \quad N = \sum_{p} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{p}-\mu)} + \epsilon}.$$
(27)

Notice that in this statistical representation the difference between Bose and Fermi gases is formally contained in the parameter ϵ only. We will see that this particularity holds also in the thermodynamic limit.

3.1. The fundamental equation

There are several equivalent ways to find the fundamental equation of the ideal quantum gases in the thermodynamic limit. In order to compare our results with the well-known Sackur-Tetrode equation for the entropy of a classical ideal gas, we choose the entropy S = S(U, V, N) as the thermodynamic potential that determines the fundamental equation. To find the entropy it is convenient to use the free energy which is related to the entropy through the Legendre transformation F = U - TS. Moreover, for the free energy we can use the expression $F = -PV + \mu N$ together with the standard equations of state $PV = Nk_BT$ and $U = \frac{3}{2}Nk_BT$ so that we finally obtain

$$S = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{3} U - \mu N \right) \,. \tag{28}$$

To proceed with the evaluation of this equation we need the expressions for U and N in the appropriate limit.

In the thermodynamic limit $V \to \infty$, the possible values of *p* represent a continuum, and so we can replace the sum over all values of *p* by an integral, i.e., [7]

$$\sum_{p} \rightarrow \frac{4\pi V}{h^3} \int p^2 dp = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon .$$
⁽²⁹⁾

Then, the energy and particle number (27) become

$$U = \frac{3}{2} k_{B} T V \left(\frac{m k_{B} T}{2\pi \hbar^{2}}\right)^{3/2} h_{\frac{5}{2}}^{\epsilon}(z) , \quad N = V \left(\frac{m k_{B} T}{2\pi \hbar^{2}}\right)^{3/2} h_{\frac{3}{2}}^{\epsilon}(z) , \tag{30}$$

respectively, where we have introduced the new variable $x = \beta \varepsilon$ and $z = e^{\beta \mu}$ is the fugacity. Moreover, we have introduced the notation

$$h_n^{\epsilon}(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x + \epsilon} dx$$
(31)

for the integrals that appear in the expressions for *U* and *N*. In the literature, it is common to use the notations $h_n^+(z) = f_n(z)$ and $h_n^-(z) = g_n(z)$ which are known as the Fermi and Bose integrals, respectively. The index *n* is known as the integral order which depends on the dimension of the system as follows from Eq. (30).

The integral $h_n^{\epsilon}(z)$ for $z \ll 1$ can be represented as the series

$$h_n^{\epsilon}(z) = \sum_{j=1}^{\infty} (-\epsilon)^{j+1} \frac{z^j}{j^n}$$
(32)

which is useful for concrete calculations. In fact, the limit of small fugacity is considered as the classical limit of quantum gases in which we obtain from Eq. (30)

$$U = \frac{3}{2}k_{B}TV\left(\frac{mk_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left(z - \epsilon\frac{z^{2}}{2^{5/2}}\right), \quad N = V\left(\frac{mk_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left(z - \epsilon\frac{z^{2}}{2^{3/2}}\right),$$
(33)

where only quadratic terms in *z* have been taken into account. We now use the expression for *N* to express the fugacity in terms of N/V. To this end, we replace the truncated series $z = z_1(N/V) + z_2(N/V)^2$ into the expression for *N* and compare the terms on both sides of the equation in such a way that the constants z_1 and z_2 can be determined. In this manner, we obtain

$$z = \frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{_B}T}\right)^{3/2} + \epsilon \frac{N^2}{2^{3/2}V^2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{_B}T}\right)^3.$$
 (34)

Notice that the condition of the classical limit z << 1 implies that

$$\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{_B}T}\right)^{3/2} << 1.$$
(35)

The expression (34) for the fugacity can now be used to eliminate *z* from the internal energy *U* and to evaluate the chemical potential $\mu = k_B T \ln z$, which can then be replaced into the expression for the entropy (28). Then, we obtain

$$S = \frac{5}{2} N k_{B} - N k_{B} \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi \hbar^{2}}{m k_{B} T} \right)^{3/2} \right] + \epsilon \frac{N^{2} k_{B}}{2^{7/2} V} \left(\frac{2\pi \hbar^{2}}{m k_{B} T} \right)^{3/2} , \qquad (36)$$

where we have considered only the leading terms in the limit of large temperature. This is the fundamental equation for ideal quantum gases. Notice that we are using the temperature T instead of the internal energy U in the fundamental equation (36). One can, of course, use the corresponding equation of state in order to replace T by U so that the entropy will depend on extensive variables only. However, for the geometric analysis we will perform in the following section, the use of T or U is not relevant because the equation of state that relates T and U can be considered as a diffeomorphism, which does not affect the geometric properties of the underlying manifold. We will use the temperature as thermodynamic variable because it allows us to easily handle the physical limits of the fundamental equation (36).

The Boltzmann limit of the fundamental equation (36) corresponds to the limit of high temperature ($T \rightarrow \infty$), i.e.,

$$S = \frac{5}{2}Nk_{B} - Nk_{B}\ln\left[\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^{2}}{mk_{B}T}\right)^{3/2}\right],$$
(37)

which is equivalent to the Sackur-Tetrode equation for the classical ideal gas.

The fundamental equation (36) for ideal quantum gases indicates that the new term proportional to ϵ is the result of the quantum nature of the system. So, it can be interpreted as the term responsible for the thermodynamic quantum interaction and, for large values of the temperature, it represents a perturbation of the classical Boltzmann gas. In this sense, from a thermodynamic point of view, we can consider a quantum gase as a perturbation of a classical gas. This interpretation is consistent with the virial expansion approach of quantum gases as presented, for instance, in [7]. We will show in the next section that the geometrothermodynamic approach reinforces this interpretation.

3.2. Geometrothermodynamic analysis

According to the GTD approach presented in Sec. 2, to find the metric of the equilibrium manifold it is enough to have the explicit expression of the fundamental equation. This has been done in the previous section. To calculate the metric it is convenient to choose geometric units with $\hbar = 1 = k_{_B}$. In addition, we can choose $m = 2\pi$ without loss of generality. Then, the fundamental equation (36) can be expressed as

$$S = S_0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \epsilon \frac{bN^2}{VT^{3/2}},$$
(38)

where $b = 1/2^{7/2}$, and S_0 can be chosen as an additive constant under the condition that the total number of particles N is a constant. This means that we will consider an isolated system with a fixed particle number, and the entropy depends explicitly on V and T only.

To calculate the metrics (18)-(20) of the equilibrium manifold \mathcal{E} with the above fundamental equation we must identify *S* with the thermodynamic potential Φ and the coordinates of \mathcal{E} as $E^a = (T, V)$. Then, we obtain

$$g^{I} = SN \left[\frac{3}{2} \left(-1 + \frac{5}{2} \frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}} \right) \frac{dT^{2}}{T^{2}} + 3 \frac{\epsilon bN}{V^{2}T^{5/2}} dV dT + \left(-1 + \frac{2\epsilon bN}{VT^{3/2}} \right) \frac{dV^{2}}{V^{2}} \right],$$
(39)

$$g^{II} = SN \left[-\frac{3}{2} \left(-1 + \frac{5}{2} \frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}} \right) \frac{dT^2}{T^2} + \left(-1 + \frac{2\epsilon bN}{VT^{3/2}} \right) \frac{dV^2}{V^2} \right],\tag{40}$$

$$g^{III} = N^2 \left(\frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}} - 1\right) \left[\frac{9}{4} \left(1 - \frac{5}{2} \frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}}\right) \frac{dT^2}{T^2} - \frac{15}{4} \frac{\epsilon bN}{V^2 T^{5/2}} dT dV + \left(1 - 2 \frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}}\right) \frac{dV^2}{V^2}\right].$$
(41)

The signature of these metrics is not fixed, but depends on the choice of ϵ , indicating that the quantum nature of the particles can drastically change the geometric properties of the corresponding equilibrium manifold. The determinant of the metric can also be zero for certain combinations of the values of V and T. This can be interpreted as a violation of the second law of thermodynamics at which the thermodynamic and geometrothermodynamic approaches break down [16].

It is straightforward to show that in general the curvature of all three metrics is different from zero, indicating the presence of non-trivial thermodynamic interaction. Moreover, a computation of the conditions for the existence of curvature singularities (21)-(23) leads to

$$I: 7\frac{\epsilon^2 b^2 N^2}{V^2 T^3} - 9\frac{\epsilon N}{V T^{3/2}} + 2 = 0,$$
(42)

$$II: \left(-1 + \frac{5}{2}\frac{\epsilon bN}{VT^{3/2}}\right) \left(-1 + \frac{2\epsilon bN}{VT^{3/2}}\right) = 0, \qquad (43)$$

$$III: \frac{\epsilon b N^2}{V^2 T^{5/2}} = 0.$$
(44)

Only the conditions I and II have non-trivial solutions, namely,

$$\frac{bN}{VT^{3/2}} = 1, \frac{2}{7}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}.$$
(45)

However, considering the value of the constant $b = 1/2^{7/2}$, it can be shown that all the roots are for values within the range

$$\frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{_B}T}\right)^{3/2} = \frac{N}{VT^{3/2}} > 1 , \qquad (46)$$

a range that obviously contradicts the condition of the classical limit (35) which was assumed to determine the fundamental equation (38). We conclude that all the curvature singularities are non physical. Accordingly, there are no phase transitions in the thermodynamic limit of quantum ideal gases, a result that is in agreement with the one obtained in classical thermodynamics [7].

