



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**Geometrotermodinámica del
modelo unidimensional de
Ising**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FÍSICO

P R E S E N T A

OMAR JAIMES GÓMEZ



DIRECTOR DE TESIS
DR. ALBERTO SÁNCHEZ MORENO

MÉXICO, D.F.

2011



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Dedicatoria

- Dedicado a la memoria de mi mamá Taide Gómez González, porque fue ella el primer espíritu auténticamente científico que conocí, y... porque aún sigo esperando su regreso.
- A mi papá Manuel Jaimes Real, que me inculcó desde pequeño el amor por los libros y por la belleza del lenguaje.
- En memoria de mi abuelita María González Pérez, por haberme amado tanto.
- Al amor de mi vida, María de los Ángeles Urbán Gutiérrez, por haberme rescatado con su amor y ternura de una soledad muy despiadada.
- A mi hijo Omar, a quien admiro profundamente por ser un verdadero artista, y que con sus palabras de aliento han hecho posible que logre concluir esta meta.
- A mi hijo Ricardo, quien es la viva imagen de la inteligencia, y porque con sus estímulos constantes han hecho realidad mis metas.
- A mi hermana Lizelda, por haberme enseñado que a lo que más le tememos es a lo que vale la pena enfrentarnos.
- A mi hermana Eglantina, por su extraordinaria inteligencia, bondad y valentía; fue ella quien me inició en esta aventura maravillosa llamada Física.
- A mi hermana Tatiana, porque su agudeza mental me asombra siempre, y porque el amor que nos profesa a toda su familia (en especial a mis hijos) es incomparable.

- A mi hermana Xóchitl, que desde que era bebé mostró una fortaleza de carácter que la ha hecho superar todos los obstáculos que le ha impuesto la vida.
- A mi sobrino Luis Eduardo, a quien quiero y respeto mucho.
- A la memoria del Dr. Alberto Barajas Celis, por cada una de las enseñanzas que me dejó, por su magistral sabiduría, brillante inteligencia, extraordinaria elocuencia y por haber sido un magnífico ser humano.

Agradecimientos

- Ha sido un privilegio y una interminable alegría haber pasado todo este tiempo de aprendizaje bajo la dirección de mi tutor y amigo de toda la vida, el Dr. Alberto Sánchez Moreno; si este trabajo ha llegado a un feliz término es porque él es un excelente asesor, una gran persona que destaca siempre por su magnanimidad en cualquier aspecto de la vida, académica y personal, *gracias por todo*.
- Agradezco muy en especial al Dr. Hernando Quevedo Cubillos, porque aunque oficialmente no fue mi tutor, en los hechos no podría haber recibido una mejor ayuda que la de él, pues sus amplios conocimientos, que comparte con todos sus alumno de manera totalmente desinteresada y generosa, lo convierten en un gran científico, pero sobre todo en un gran ser humano.

A mis sinodales:

- Dr. Alipio Gustavo Calles Martínez, que mostró una gran paciencia, delicadeza y comprensión hacia mi persona, no me extraña porque él siempre se ha destacado en ese aspecto de la vida.
- Dr. Darío Núñez Zúñiga, porque gracias a sus comentarios muy acertados este trabajo mejoró notablemente.
- M.C. Augusto Cabrera Manuel, con sus observaciones muy agudas logró que la tesis no tuviera errores, gracias también por ser un maestro muy notable.
- Dr. Luis Rodríguez Fernández, porque siempre se muestra dispuesto a ayudar a cualquier alumno que lo necesite.

Por último, a todas aquellas personas que me han acompañado en todos los momentos importantes de mi vida:

- (M.H.) Acevedo Cardona, Marco Antonio; Alfaro Molina, José Rubén; Alfaro Quiza, Rubén; Arroyo Ángeles, Rubén; Arvizo Flores, Carlos; (M.T.) Díaz Castro, Ricardo; González Rodríguez, Juan José; Martínez Ledezma, Juan Luis; Morales Morales, Juan Gabriel; Ruvalcaba Sil, José Luis; Santana Hernández, Pacomio; Vázquez Hernández Daniel.
- Mtra. Francisca Romero Salgado, quien es el ejemplo de lo que debe ser un buen líder sindical.
- Una mención muy especial merece mi amigo Leonardo Espinosa, porque su ayuda siempre desinteresada y oportuna fueron vitales para poder escribir este trabajo correctamente.