We now consider the limit of the Boltzmann ideal gas which is described by the fundamental equation (37). Using geometric units and $m = 2\pi$, we obtain

$$S = S_0 - \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) \,. \tag{47}$$

If we now consider, for instance, the metric (41) of the equilibrium manifold reduces to

$$g^{III} = -N^2 \left(\frac{9}{4} \frac{dT^2}{T^2} + \frac{dV^2}{V^2}\right).$$
(48)

It is then straightforward to show that the corresponding curvature tensor vanishes identically. This can also be seen by introducing the new coordinates $d\eta = \frac{3dT}{2T}$ and $d\xi = \frac{dV}{V}$ so that the metric (48) acquires a Cartesian like structure, i.e., $g^{III} = -d\eta^2 - d\xi^2$ whose curvature is obviously zero.

In GTD, the invariant curvature is interpreted as a manifestation of the intrinsic thermodynamic interaction between the particles of the system. We have shown that the curvature is zero for the Boltzmann gas and non-zero for the Fermi and Bose quantum gases. In the case of the Boltzmann gas, this in agreement with the statistical approach since the corresponding Hamiltonian (24) has no potential term. In the case of the Fermi and Bose ideal gases, however, the potential term is still zero, but the curvature does not vanish, indicating the presence of thermodynamic interaction. On the other hand, from a physical point of view one expects a detectable difference between classical and quantum ideal gases. We have shown here that the curvature of the equilibrium space is able to take into account this difference. The non-zero curvature represents an "effective" thermodynamic interaction which is generated by the quantum nature of the gas particles.

4. Bose-Einstein condensation

According to Eq. (30), the total number of particles of a Bose-Einstein ideal gas

$$N = V \left(\frac{mk_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2} g_{\frac{3}{2}}(z) , \quad z = e^{\frac{\mu}{k_{B}T}}$$
(49)

depends on the temperature. Since the Bose integral $g_{\frac{3}{2}}(z)$ has its maximum value at z = 1, the maximum particle number at a fixed value of the temperature, $T = T_c$, is reached for $\mu \to 0$, and is given by the expression

$$N_{max} = V \left(\frac{mk_{\rm B}T_{\rm c}}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \zeta , \qquad (50)$$

where $\zeta = g_{\frac{3}{2}}(1) \approx 2.61$. In the same manner, for a given particle number *N* we can define the critical temperature T_c as [7]

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{V\zeta}\right)^{2/3} \,, \tag{51}$$

so that N_{max} is reached for $T < T_c$ and $\mu \rightarrow 0$. It turns out that in this limit, a finite number of particles occupies the state with minimum energy $\varepsilon = 0$. This phenomenom is known as the Bose-Einstein condensation. This particular state can be considered as a mixture of two different phases, one phase contains all the particles with $\varepsilon = 0$ and the second phase with $\varepsilon \neq 0$. It is in this sense that the Bose-Einstein condensation can be considered as a phase transition; however, the order of the transition has not been fixed definitely. In fact, some authors [5] argue that it is a second order transition [10], but others [7] advocate for a first order phase transition by using a different approach. In this work, we will consider the Ehrenfest criterium to determine the order of a phase transition.



Fig. 1. Singularity of the first derivative of the thermodynamic potential *u* with respect to the chemical potential.

4.1. Geometrothermodynamic analysis

To establish the fundamental equation that governs the transition of a bosonic gas into a Bose-Einstein condensate, we must perform a different analysis. In fact, to find out the properties of the bosonic gas, in the last section we investigated the classical limit in which the fugacity is an infinitesimal quantity, z << 1. The condensation, instead, corresponds to small values of the chemical potential, i.e., $z \rightarrow 1$. Furthermore, it is not an easy task to handle this case analytically for particular thermodynamic potentials, like the entropy, in such a way that the Ehrenfest scheme can be applied. Indeed, following the standard procedures of statistical physics, it can be shown that the grand potential for a bosonic gas can be written as [7]

$$\Xi = -T^{5/2} V g_{\frac{5}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{T}} \right) \tag{52}$$

where for simplicity we set $k_B = 1$, $\hbar = 1$, and $m = 2\pi$. However, the difficulty of using this grand potential is that it does not lead to the appearance of condensation. To fix this problem, it is necessary to add the grand potential of the ground state

$$\Xi_0 = T \ln \left(1 - e^{\frac{\mu}{T}} \right) \,. \tag{53}$$

This is an *ad hoc* procedure that is physically well justified, but could lead to difficulties from a mathematical point of view. Indeed, it is easy to show that the grand potentials Ξ and Ξ_0 have different coefficients of quasi-homogeneity. Consequently, the sum $\Xi + \Xi_0$ is not well defined from the point of view of the properties of quasi-homogeneous functions. This is a problem for GTD. In fact, to derive the explicit form of the Legendre invariant metrics (18) and (19) and the singularity conditions (21)-(23) we have used the Euler identity (17), which explicitly depends on the coefficients of quasi-homogeneity of the function $\Phi(E^a)$. Therefore, to consider the effect of condensation we are not allowed to use results in which Euler's identity is involved, i.e., the metrics (18)-(19) and the singularity conditions (21)-(23). Consequently, we must use the metric g^{III} given explicitly in Eq. (20), and the thermodynamic potential corresponding to the grand potential $\Xi + \Xi_0$ has to be handled with care.

However, since we are interested in investigating the condensation in a geometric framework, and the results of GTD do not depend on the choice of thermodynamic potential, we choose the internal energy to study the condensation as a phase transition. In this case, the computations can be carried out in a simple manner [7]. According to (33), the internal energy per particle of a bosonic gas is

$$u = \frac{U}{N} = \frac{3}{2} k_B T \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(z)} .$$
(54)

This equation governs the dynamics of the gas for arbitrary values of *z*. We will therefore use it to investigate the dynamical behavior at the onset of the Bose-Einstein condensation.

To apply the Ehrenfest scheme, we compute the derivatives of the thermodynamic potential (54). Then, it is possible to show that the first derivative with respect to μ diverges as $\mu \rightarrow 0$. This behavior is illustrated in Fig. 1. Accordingly, we can conclude that there exists a first order phase transition as the chemical potential approaches zero.



Fig. 2. Singularity of the curvature scalar near the origin $\mu = 0$ for t = 1. Here we use the value $T_c = 1$ for simplicity.

We can now investigate the geometric properties of the equilibrium space. It is convenient to rewrite the thermodynamic potential (54) in terms of the critical temperature. To this end, in the definition of u we consider the maximum particle number, $u = U/N_{max}$, to obtain

$$u = \frac{3}{2\zeta} k_B \frac{T^{5/2}}{T_c^{3/2}} g_{\frac{5}{2}}(z) , \qquad (55)$$

which for convenience we rewrite as

$$u = \frac{3}{2\zeta} k_B T_C t^{5/2} g_{\frac{5}{2}}(z) , \quad z = e^{\frac{\mu}{k_B T_C t}} , \quad t = \frac{T}{T_C} .$$
(56)

This is the fundamental equation that describes the transition of a bosonic gas into a Bose-Einstein condensate in the limit $t \to 1$ and $\mu \to 0$. According to the results of GTD, for the calculation of the metric (20) of the equilibrium space, we identify u with the thermodynamic potential Φ and $E^a = (t, \mu)$. Then, a straightforward computation leads to the following metric components

$$g_{tt} = \frac{9}{32\zeta^2} \left(5T_c t g_{\frac{5}{2}} - 2\mu g_{\frac{3}{2}} \right) \left(15T_c^2 t^2 g_{\frac{5}{2}} - 12T_c t \mu g_{\frac{3}{2}} + 4\mu^2 g_{\frac{1}{2}} \right) , \tag{57}$$

$$g_{t\mu} = \frac{45}{32\zeta^2} t^2 g_{\frac{5}{2}} \left(3T_c t g_{\frac{3}{2}} - 2\mu g_{\frac{1}{2}} \right) , \tag{58}$$

$$g_{\mu\mu} = \frac{9}{4\zeta^2 T_c} g_{\frac{3}{2}} g_{\frac{1}{2}} , \qquad (59)$$

where for the sake of simplicity we set $k_B = 1$ and drop the argument of the Bose integral $g_n\left(e^{\frac{\mu}{L_c t}}\right)$. The corresponding curvature tensor can then be computed, but its final expression cannot be written in a compact form. Nevertheless, we performed a detailed numerical analysis of the behavior of the curvature scalar and found that there is a singularity in the limit t = 1 and $\mu \rightarrow 0$. Fig. 2 illustrates this behavior.

This result shows that the values at which the Bose-Einstein condensation takes place correspond to a curvature singularity of the respective equilibrium space.

5. Conclusions

In the present work, we analyzed the properties of the space of equilibrium states of the ideal quantum gases in the context of geometrothermodynamics. First, we derived the fundamental equations from which we can obtain all the thermodynamic properties of the gases. It was established that a Boltzmann gas, whose components are identical classical particles, possesses a flat equilibrium space, indicating the lack of thermodynamic interaction. This is in accordance with our intuitive interpretation of thermodynamic interaction, which is usually associated with the presence of a potential term in the corresponding Hamiltonian. On the other hand, our analysis shows that fermionic and bosonic quantum gases possess a non-flat equilibrium space, although the corresponding Hamiltonian does not contain a potential term. This result shows that the curvature of the equilibrium space is able to detect the "effective" thermodynamic interaction, which arises from the quantum nature of the gas components. We interpret this result as an indication in favor of considering the curvature of the equilibrium manifold as a measure of the thermodynamic interaction, instead of the intuitive notion based upon the presence of a potential term in the Hamiltonian.

We also analyzed the Bose-Einstein condensation from the point of view of GTD [12,20]. First, we established a particular fundamental equation that allows us to apply the Ehrenfest definition to interpret the Bose-Einstein condensation as a first order phase transition of an ideal bosonic gas. The same fundamental equation is then used to derive the geometric properties of the corresponding equilibrium manifold. We found that the curvature is non-zero, indicating the presence of thermodynamic interaction, and that there exists a curvature singularity at exactly that point in the equilibrium manifold, where the Bose-Einstein condensation takes place. This result indicates that GTD is able to correctly describe the thermodynamic properties of ideal classical and quantum gases.

Ideal quantum gases have been investigated from the point of view information geometric theory [1,8,9,11]. Using the second moments of the energy and particle number fluctuations as the components of a thermodynamic metric, in [8], it was shown that the corresponding curvature can be used as a measure of stability. For bosons, for example, the curvature tends to zero at the classical limit and diverges in the condensation region. The results we obtained in GTD are consistent with this information geometric approach. A quantum ideal gas obeying an intermediate statistics was investigated in [11]. The thermodynamic curvature is constructed such that it depends on the fugacity and the number of particles in a state, and it turns out to contain information about the stability properties of the system. In the classical limit of a Boltzmann gas, however, the curvature does not vanish as expected, but contains contributions from the quantum statistical character of the gas. A different intermediate statistics for deformed bosons and deformed fermions was investigated in [9]. The corresponding singular points of the curvature were shown to be related with condensation even in the case of deformed bosons.

Finally, for the sake of comparison, we used thermodynamic geometry in which the metric of the equilibrium space is given as the Hessian for different thermodynamic potentials. In the case of the entropy, the curvature is non-zero with a singularity at a value of μ that does not coincide with the Bose-Einstein condensate limiting value. If, instead, the internal energy is used as thermodynamic potential the corresponding metric is flat, indicating that no interaction is present. Both results are inconsistent with the thermodynamic properties of ideal quantum gases.

Data availability

No data was used for the research described in the article.

Acknowledgements

We thank R. Paredes and V. Romero-Rochin for stimulating discussions and literature hints and the UNAM-GTD group for helpful comments and discussions. Sasha A. Zaldivar would like to deeply thank Dr. O. Avilés-Hernández for his continued support and encouraging and stimulating conversations. She also thanks the UNAM for a graduate scholarship, CVU 493842. This work was partially supported by UNAM-DGAPA-PAPIIT, Grant No. 114520, and CONACYT-Mexico, Grant No. A1-S-31269.

References

- [1] S. Amari, Differential-Geometrical Methods in Statistics, Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [2] V.I. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics, Springer Verlag, New York, 1980.
- [3] H.B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatics, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985.
- [4] T. Frankel, The Geometry of Physics: An Introduction, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.
- [5] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, Thermodynamics and Statistical Mechanics, Springer Verlag, New York, 1995.
- [6] R. Hermann, Geometry, Physics and Systems, Marcel Dekker, New York, 1973.
- [7] K. Huang, Statistical Mechanics, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987.
- [8] H. Janyszek, R. Mrugala, J. Phys. A, Math. Gen. 23 (1990) 467.
- [9] B. Mirza, H. Mohammadzadeh, J. Phys. A, Math. Gen. 44 (2011) 475003.
- [10] L. Olivares-Quiroz, V. Romero-Rochin, J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 205302.
- [11] H. Oshima, T. Obata, H. Hara, J. Phys. A, Math. Gen. 32 (1999) 6373.
- [12] H. Quevedo, J. Math. Phys. 48 (2007) 013506.
- [13] H. Quevedo, M.N. Quevedo, A. Sánchez, Eur. Phys. J. C 79 (2019) 1.
- [14] H. Quevedo, M.N. Quevedo, A. Sánchez, J. Geom. Phys. 176 (2022) 104495.
- [15] H. Quevedo, M.N. Quevedo, A. Sánchez, J. Geom. Phys. 176 (2022) 104727.
- [16] H. Quevedo, A. Sánchez, A. Vázquez, Gen. Relativ. Gravit. 47 (2015) 1.
- [17] C.R. Rao, Bull. Calcutta Math. Soc. 37 (1945) 81.
- [18] G. Ruppeiner, Phys. Rev. A 20 (1979) 1608.
- [19] G. Ruppeiner, Rev. Mod. Phys. 67 (1995) 605; 68 (1996) 313.
- [20] A. Vázquez, H. Quevedo, A. Sánchez, J. Geom. Phys. 60 (2010) 1942.
- [21] F. Weinhold, J. Chem. Phys. 63 (1975) 2479, 2484, 2488, 2496; 65 (1976) 558.
- [22] C.N. Yang, R.L. Mills, Phys. Rev. 96 (1954) 191.

Apéndice B

Funciones Polilogaritmo

En este apéndice presentamos la definción y algunas propiedades e las funciones polilogaritmo de orden n y argumento z, $Li_n(z)$.

Las funciones de las que hablaremos son resultado de estudiar series del tipo [58]:

$$\frac{z}{1^2} + \frac{z^2}{2^2} + \frac{z^3}{3^2} + \frac{z^4}{4^2} + \dots |z| \le 1,$$
(B.1)

esta función fue estudiada por Euler en 1768, ahora la conocemos como dilogaritmo, cuya representación integral es:

$$Li_2(z) = -\int_0^z \frac{\log(1-z)}{z} dz.$$
 (B.2)

En el presente trabajo aparece la función polilogaritmo, esta funciones también es llamada la función de Jonquiére. Está definida para cualesquiera z y r complejos como una continuación analítica de la serie de Dirichlet:

$$Li_r(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^r} \quad (|z| < 1; \ z \in \mathbb{C}),$$
 (B.3)

la cual converge absolutamente para todo r y z dentro del diso unitario complej. Su representación integral está dada por:

$$Li_{r}(z) = \frac{z}{\Gamma(r)} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{r-1}}{e^{x} - z} dt \quad (Re(r) > 0, \ z \notin (1, \infty)).$$
(B.4)

La rama principal del polilogaritmo se elige tal que $Li_r(z)$ es real para $z \in \mathbb{R}$

cuando $r \in \mathbb{R}$ y se cumple que $0 \le z \le 1$. En su rama principal. $Li_r(z)$ es continua, a excepción del eje real en la parte inferior del medio plano de z donde también es univaluada.

Existen casos importantes cuándo r es entero o semi-entero, que fueron los presentados en este trabajo. Por ejemple el caso n = 1 es el logaritmo ordinario, n = 2 es el dilogaritmo mencionado anteriormente, n = 3 el trilogaritmo, etc. En la siguiente figura observamos las gráficas para las funciones polilogaritmo de diferentes órdenes.



Polilogaritmos de órden n y argumento z

Figura B.1: Polilogaritmos de diferentes órdenes.

Los polilogaritmos cumplen con relaciones de recurrencia par el cálculo de sus derivadas y sumas:

$$z\frac{d}{dz}Li_{r+1}(z) = Li_r(z), \tag{B.5}$$

у

$$Li_r(z) + Li_r(-z) = 2^{1-r}Li_r(z^2).$$
 (B.6)

También tienen una relación con la función Zeta de Riemann, que aparece en los cálculos para la condensación Bose-Einstein en tres dimensiones:

$$Li_r(z) = \begin{cases} \zeta(r) & r > 1\\ \infty & r \le 1 \end{cases}$$
(B.7)

Apéndice C

Maple S(T, V)