Introducción

La relación que existe entre la Física y las Matemáticas es la base fundamental de la Ciencia. Dentro de las Matemáticas, la Geometría, durante mucho tiempo, ha demostrado poseer principios que van de acuerdo con la realidad existente, es decir, sus conceptos, proposiciones y resultados son inspirados por la realidad. Así, la Termodinámica, como parte de ella, no ha escapado a la interpretación geométrica. En esta introducción revisaremos algunos aspectos de esa historia.

Geometría y Física

La geometría de Euclides es con la que primero se tiene contacto (recordemos que la palabra geometría etimológicamente significa medida de la Tierra [1]). Fue esta geometría la que utilizaron las antiguas civilizaciones como la mesopotámica, la egipcia y la babilónica para darle una utilidad práctica en la edificación de sus ciudades. Sin embargo, fueron los griegos quienes por primera vez le dieron un cuerpo teórico al dotarla de axiomas y teoremas, que implican los resultados prácticos ya conocidos; el teorema de Pitágoras es uno de estos admirables ejemplos.

La axiomatización adquiere una mayor importancia cuando se incluye al álgebra, dando como resultado los inicios de lo que conocemos como Geometría Analítica, aportación de René Descartes y contemporáneos suyos como Fermat y Pascal. Dicha axiomatización fue clarificada posteriormente por David Hilbert en 1899 en su libro *Fundamentos de la Geometría*.

En 1872, la Geometría Analítica alcanza su madurez con los trabajos de Julius Wilhelm Richard Dedekind [2] acerca de los números reales. Así, con la Geometría Analítica se pudo concebir el concepto de *espacio* como un conjunto de puntos, cada uno de ellos caracterizado por tres coordenadas numéricas. Este concepto fundamental nos ha permitido, en la actualidad,

poder manejar diferentes objetos analíticos, los cuales son elementos de ese espacio.

Después, en el transcurso del siglo XIX, Nikolái Ivánovich Lobachevski, Johann Carl Friedrich Gauss y János Bolyai crearon otras geometrías lógicamente autoconsistentes, pero que difieren de la de Euclides en un aspecto crucial: abandonan el quinto postulado relacionado con las paralelas. Éste afirma que [3]

“si una línea recta corta a dos líneas rectas, de manera tal que los dos ángulos interiores que se formen en el mismo lado no sumen más de dos ángulos rectos, estas líneas rectas prolongadas indefinidamente se cortarán a la larga en el lado en el cual los ángulos son menores que dos ángulos rectos.”

Una forma equivalente es la siguiente: dos rectas diferentes en un plano son paralelas o se cortan sólo en un punto. Estas nuevas geometrías no euclidianas revolucionaron la forma de estudiar la realidad. Por ejemplo, la geometría de la superficie de la Tierra es claramente no euclidiana y solamente parece euclidiana cuando se estudia de manera local. La Teoría General de la Relatividad de Einstein es el ejemplo más sorprendente de la aplicación de la geometría no euclidiana a la Física, al describir apropiadamente el Universo en el que vivimos.

La Relatividad General de Einstein emplea otra forma de geometría, conocida como Geometría de Variedades, introducida por Georg Friedrich Bernhard Riemann en 1854 [4]. La idea principal en la que se basa esta nueva teoría es proponer a la geometría como una variedad dada en una álgebra de funciones. Esto significa que los sistemas de referencia no están definidos en la totalidad del espacio y, además, se permiten cambios de coordenadas que vengan dados por funciones reales de cierto tipo general. Una variedad se define como un espacio continuo que localmente se ve como euclidiano [5].

Geometría y Termodinámica

La sección precedente nos permite observar que algunas de las ramas de la Física son factibles de ser geometrizadas. Por tal motivo, es válido preguntarnos si otras de sus ramas, diferentes a la mencionada, pueden ser descritas en términos de conceptos geométricos. En particular, estamos interesados en la Termodinámica. La respuesta a esta pregunta resulta ser afirmativa. A continuación describiremos brevemente cómo ha ocurrido este hecho.

El estudio geométrico de la Termodinámica comenzó con la reformulación

de Gibbs de la teoría de estados de equilibrio [6]. Gibbs interpretó el conjunto de estados de equilibrio de un sistema termodinámico como una superficie. Este fue el comienzo de la que hoy conocemos como Geometría Diferencial de Variedades.