Métrica g_1

> restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(plots) : > with(PDEtools) : **> DGsetup**([T, V], E) : Epsilon > $\succ h \coloneqq f(T, V)$: **Epsilon >** hx := diff(h, T): **Epsilon >** hu := diff(h, V): **_Epsilon >** hxx := diff(h, T, T): **Epsilon >** huu := diff(h, V, V): **Epsilon >** hxu := diff(h, T, V): **Epsilon** > $g := evalDG(h \cdot (hxx \cdot dT \& s dT + huu \cdot dV \& s dV + 2 \cdot hxu \cdot dT)$ &s dV) : **Epsilon** > $C \coloneqq Christoffel(g)$: **Epsilon** > R := CurvatureTensor(C) : **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon** > S := S0 - N · ln $\left(\frac{N}{\frac{3}{V,T^2}}\right)$ + $\alpha \cdot \frac{A \cdot N^2}{\frac{3}{V,T^2}}$: **_Epsilon** > RESC := subs[eval](h = S, RS)**Epsilon** > gl := subs[eval](h = S, g); $gI := \left(\left(SO - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \right) \left(-\frac{3N}{2T^2} + \frac{15 \alpha A N^2}{A VT^{7/2}} \right) dT \right) dT$ (1) $+ \left(\frac{3\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^{2}}{VT^{3/2}}\right) \alpha A N^{2}}{2 V^{2} T^{5/2}} dT\right) dV$ $+ \left(\frac{3\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^{2}}{VT^{3/2}}\right) \alpha A N^{2}}{2 V^{2} T^{5/2}} dV\right) dT + \left(\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right)\right) dT + \left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) dV\right) dT + \left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) dV$ $+ \frac{\alpha A N^2}{\nu \tau^3 | 2} \left(- \frac{N}{\nu^2} + \frac{2 \alpha A N^2}{\nu^3 \tau^3 | 2} \right) dV \right) dV$ **Epsilon** > den := simplify(denom(RS),'size') : **Epsilon** > den2 := subs[eval](h = S, den); $den2 := 2\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial V^2}\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial T^2}\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right)\right)\right]$ (2)

$$+ \frac{\alpha A N^{2}}{V T^{3/2}} \bigg) - \bigg(\frac{\partial^{2}}{\partial V \partial T} \bigg(S0 - N \ln \bigg(\frac{N}{V T^{3/2}} \bigg) + \frac{\alpha A N^{2}}{V T^{3/2}} \bigg) \bigg)^{2} \bigg)^{2} \bigg(S0 - N \ln \bigg(\frac{N}{V T^{3/2}} \bigg) + \frac{\alpha A N^{2}}{V T^{3/2}} \bigg)^{3} \bigg)^{3}$$

$$\begin{bmatrix} T^{3}*V^{2})^{2}*(-2*N*V*T^{3}(3/2)*\ln(N)+2*N*V*T^{3}(3/2)*\ln(N)+3*N*V*T^{3}(3/2)*\ln(N)+2*N*V*T^{3}(3/2)*\ln(N)+3*N*V*T^{3}(3/2)*1n(T)+2*S0*V*T^{3}(3/2)+2*alpha*A*N^{2})^{3}=0; \\ N^{4}\left(7A^{2}N^{2}\alpha^{2}-9ANT^{3/2}V\alpha+2T^{3}V^{2}\right)^{2}\left(-2NVT^{3/2}\ln(N)+2NVT^{3/2}\ln(V)\right) +3NVT^{3/2}\ln(T)+2S0VT^{3/2}+2\alpha AN^{2}\right)^{3}=0 \\ \\ Epsilon > 7A^{2}N^{2}\alpha^{2}-9ANT^{3/2}V\alpha+2T^{3}V^{2}=0 \\ 7A^{2}N^{2}\alpha^{2}-9ANT^{3/2}V\alpha+2T^{3}V^{2}=0 \\ 7A^{2}N^{2}\alpha^{2}-9ANT^{3/2}V\alpha+2T^{3}V^{2}=0 \\ (5) \\ \\ Epsilon > solve(\{ 7*A^{2}*N^{2}*alpha^{2}-9*A*N*T^{3}(3/2)*V*alpha+2*T^{3}*V^{2}=0 \}, \{ T, V \} ; \\ \left\{ T=T, V = \frac{7}{2} \cdot \frac{AN\alpha}{T^{3/2}} \right\}, \left\{ T=T, V = \frac{AN\alpha}{T^{3/2}} \right\}$$

$$(6)$$

Métrica g_2

- > restart :
- with(DifferentialGeometry) :
- with (Tensor) :
- with(Tools) :
- $\boxed{}$ with(plots):
- **with**(**PDEtools**) :
- **DGsetup**([T, V], E):

Epsilon >
>
$$h := f(T, V)$$
:
Epsilon > $hx := diff(h, T)$:
Epsilon > $hu := diff(h, V)$:
Epsilon > $huu := diff(h, V, V)$:
Epsilon > $huu := diff(h, T, V)$:
Epsilon > $huu := diff(h, T, V)$:
Epsilon > $g := evalDG(h \cdot (-hxx \cdot dT \&s dT + huu \cdot dV \&s dV))$:
Epsilon > $G := Christoffel(g)$:
Epsilon > $R := CurvatureTensor(C)$:
Epsilon > $RS := RicciScalar(g, R)$:
Epsilon > $S := S0 - N \cdot ln \left(\frac{N}{\frac{3}{VT^2}}\right) + \alpha \cdot \frac{A \cdot N^2}{N \cdot T^2}$
 $S := S0 - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}$ (1)

$$\begin{aligned} \mathbf{Epsilon} > RESC &\coloneqq subs[eval](h = S, RS) :\\ \mathbf{Epsilon} > g2 &\coloneqq subs[eval](h = S, g);\\ g2 &\coloneqq -\left(\left(\left(S0 - N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^{2}}{VT^{3/2}}\right) \left(-\frac{3 N}{2 T^{2}} + \frac{15 \alpha A N^{2}}{4 V T^{7/2}}\right) dT\right) dT\right) + \left(\left(S0\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -N\ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^{2}}{VT^{3/2}}\right) \left(-\frac{N}{V^{2}} + \frac{2 \alpha A N^{2}}{V^{3} T^{3/2}}\right) dV\right) dV \end{aligned}$$

Lepsilon > den := simplify(denom(RS),'size'):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Epsilon} > den2 \coloneqq subs[eval](h = \mathbf{S}, den); \\ den2 \coloneqq 2 \left(S0 - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \right)^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(S0 - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \right) \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \right) \right)^2 \\ \end{bmatrix}$$
(3)
$$= \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}} \right) \right)^2 \\ \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{9}{2} \frac{1}{V^{11} T^{37/2}} \left(\left(N \ln \left(\frac{N}{V T^{3/2}} \right) V T^{3/2} - S0 V T^{3/2} - \alpha A N^2 \right)^3 \left(V T^{3/2} - 2 A N \alpha \right)^2 \left(V T^{7/2} \right)^{-1} \left(4 \right) \\ -\frac{5}{2} \alpha A N T^2 \right)^2 N^4 \end{bmatrix}$$
Epsilon > (N*ln (N/ (V*T^ (3/2))) *V*T^ (3/2) - S0 *V*T^ (3/2) - alpha*A*N^2)^{3*} (V*T^ (3/2) - 2*A*N*alpha)^{2*} (V*T^ (7/2) - (5/2) *alpha*A*N*T^2)^{2*N^4=0};
(N ln $\left(\frac{N}{V T^{3/2}} \right) V T^{3/2} - S0 V T^{3/2} - \alpha A N^2 \right)^3 (V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 6 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A N \alpha)^2 (V T^{7/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A V C V T^{3/2} - 2 A V C V T^{3/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A V C V T^{3/2} + 5 C V T^{3/2} - 2 A V C V T^{3/2} + 5 C V T^{3$

Métrica g_3

> restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(plots) : > with(PDEtools) : **> DGsetup**([T, V], E): Epsilon > $\blacktriangleright h \coloneqq f(T, V)$: **Lepsilon >** $hx \coloneqq diff(h, T)$: **Epsilon >** hu := diff(h, V): **_Epsilon >** hxx := diff(h, T, T): **Epsilon >** huu := diff(h, V, V): **Epsilon >** hxu := diff(h, T, V): **Epsilon** > $gg := evalDG(T \cdot hx \cdot hxx \cdot dT \& s dT + V \cdot hu \cdot huu \cdot dV \& s dV + (T \cdot hx + V)$ -hu) $\cdot hxu \cdot dT \& s dV$) $gg := \left(T\left(\frac{\partial}{\partial T} f(T, V)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial T^2} f(T, V)\right) dT \right) dT$ (1) $+\left(\frac{\left(T\left(\frac{\partial}{\partial T} f(T,V)\right) + V\left(\frac{\partial}{\partial V} f(T,V)\right)\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial T\partial V} f(T,V)\right)}{2} dT\right) dV$ $+\left(\frac{\left(T\left(\frac{\partial}{\partial T} f(T,V)\right) + V\left(\frac{\partial}{\partial V} f(T,V)\right)\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial T\partial V} f(T,V)\right)}{2} dV\right) dT + \left(V\left(\frac{\partial}{\partial V} f(T,V)\right)\right) dV$ $f(T, V) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} f(T, V) \right) dV dV$ **_Epsilon >** $C \coloneqq Christoffel(gg)$: **Epsilon** > R := CurvatureTensor(C) : **Epsilon** > RS := RicciScalar(gg, R) : **Epsilon** > S := S0 - N · ln $\left(\frac{N}{V \cdot T^{\frac{3}{2}}}\right) + \alpha \cdot \frac{A \cdot N^{-}}{V \cdot T^{\frac{3}{2}}}$ $S := SO - N \ln \left(\frac{N}{VT^{3/2}} \right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}$ (2) Epsilon > **Epsilon** > RESC := subs[eval](h = S, RS): **Epsilon** > g3 := subs[eval](h = S, gg);

$$g3 := \left(T\left(\frac{3N}{2T} - \frac{3\alpha AN^2}{2VT^{5/2}}\right) \left(-\frac{3N}{2T^2} + \frac{15\alpha AN^2}{4VT^{7/2}}\right)dT\right)dT$$
(3)

$$+ \left(\frac{3\left(T\left(\frac{3N}{2T} - \frac{3\alpha AN^{2}}{2VT^{5/2}}\right) + V\left(\frac{N}{V} - \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}\right)\right)\alpha AN^{2}}{4V^{2}T^{5/2}} dT\right)dV \\ + \left(\frac{3\left(T\left(\frac{3N}{2T} - \frac{3\alpha AN^{2}}{2VT^{5/2}}\right) + V\left(\frac{N}{V} - \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}\right)\right)\alpha AN^{2}}{4V^{2}T^{5/2}} dV\right)dT + \left(V\left(\frac{N}{V} - \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}\right)\right)dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}dT\right)dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{2}T^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{3/2}}dT + \frac{\alpha AN^{2}}{V^{3/2$$

Epsilon > den := simplify(denom(RS), 'symbolic') : **Epsilon** > den2 := subs[eval](h = S, den);den2 :=

$$\begin{split} &\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial V \partial T} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial V} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right)\right) \\ &+ \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)^2 V^2 + 2 \left(\frac{\partial^2}{\partial V \partial T} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial V} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial V} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) T V \\ &+ \left(\frac{\partial^2}{\partial V \partial T} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \\ &+ \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)^2 T^2 - 4 T \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{3/2}}\right) + \frac{\alpha A N^2}{VT^{3/2}}\right)\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(S0 - N \ln\left(\frac{N}{VT^{$$

(5)

Epsilon > simplify ((5), 'symbolic');

$$\frac{81}{256} \frac{1}{T^{16} V^{12}} \left(N^8 \left(55 A^4 N^4 \alpha^4 - 182 A^3 N^3 T^{3/2} V \alpha^3 + 215 A^2 N^2 T^3 V^2 \alpha^2 - 104 A N T^{9/2} V^3 \alpha + 16 T^6 V^4 \right)^2 \right)$$
(6)

Epsilon >
$$55 A^2 N^2 \alpha^2 - 72 A N T^{3/2} V \alpha + 16 T^3 V^2$$

 $55 A^2 N^2 \alpha^2 - 72 A N T^{3/2} V \alpha + 16 T^3 V^2$
(7)
Epsilon > collect((7), N);

> collect ((7), N);

$$55 A^2 N^2 \alpha^2 - 72 A N T^{3/2} V \alpha + 16 T^3 V^2$$
(8)

$$55 A^2 N^2 \alpha^2 - 72 A N T^{3/2} V \alpha + 16 T^3 V^2$$
(9)

Epsilon > collect((9), V);

$$55 A^2 N^2 \alpha^2 - 72 A N T^{3/2} V \alpha + 16 T^3 V^2$$
(10)

Epsilon > solve((10)=0, V);

$$\frac{1}{4} \frac{(9+\sqrt{26}) NA\alpha}{T^{3/2}}, -\frac{1}{4} \frac{(-9+\sqrt{26}) NA\alpha}{T^{3/2}}$$
(11)

$$\begin{bmatrix} Epsilon > ##alfa = -1 \\ Epsilon > 55*(1/2^{(7/2)})^{2*N^{2}+72*(1/2^{(7/2)})*N*T^{(3/2)*} \\ V+16*T^{3*V^{2}} \\ Warning, inserted missing semicolon at end of statement \\ \frac{55}{128} N^{2} + \frac{9}{2} \sqrt{2} N T^{3/2} V + 16 T^{3} V^{2}$$
(12)

$$\begin{bmatrix} \text{Epsilon} > \text{solve}(\{ (12) \}, [V]); \\ \left[\left[V = -\frac{1}{64} \frac{(9\sqrt{2} - 2\sqrt{13})N}{T^{3/2}} \right], \left[V = -\frac{1}{64} \frac{(9\sqrt{2} + 2\sqrt{13})N}{T^{3/2}} \right] \right]$$
(13)

Epsilon > solve({ (12) }, [T]);

$$\left[\left[T = \frac{1}{16} \frac{\left(-110 N V^2 \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13} \right)^2 \right)^{2/3}}{V^2 \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13} \right)^2} \right], \left[T = \left(\right] \right]$$
(14)

$$-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2}+2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2}+2 \sqrt{13}\right)}$$
$$-\frac{\frac{1}{8} I \sqrt{3} \left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2}+2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2}+2 \sqrt{13}\right)}\right)^{2} \bigg|, \left[T = \left(\frac{1}{2} \left(1 \sqrt{2}\right)^{2} + 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}\right]$$

$$-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13}\right)} + \frac{\frac{1}{8} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} + 2 \sqrt{13}\right)} \right)^{2} \left[T + \frac{1}{16} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{2/3}}{V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{8} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-110 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-10 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-10 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-10 N V^{2} \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)^{2}\right)^{1/3}}{V \left(9 \sqrt{2} - 2 \sqrt{13}\right)} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-10 N V^{2} \left(2 \sqrt{13} + 9 \sqrt{2}\right)^{2}\right)^{2/3}}{V^{2} \left(2 \sqrt{13} + 9 \sqrt{2}\right)^{2}} \right] \left[T - \left[-\frac{1}{16} \frac{\left(-0.09756840501 + 0.16899343461\right) N^{2/3}}{V^{2/3}} \right] \left[T - \left(-\frac{0.08620030484 N}{T^{3/2}}\right) - \frac{0.08620030484 N}{T^{3/2}} \right] \left[T - \left(-\frac{0.08620030484 N}{T^{3/2}}\right) \right] \left[T - \left(-\frac{0.08620030484 N}{T^{3/2}}\right) \left[T - \left(-\frac{1}{16} \frac{1}{10} \frac{1}{10} \frac{1}{T^{3/2}} \right) \right] \left[T - \left(-\frac{1}{10} \frac{1}{T^{3/2}} \right] \left[T - \left(-\frac{1}{10} \frac{1}{T^{3/2}} \right) \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left[T - \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left[T - \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right)^{2} \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left[T - \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right)^{2} \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right)^{2} \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right)^{2} \left(-\frac{1}{T^{3/2}} \right) \left$$

Epsilon >
$$evalf\left(-\frac{1}{64} \frac{(2\sqrt{13} + 9\sqrt{2})N}{T^{3/2}}\right)$$

(18)





Apéndice D

Maple Bose-Einstein y Fermi-Dirac: métricas y escalares de curvatura.

> restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(PDEtools) : > DGsetup([T, u], E): Epsilon > $\blacktriangleright h := f(T, u)$: **Epsilon** > hT := diff(h, T): **Epsilon >** hu := diff(h, u): **Epsilon >** hTT := diff(h, T, T): **Epsilon >** huu := diff(h, u, u): **Epsilon** > hTu := diff(h, T, u): **Epsilon** > $g := evalDG(T \cdot hT \cdot hTT \cdot dT \& s dT + u \cdot hu \cdot huu \cdot du \& s du + (T \cdot hT + u)$ (hu) (hTu) dT & s du): **_Epsilon >** C := Christoffel(g) : **Epsilon** > $R \coloneqq CurvatureTensor(C)$: **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon** > $F52 := -\text{polylog}\left(\frac{5}{2}, -e^{\frac{u}{T}}\right)$ **Epsilon** > $RSF := subs[eval] \left(h = -\tau^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot F52, RS \right)$: **Epsilon** > $g3Fermi := simplify \left(subs[eval] \left(h = -T^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot F52, g \right) ; size' \right);$ $g3Fermi := \left(T \left(\frac{5 T^{3/2} V \text{Li}_{5} \left(-e^{\frac{u}{T}} \right)}{2} - \sqrt{T} V \text{Li}_{\frac{3}{2}} \left(-e^{\frac{u}{T}} \right) u \right) \left(\frac{15 \sqrt{T} V \text{Li}_{5} \left(-e^{\frac{u}{T}} \right)}{4} \right) \right)$ (1) $-\frac{3 V \text{Li}_{\frac{3}{2}} \left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u}{\sqrt{T}} + \frac{V \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u^{2}}{T^{3/2}} dT dT$ $-e^{\frac{u}{T}} u \left| \left(\frac{3\sqrt{T} V \text{Li}_{3} \left(-e^{\frac{u}{T}} \right)}{2} - \frac{V \text{Li}_{1} \left(-e^{\frac{u}{T}} \right) u}{\sqrt{T}} \right) \right| dT du$

$$+ \left(\frac{1}{2}\left(\left(T\left(\frac{5 T^{3/2} V \operatorname{Li}_{5}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right)}{2} - \sqrt{T} V \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u\right) + T^{3/2} V \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u\right)\right) + T^{3/2} V \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u\right) + T^{3/2} V \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) u \operatorname{Li}_{3}\left(-e^{\frac{u}{T}}\right) du du$$