En su artículo de 1873 titulado *Métodos gráficos en la termodinámica de los fluidos*, Gibbs comenta que de cualquier ecuación de la forma: $U = U(S, V)$, se pueden deducir todas las propiedades termodinámicas del fluido, en lo que concierne a procesos reversibles. Además, analiza las ventajas de considerar diferentes diagramas: P vs. V , S vs. T , S vs. V , $\log V$ vs. $\log P$, S vs. $\log T$, etc., en los que P representa la presión, V el volumen, S la entropía y T la temperatura.

En otro de sus trabajos, publicado también en 1873, denominado *Un método de representación geométrica de las propiedades termodinámicas de las sustancias por medio de superficies*, Gibbs afirma que de la superficie $S = S(U, V)$, a la que llama superficie termodinámica del sistema, se puede deducir otra superficie como $P = P(V, T)$, y analiza cómo se representarían sistemas en los que coexisten varias fases (estados) de la materia en equilibrio termodinámico, e infiere la ecuación: $\frac{dP}{dT} = \frac{S_b - S_a}{V_b - V_a}$, conocida, hasta ese momento, solamente de manera empírica.

Finalmente, en su artículo titulado *Sobre el equilibrio de las sustancias heterogéneas*, expresa que cualquier cambio en un sistema aislado está acompañado de un aumento de entropía y que cuando la entropía haya alcanzado un máximo el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico. Además, propone que, para el equilibrio de cualquier sistema aislado, es necesario y suficiente que, en todas las posibles variaciones del estado del sistema que no alteran su energía interna, la variación de su entropía sea mayor o igual a cero. Esto se conoce en la actualidad como la segunda ley de la termodinámica, que es considerada como una de las primeras aplicaciones de la Geometría Diferencial a la Termodinámica.

Gibbs envió una copia de su artículo a James Clerk Maxwell. El trabajo de Gibbs asombró a Maxwell a tal grado que inmediatamente lo divulgó entre los científicos de Cambridge y lo incluyó en las posteriores ediciones de su teoría del calor [7]. Un dato interesante es que Maxwell construyó un modelo en yeso de una superficie termodinámica, donde se representaban los estados de equilibrio del agua, elaborado a partir de la ecuación fundamental, y se lo envió a Gibbs como regalo.

Mucho tiempo después, en los años setenta del siglo XX, Frank Weinhold publicó 5 artículos [8] basados en la siguiente observación:

Si se interpreta a las diferenciales como cantidades vectoriales, y se usa a la matriz de segundas derivadas de la energía interna como una métrica, entonces muchas de las identidades termodinámicas pueden ser interpretadas de manera geométrica.

A la matriz de la energía interna U se le conoce como la métrica de Weinhold, que se define en un espacio llamado *espacio de equilibrio termodinámico* denotado comúnmente por la letra \mathcal{E} , y matemáticamente se expresa como

$$g_{ab}^W = \frac{\partial^2 U}{\partial E_a \partial E_b} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U}{\partial E_1 \partial E_1} & \frac{\partial^2 U}{\partial E_1 \partial E_2} & \cdots & \frac{\partial^2 U}{\partial E_1 \partial E_n} \\ \frac{\partial^2 U}{\partial E_2 \partial E_1} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \vdots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial^2 U}{\partial E_n \partial E_1} & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (1)$$

en donde las E_a representan a las variables extensivas del sistema, con lo cual el elemento de línea toma la forma:

$$ds_w^2 = \frac{\partial^2 U}{\partial E_a \partial E_b} dE_a dE_b. \quad (2)$$

Siguiendo la misma idea, George Ruppeiner, en 1979 [9], para entender el significado de la longitud termodinámica, propone una métrica conformalmente equivalente a la métrica de Weinhold. En la teoría de Ruppeiner se considera a la entropía, en lugar de la energía, como la función fundamental de las variables extensivas, y a la matriz construida a partir de ésta se le conoce como la métrica de Ruppeiner. Como en el caso de Weinhold, la métrica se define en el espacio de equilibrio termodinámico \mathcal{E} . Su representación matemática es

$$g_{ab}^R = -\frac{\partial^2 S}{\partial F_a \partial F_b} = -\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial F_1 \partial F_1} & \frac{\partial^2 S}{\partial F_1 \partial F_2} & \cdots & \frac{\partial^2 S}{\partial F_1 \partial F_n} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial F_2 \partial F_1} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \vdots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial^2 S}{\partial F_n \partial F_1} & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (3)$$

en donde F_a representa a las variables extensivas del sistema. Aquí el elemento de línea será

$$ds_R^2 = -\frac{\partial^2 S}{\partial F_a \partial F_b} dF_a dF_b. \quad (4)$$