Epsilon >

> restart : with(DifferentialGeometry): > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(PDEtools) : > DGsetup([T, u], E) : Epsilon > > h := f(T, u): **Epsilon** > hT := diff(h, T) : **Epsilon** > hu := diff(h, u): **Epsilon >** hTT := diff(h, T, T): **Epsilon >** huu := diff(h, u, u): **Epsilon** > hTu := diff(h, T, u): **Epsilon** > $g := evalDG(T \cdot hT \cdot hTT \cdot dT \& s dT + u \cdot hu \cdot huu \cdot du \& s du + (T \cdot hT + u)$ $(hu) \cdot hTu \cdot dT \& s du)$: **_Epsilon >** $C \coloneqq Christoffel(g)$: **Epsilon** > R := CurvatureTensor(C) : **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon** > $B52 := \text{polylog}\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{u}{\tau}}\right)$: **Epsilon** > $B32 := \text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)$: **_Epsilon** > $EOB \coloneqq \mathbf{T} \cdot \ln\left(1 - e^{\frac{u}{T}}\right)$: **Epsilon** > $RS2 := subs[eval] \left(h = -\tau^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot B52 + E0B, RS \right)$: **Epsilon >** rs3 := RS2: **Epsilon** > $g3Bose := subs[eval] \left(h = -\tau^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot B52 + E0B, q \right)$ $g3Bose := \left(T \left(-\frac{5 T^{3/2} V \text{Li}_{5} \left(e^{\frac{u}{T}} \right)}{2} + \sqrt{T} V \text{Li}_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{u}{T}} \right) u + \ln \left(1 - e^{\frac{u}{T}} \right) \right) \right)$ (1) $+\frac{u\,\mathrm{e}^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-\mathrm{e}^{\frac{u}{T}}\right)}\left|\left(-\frac{15\sqrt{T}\,V\,\mathrm{Li}_{\frac{5}{2}}\left(\mathrm{e}^{\frac{u}{T}}\right)}{4}+\frac{3\,V\,\mathrm{Li}_{\frac{3}{2}}\left(\mathrm{e}^{\frac{u}{T}}\right)u}{\sqrt{T}}-\frac{V\,\mathrm{Li}_{\frac{1}{2}}\left(\mathrm{e}^{\frac{u}{T}}\right)u^{2}}{T^{3/2}}\right)\right|$

$$- \frac{u^{2}e^{\frac{u}{T}}}{T^{3}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} - \frac{u^{2}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{r^{3}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}} dT dT + \left(\frac{1}{2}\left(\left|T\right|\left(-\frac{5T^{3/2}VLi_{\frac{5}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{2}\right)\right| + \sqrt{T}VLi_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right) u + \ln\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right) + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} \right) + \left(-T^{3/2}VLi_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}\right) \\ - \frac{e^{\frac{u}{T}}}{1-e^{\frac{u}{T}}} du du - \left(-\frac{3\sqrt{T}VLi_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{2} + \frac{VLi_{\frac{1}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)u}{\sqrt{T}} + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T^{2}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}} \right) \\ + \frac{u\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{T^{2}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}} dT du + \left(\frac{1}{2}\left(\left|T\left(-\frac{5T^{3/2}VLi_{\frac{5}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{2} + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}} + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T^{2}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} \right) \\ - \frac{e^{\frac{u}{T}}}{1-e^{\frac{u}{T}}} dT du + \left(1-e^{\frac{u}{T}}\right) + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} dT + \left(-T^{3/2}VLi_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right) + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T^{2}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} \right) \\ + \frac{u\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{1-e^{\frac{u}{T}}} dU dU dT + \left(1-e^{\frac{u}{T}}\right) + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} dU + \frac{ue^{\frac{u}{T}}}{T^{2}\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} \right) \\ + \frac{u\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{1-e^{\frac{u}{T}}} dU dU dT + \left(\left(-T^{3/2}VLi_{\frac{3}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right) - \frac{e^{\frac{u}{T}}}{1-e^{\frac{u}{T}}}\right) dU \\ -\sqrt{T}VLi_{\frac{1}{2}}\left(e^{\frac{u}{T}}\right) - \frac{e^{\frac{u}{T}}}{T\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)} - \frac{\left(e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}}{\left(1-e^{\frac{u}{T}}\right)^{2}} dU dU dU \\ = Epsilon > plot(subs(2val)(T^{-1}, V^{-1}, r^{3}), u^{-1} = 0.0001.0, legend = ["Bose"],$$

color = "Red", labels = ["u", "R"], title = "Escalar de Curvatura Gas Ideal de Bose-Einstein", font = [Arial, Roundedbold], gridlines = true);


L>

10^Maple Bose-Einstein y Fermi-Dirac: métricas y escalares de curvatura.

Apéndice E

Maple Gentile: métricas y escalares de curvatura.

Métrica g_1

Métrica g 1 > restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(plots) : > with(PDEtools) : > DGsetup([x, u], E) : Epsilon > > $h \coloneqq f(x, u)$: **Epsilon >** hx := diff(h, x): **Epsilon >** hu := diff(h, u): **Epsilon >** hxx := diff(h, x, x): **Epsilon >** huu := diff(h, u, u): **Epsilon** > hxu := diff(h, x, u): **Epsilon** > $g := evalDG(h \cdot (hxx \cdot dx \& s dx + huu \cdot du \& s du + 2 \cdot hxu \cdot dx \& s du))$: **Epsilon** > $C \coloneqq Christoffel(g)$: **Epsilon** > $R \coloneqq CurvatureTensor(C)$: **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon > G52** := polylog $\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{u}{x}}\right) - \frac{1}{(p+1)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{5}{2}, \left(e^{\frac{u}{x}}\right)^{p+1}\right)\right)$: **Epsilon > G32** := polylog $\left(\frac{3}{2}, 1\right) - \frac{1}{(p+1)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)\right)$: **Epsilon >** $E0 := \frac{x}{u} \cdot \left(\ln \left(1 - \left(\frac{u}{e^x} \right)^{p+1} \right) - \ln \left(\frac{u}{1-e^x} \right) \right) :$ Epsilon > **Epsilon** > *RESC* := *subs*[*eval*] $\left(h = -\frac{x^2 \cdot V \cdot G52}{C^2} - \frac{E0}{C^2}, RS\right)$: **Lepsilon** > rs2 := subs[eval](x = 1, V = 100, RESC): Epsilon > **Epsilon** > den := simplify(denom(RS), 'size') : Epsilon > ##GRAFICAS ESCALAR## **Epsilon** > A := Array(1..2, 1..2): **Epsilon** > $A[1, 1] := plot(subs[eval](p=1, 10^9 \cdot rs2), u = -1..0, gridlines = true,$ labels = ["u", "R"]): **Epsilon** > $A[1, 2] := plot(subs[eval](p = 10, 10^9 \cdot rs2), u = -1..0, gridlines$

= true, labels = ["u", "R"]):

(1)





Epsilon >

Métrica g_2

> restart : > with(DifferentialGeometry) : with(Tensor) : > with(Tools) : > with(plots) : > with(PDEtools) : **> DGsetup**([**x**, **u**], E) : Epsilon > $\rightarrow h \coloneqq f(x, u)$: **Epsilon >** hx := diff(h, x): **Epsilon >** $hu \coloneqq diff(h, u)$: **Epsilon >** hxx := diff(h, x, x): **Epsilon >** huu := diff(h, u, u): **Epsilon** > hxu := diff(h, x, u): **Epsilon** > $g \coloneqq evalDG(h \cdot (-hxx \cdot dx \& s dx + huu \cdot du \& s du))$: **Epsilon >** $C \coloneqq Christoffel(g)$: **_Epsilon** > R := CurvatureTensor(C) : **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon > G52** := polylog $\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{u}{x}}\right) - \frac{1}{\frac{3}{2}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{5}{2}, \left(e^{\frac{u}{x}}\right)^{p+1}\right)\right)$: $= \frac{(p+1)^2}{(p+1)^2}$ Epsilon > G32 := polylog $\left(\frac{3}{2}, 1\right) - \frac{1}{\frac{1}{2}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)\right)$: Epsilon > $E\theta \coloneqq \frac{x}{v} \cdot \left(\ln \left(1 - \left(\frac{u}{e^x} \right)^{p+1} \right) - \ln \left(\frac{u}{1-e^x} \right) \right)$: **Epsilon** > RESC := subs[eval] $\left(h = -\frac{x^2 - V \cdot G52}{C^{22}} - \frac{E0}{C^{22}}, RS\right)$: **Epsilon** > rs2 := subs[eval](x = 1, V = 100, RESC): **Epsilon** > ##den := simplify(denom(RS), 'size') :Epsilon > ##GRAFICAS ESCALAR## **Epsilon** > A := Array(1..2, 1..2): **Epsilon** > A[1, 1] := plot(subs[eval](p=1, x=1, V=1, rs2), u = -1..0, gridlines= true, labels = ["u", "R"]) : **Epsilon** > A[1,2] := plot(subs[eval](p=10, x=1, V=1, rs2), u=-1..0, gridlines= true, labels = ["u", "R"]) : **Epsilon** > A[2, 1] := plot(subs[eval](p = 1000, x = 1, V = 1, rs2), u = -0.01...-0.0001, gridlines = true, labels = ["u", "R"]) :





Métrica g_3

> restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(plots) : with(PDEtools): > DGsetup([x, u], E) : Epsilon > $\blacktriangleright h := f(x, u)$: **Lepsilon >** hx := diff(h, x) :**Epsilon** > hu := diff(h, u): **Epsilon >** hxx := diff(h, x, x): **Epsilon** > huu := diff(h, u, u): **Epsilon >** hxu := diff(h, x, u): **Epsilon** > $g := evalDG(x \cdot hx \cdot hxx \cdot dx \& s dx + u \cdot hu \cdot huu \cdot du \& s du + (x \cdot hx + u)$ (hu) (hxu) (dx & s du): **_Epsilon >** C := Christoffel(g) : **Epsilon** > R := CurvatureTensor(C) : **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **Epsilon > G52** := polylog $\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{u}{x}}\right) - \frac{1}{(p+1)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{5}{2}, \left(\frac{u}{e^{x}}\right)^{p+1}\right)\right)$: **Epsilon > G32** := polylog $\left(\frac{3}{2}, 1\right) - \frac{1}{\left(n+1\right)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left(\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, 1\right)\right)$: **Epsilon >** $E0 := \frac{x}{V} \cdot \left(\ln \left(1 - \left(\frac{u}{e^x} \right)^{p+1} \right) - \ln \left(\frac{u}{1-e^x} \right) \right) :$ **Epsilon** > RS1 := subs[eval] $\left(h = -\frac{x^2 - V \cdot G52}{G32} - \frac{E0}{G32}, RS \right)$: **Epsilon >** rs2 := RS1: Epsilon >

Límite Fermi-Dirac, p->1

Epsilon > A1 := plot(subs[eval](x = 1, V = 1, p = 1, rs2), u = -1..0, gridlines= true, size = [800, 800], labels = ["u", "R"], legend = ["Gentile, p=1"], title = "Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile Límite de Fermi-Dirac, p=1", font = [Arial, Roundedbold], color = ["Red"]);











Límite Bose-Einstein p->∞, (mu=-0.001..-0.001)

Epsilon > A4 := plot(subs[eval](x=1, V=1, p=1000, rs2), u = -367...-350,

- *gridlines* = *true*, *size* = [800, 800].*labels* = ["u", "R"], *legend* = ["Gentile, p=1000"], *title*
 - = "Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile, p=1000", font
 - = [*Arial*, *Roundedbold*], *color* = ["Red"]);



Epsilon > A5 := plot(subs[eval](x = 1, V = 1, p = 10000, rs2), u = -0.0001 ...-0.001, gridlines = true, size = [800, 800], labels = ["u", "R"], legend = ["Gentile, p=10000"], title = "Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile 1", font = [Arial, Roundedbold], color = ["Red"]);





= [*Arial*, *Roundedbold*], *color* = ["Red"]);



'Bose-Einstein

Epsilon > B52 := polylog $\left(\frac{5}{2}, e^{\frac{u}{x}}\right)$: **Epsilon** > B32 := polylog $\left(\frac{3}{2}, 1\right)$: **Epsilon** > E0B := $\frac{x}{V} \cdot \ln \left(1 - e^{\frac{u}{x}}\right)$: **Epsilon** > RS2 := subs[eval] $\left(h = -\frac{x^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot B52}{B32} + \frac{E0B}{B32}, RS\right)$: **Epsilon** > rs3 := RS2 : **Epsilon** > rs3 := RS2 : **Epsilon** > rs3 := RS2 :

Fermi-Dirac

Epsilon >
$$F52 := -\text{polylog}\left(\frac{5}{2}, -e^{\frac{u}{x}}\right)$$
:
Epsilon > $RS5 := subs[eval]\left(h = -x^{\frac{5}{2}} \cdot V \cdot F52, RS\right)$:
Epsilon > $rs4 := RS5$:

Comparación de los escalares

- **Epsilon >** GF1 := subs[eval](x=1, V=1, p=1, rs2):
- **Epsilon** > F1 := subs[eval](x=1, V=1, rs4):
- **Epsilon >** B111 := subs[eval](x=1, V=100, rs3):
- **Epsilon** > gb111 := subs[eval](x = 1, V = 8, p = 10000, rs2):
- **Epsilon** > dualaxisplot(GF1, F1, u = -0.5..0, size = [800, 800], gridlines = true, title

= "Comparación Escalar de Curvatura Gas Ideal de Gentile-Gas Ideal de Fermi-Dirac", font = [Arial, Roundedbold], labels = ["u", "R"], color = ["Red", "Blue"], legend = ["Gentile, p=1", "Fermi-Dirac"]);







LL>

Apéndice F

Maple Fermi 2D: cálculos preliminares.

> restart : > with(DifferentialGeometry) : > with(Tensor) : > with(Tools) : > with(PDEtools) : > DGsetup([T, u], E) : Epsilon > $\blacktriangleright h := f(T, u) :$ **Epsilon >** $hT \coloneqq diff(h, T)$: **Epsilon** > hu := diff(h, u): **Epsilon** > hTT := diff(h, T, T): **Epsilon >** $huu \coloneqq diff(h, u, u)$: **Epsilon >** hTu := diff(h, T, u): **Epsilon** > $g := evalDG(T \cdot hT \cdot hTT \cdot dT \& s dT + u \cdot hu \cdot huu \cdot du \& s du + (T \cdot hT + u)$ $(hu) \cdot hTu \cdot dT \& s du)$: **Epsilon >** $C \coloneqq Christoffel(g)$: **Epsilon** > $R \coloneqq CurvatureTensor(C)$: **Epsilon** > RS := RicciScalar(g, R) : **_Epsilon >** $F2 := -\text{polylog}\left(2, -e^{\frac{u}{T}}\right)$: **Epsilon** > $RSF := subs[eval] \left(h = -\frac{T^2 \cdot L^2 \cdot F2}{2}, RS \right)$: Epsilon > **Epsilon** > rsfl := RSF:

Epsilon > *plot(subs[eval](T=0.5, L=1, rsf1), u =-1..0, legend = ["Fermi 2D"], color = "Orange");*



Apéndice G

Representación en serie de la fugacidad para un gas ideal de Gentile.

Durante el estudio del gas ideal de Gentile se llegaron a las siguientes expresiones:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} P_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z} - \frac{(p+1)}{(z^{-1})^{p+1} - 1}.$$
 (G.1)

Para U se tiene que:

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda_T^3} P_{5/2}(z),$$
 (G.2)

у

$$P_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{z^k}{k^n} - \frac{1}{(p+1)^{n-1}} \frac{(z^{p+1})^k}{k^n} \right).$$
(G.3)

 1 El siguiente paso es eliminar la fugacidad, z, de las expresiones para (G.1) y (G.2) utilizando (G.3).

Utilizando (G.3) para n = 3/2 escribimos la ecuación (G.1) de manera explícita:

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{z^k}{k^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \frac{(z^{p+1})^k}{k^{3/2}} \right).$$
(G.4)

Con lo anterior tenemos:

 $^{{}^{1}}P_{n}(z)$ es una generalización de los polilogaritmos de orden n.

$$\frac{V\lambda_T^3}{gV} = z - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} (z^{p+1}) + \frac{z^2}{2^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \frac{(z^{p+1})^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \frac{(z^{p+1})^3}{3^{3/2}} + \dots$$
(G.5)

En la ecuación anterior podemos asociar términos con p y sin p:

$$z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} \tag{G.6}$$

r términos correspondientes à Bose-Einstein con r=1,...,p

$$\underbrace{-\frac{1}{(p+1)^{1/2}}(z^{p+1}) - \frac{1}{(p+1)^{1/2}}\frac{(z^{p+1})^2}{2^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}}\frac{(z^{p+1})^3}{3^{3/2}}}_{3^{3/2}} \tag{G.7}$$

$$p+1$$
 términos en adelante

$$\frac{V\lambda_T^3}{gV} = \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z}^2}{\mathbf{2}^{3/2}} + \frac{\mathbf{z}^3}{\mathbf{3}^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}}(z^{p+1}) - \frac{1}{(p+1)^{1/2}}\frac{(z^{p+1})^2}{2^{3/2}} - \frac{1}{(p+1)^{1/2}}\frac{(z^{p+1})^3}{3^{3/2}} + \dots$$
(G.8)

En (G.8) observamos r términos correspondientes a un gas de Bose-Einstein dónde r = 1, ..., p y los términos que corresponden a p + 1 en adelante involucran factores de la forma $\frac{1}{(p+1)^{1/2}}$:

$$\frac{V\lambda_T^3}{gV} = z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} - \frac{1}{(\mathbf{p}+1)^{1/2}}(\mathbf{z}^{\mathbf{p}+1}) - \frac{1}{(\mathbf{p}+1)^{1/2}}\frac{(\mathbf{z}^{\mathbf{p}+1})^2}{2^{3/2}} - \frac{1}{(\mathbf{p}+1)^{1/2}}\frac{(\mathbf{z}^{\mathbf{p}+1})^3}{3^{3/2}} + \dots$$
(G.9)

Ahora debemos invertir la serie (G.9) para obtener la fugacidad en términos de $N, T \neq V$. Para realizar esto, proponemos la siguiente expresión:

$$z = a_1 \left(\frac{N}{V}\right) + a_2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 + \dots + a_{p+1} \left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}$$
(G.10)

Sustituimos (G.10) en (G.9):

,

$$\frac{V\lambda_T^3}{gV} = \left[a_1\left(\frac{N}{V}\right) + a_2\left(\frac{N}{V}\right)^2 + \dots + a_{p+1}\left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}\right]$$

$$+ \frac{1}{2^{3/2}} \left[a_1\left(\frac{N}{V}\right) + a_2\left(\frac{N}{V}\right)^2 + \dots + a_{p+1}\left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}\right]^2$$

$$+ \dots - \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \left[a_1\left(\frac{N}{V}\right) + a_2\left(\frac{N}{V}\right)^2 + \dots + a_{p+1}\left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}\right]^{p+1}$$
(G.11)

Para simplificar los términos de potencias de la forma p+1 utilizamos el teorema del binomio general dos veces, con $(a + b + c)^n = (X + Y)^n$ tomando X = a + b y c = Y, dónde $a = \left(\frac{N}{V}\right)$, $b = \left(\frac{N}{V}\right)^2$ y $c = \left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}$, entonces: $(X+Y)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} X^k Y^{n-k},$ (G.12)

y para

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^k b^{n-k}.$$
 (G.13)

Después de sustituir todas las expresiones y simplificar llegamos a que:

$$a_{1} = \frac{\lambda_{T}^{3}}{g}$$

$$a_{2} = -\frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda_{T}^{3}}{g}\right)^{2}$$

$$a_{p+1} = \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \left(\frac{\lambda_{T}^{3}}{g}\right)^{p+1}$$
(G.14)

Finalmente la fugacidad es:

$$z = \frac{\lambda_T^3}{g} \left(\frac{N}{V}\right) - \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda_T^3}{g}\right)^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 + \dots + \frac{1}{(p+1)^{1/2}} \left(\frac{\lambda_T^3}{g}\right)^{p+1} \left(\frac{N}{V}\right)^{p+1}.$$
 (G.15)

Bibliografía

- M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, Science 269, 198 (1995) https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198.
- [2] V.I. Arnold, Mathemathical Methods of Classical Mechanics (Springer Verlag, New York, 1980).
- [3] F. Belgiorno, J. Math. Phys. 44, 1089 (2003).
- [4] H. B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatics (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985).
- [5] Blair, D.E.: Contact manifolds in Riemannian geometry. Lecture Notes in Mathematics, vol. 509, Springer, 1976,
- [6] C. Charatheodory, Untersuchungen über die Grundlagen der Thermodynamik, Math. Ann. 67, 335 (1909)
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, ?Quantum Mechanics,? John Wiley & Sons, New York, 1977, p.1420.
- [8] 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].
- [9] Burke L. William, *Applied Differential Geometry* (Cambridge University Press, United States of America, 1987).
- [10] H. Quevedo and D. Tapias, Geometric Description of Chemical Reactions ar-Xiv:1301.0262 [math-ph].
- [11] A. Bravetti, C. S. López-Monsalvo, F. Nettel and H. Quevedo, The conformal metric structure of Geometrothermodynamics, J. Math. Phys. 54, 033513, (2013).
- [12] A. Bravetti, C. S. López-Monsalvo, F. Nettel, Contact Symmetries and Hamiltonian Thermodynamics, arXiv:1409.7340v2 [math-ph].
- [13] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, M. J. Van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 75, 3969 (1995) https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.3969.
- [14] A. Dey, P. Roy and T. Sarkar, Information Geometry, Phase Transitions, and Widom Lines : Magnetic and Liquid Systems, arXiv:1111.6721 [cond-mat.statmech].
- [15] P. Ehrenfest, Phasenumwandlungen im ueblichen und erweiterten Sinn, classifiziert nach den entsprechenden Singularitaeten des thermodynamischen Potentiales. Proc. Royal Acad. Amsterdam 36 (1933), 153-157 (Commun. Kamerlingh Onnes Inst. Leiden, Suppl.75b).
- G. Gentile, itosservazioni sopra le statistiche intermedie. Nuovo Cim 17, 493?497 (1940). https://doi.org/10.1007/BF02960187.
- [17] G. Gentile, Le Statistiche Intermedie e le Proprietà Dellélio Liquido. Nuovo Cim 19, 109-125 (1942). https://doi.org/10.1007/BF02960192.
- [18] J. Gibbs, *The Collected Works*, Vol. 1, Thermodynamics (Yale University Press, 1948)
- [19] W. Greiner, L. Neise, *Thermodynamics and Statitcal Mechanics* (Springer Verlag, New York, 1997)
- [20] F. Haldane, Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 937.
- [21] R. Hermann, Geometry, physics and systems (Marcel Dekker, new York, 1973)
- [22] K. Huang, Introduction to Statistical Physics, (Taylor & Francis Group, United States of America, 2010)
- [23] K. Huang, Statistical Mechanics, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987)

- [24] Khare, Avinash. (2005). Fractional statistics and quantum theory, 2nd edition.
- [25] J.L. López-Picón, J. M. López-Vega. Information geometry for the Bose-Einstein fluid, strongly degenerate ideal Physica A: Statisti-Mechanics and its Applications, Volume cal 580, (2021),126144. https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126144.
- Η. [26] B. Mirza and Mohammadzadeh. Thermodynamic geo-Ε 82, metrv of fractional statistics. Phys. Rev. 031137 (2010).https://doi.org/10.1103/PhysRevE.82.031137
- The [27] Jaeger, G. Ehrenfest Classification Phase Transitions: Inof troduction and Evolution. Arch Hist Exact Sc.51,53-81(1998).https://doi.org/10.1007/s004070050021.
- [28] M. Le Bellac, F. Mortessagne, G. G. Batrouni, Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics (Cambridge University Press, 2004).
- [29] M. Nakahara Geometry, Topology, And Physics (IOP Publishing, 2003).
- [30] R. K. Pahtria, P. B. Beale, *Statistical Mechanics*(Elsevier, 2011)
- [31] H. Quevedo, A, Sánchez, and A. Vázquez, Invariant geometry of the ideal gas, arXiv:0811.0222v1[math-ph] (2008)
- [32] L. Olivares-Quiroz and V. Romero-Rochin 2010 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 205302
- [33] V Romero-Rochin, Notes on many body theory of Bose and Fermi gases at low temperatures
- [34] H. Quevedo, *Geometrothermodynamics*, J. Math. Phys. 48, 013506 (2007).
- [35] P. Kumar and T. Sarkar, Phys. Rev. E 90, no. 4, 042145 (2014).
- [36] H. Oshima, T. Obata, H. Hara, Riemann scalar curvature of ideal quantum gases obeying gentiles statistics, Journal of Physics A: Mathematical and General 32 (36) (1999) 6373. doi:10.1088/0305-4470/32/36/302.

- [37] O.A. Palmas Velasco, H. S. Sánchez Morgado, Geometría Riemanniana, (La Prensa de Ciencias, 2007).
- [38] Y. Han and X. 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.
- [39] Zaldívar Corichi, Sasha Alexandra. (2015)."Descripción geométride condensación Bose-Einstein". (Tesis de Maestría). Univerca sidad Nacional Autónoma de México, México. Recuperado de https://repositorio.unam.mx/contenidos/129828.
- [40] Zaldýar Corichi, Sasha Alejandra. (2012)."Geometrotermodinámicuánticos". de ideales (Tesis de Licenciatura). cagases Universidad Autónoma de México, México. Recuperado Nacional de https://repositorio.unam.mx/contenidos/186568.
- [41] B. F. Schutz, Geometrical Methods of Mathematical Physics, (Cambridge University Press, Great Britain, 1982)
- [42] P. Zanardi, P. Giorda, M. Cozzini, Information-Theoretic Differential Geometry of Quantum Phase Transitions, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 100603.
- [43] P. Kumar and T. Sarkar, Geometric critical exponents in classical and quantum phase transitions, Phys. Rev. E 90, 042145 (2014).
- [44] P. Pessoa and C. Cafaro. (2021). Information geometry for Fermi-Dirac and Bose-Einstein quantum statistics https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126061.
- [45] A.P. Polychronakos, Probabilities and path-integral realization of exclusion statistics, Phys. Lett. B365 (1996) 202.
- [46] A. T. Rezakhani, D. F. Abasto, D. A. Lidar, P. Zanardi, Intrinsic Geometry of Quantum Adiabatic Evolution and Quantum Phase Transitions, Phys. Rev. A 82 (2010) 012321.
- [47] G. Ruppeiner, Thermodynamics: A Riemannian geometric model, Phys. Rev. A 20, 1608 (1979).

- [48] G. Ruppeiner, Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory, Rev. Mod. Phys. 67, 605 (1995); 68, 313 (1996).
- [49] B. F. Schutz, A First Course in General Relativity, (Cambridge University Press, New York, 2009)
- [50] B. F. Schutz, Geometrical Methods of Mathematical Physics, (Cambridge University Press, Great Britain, 1982)
- [51] Pineda Reyes, Viridiana. (2019). "Geometrotermodinámica estadística". (Tesis de Doctorado). Universidad Nacional Autónoma de México, Coordinación General de Estudios de Posgrado, UNAM. Recuperado de https://repositorio.unam.mx/contenidos/3538491.
- [52] H. Quevedo and A. Ramirez, A geometric approach to the thermodynamics of the van der Waals system, (2012); arXiv:1205.3544 [math-ph].
- [53] F. Weinhold, Metric Geometry of Equilibrium Thermodynamics I, II, III, IV, V, J. Chem Phys. 63, 2479, 2484, 2488, 2496 (1975); 65, 558 (1976).
- [54] R.M. Wald, *General Relativity*, (The University of Chicago Press, 1984).
- [55] "The 2001 Nobel Prize in Physics Popular Information". _ Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014.Web. 5Mar 2015.<http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2001/popular.html>
- [56] S. A. Zaldivar and H. Quevedo, J. Geom. Phys. 189, 104837 (2023).
- [57] H. Quevedo, M.N. Quevedo, A. Sánchez, J. Geom. Phys. 176 (2022) 104495.
- [58] S. R. Mondal, A. Swaminathan (2010) Geometric properties of generalized polylogarithm, Integral Transforms and Special Functions, 21:9, 691-701, (DOI: 10.1080/10652461003593328)