La relación entre las métricas está dada por

$$ds_R^2 = \frac{1}{T} ds_W^2. \quad (5)$$

Las teorías de Weinhold y Ruppeiner permiten geometrizar diferentes sistemas termodinámicos. Sin embargo, a pesar de las múltiples investigaciones realizadas en esta dirección, sus teorías carecen de un ingrediente esencial que todo análisis termodinámico debe cumplir, nos referimos a la *Invarianza de Legendre*. Este problema trae como consecuencia que ambas teorías entreguen resultados inconsistentes para un mismo sistema termodinámico [10], ya que la *Invarianza de Legendre* tiene como finalidad que las propiedades termodinámicas sean independientes del potencial termodinámico usado para describirlas ¹. En el caso de Weinhold y Ruppeiner, es claro que esta condición no se cumple, porque la diferencia fundamental entre ambas teorías radica en que utilizan distinto potencial termodinámico: la energía interna U en el caso de Weinhold, y la entropía S en el caso de Ruppeiner. No obstante, la elección de uno u otro potencial no tendría por qué dar resultados distintos en el análisis de un mismo sistema termodinámico, como sucede en varios ejemplos al aplicar estas teorías.

En 2007 el problema referente a las métricas de Ruppeiner y Weinhold fue resuelto por Hernando Quevedo, al elaborar el formalismo conocido como **Geometrotermodinámica** [11], que tiene como bases fundamentales la **Geometría Diferencial** y la **Invarianza de Legendre**, y ha mostrado, hasta el momento, ser la teoría más consistente para analizar cualquier sistema termodinámico desde el punto de vista geométrico [12]-[19].

Aquí se utilizará la Geometrotermodinámica para analizar la geometría de sustancias paramagnéticas y ferromagnéticas representadas por el gas ideal paramagnético y el modelo unidimensional de Ising, respectivamente.

La tesis se organiza de la siguiente manera:

1. En el capítulo 1, revisaremos los conceptos que le dan sustento al gas ideal paramagnético y al modelo unidimensional de Ising.
2. En el capítulo 2, estudiaremos la clasificación de las transiciones de fase para los modelos termodinámicos ordinarios.

¹El potencial termodinámico también es llamado función fundamental o ecuación fundamental.

3. En el capítulo 3, analizaremos los fundamentos de la Geometrotermodinámica.
4. En el capítulo 4, aplicaremos la Geometrotermodinámica al gas ideal paramagnético y al modelo unidimensional de Ising.
5. Finalmente, el capítulo 5 lo dedicaremos a las conclusiones.

Convenciones y notaciones

En esta tesis se utilizan las siguientes convenciones y notaciones:

- \mathbb{Z} denota el campo de los números enteros.
- Se usan unidades geometrizadas tales que las constantes de gravitación universal (G), la velocidad de la luz en el vacío (c), la constante de Planck entre 2π y la constante de Boltzmann son iguales a la unidad, es decir, $G = c = \hbar = k_B = 1$ (ver apéndice A).
- g_{ab} denota el tensor métrico.
- ds_W denota el elemento de línea de Weinhold.
- ds_R denota el elemento de línea de Ruppeiner.
- ∂_a indica derivación parcial.
- d denota la diferencial no exacta.
- Los símbolos de Christoffel Γ^a_{bc} son definidos por:

$$\Gamma^a_{bc} = \frac{1}{2}g^{ad} \left[\partial_c g_{bd} + \partial_b g_{cd} - \partial_d g_{bc} \right].$$

- Z denota la función de partición.
- F denota la energía libre de Helmholtz.
- \mathcal{G} denota la energía libre de Gibbs.
- U denota la energía interna.

- S denota la entropía.
- V denota el volumen.
- T denota la temperatura.
- N denota el número total de partículas.
- P denota la presión.
- Q denota el calor.
- α denota el coeficiente de dilatación.
- $\beta = \frac{1}{k_B T}$.
- κ denota la compresibilidad.
- χ denota la susceptibilidad magnética.
- C denota la capacidad calorífica.
- \vec{E} denota el campo eléctrico.
- \vec{B} denota el campo magnético.
- $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0}$ denota la intensidad magnética.
- \vec{M} denota la magnetización.
- μ_0 denota la permeabilidad magnética para el vacío.
- $\vec{\mu}$ denota el momento dipolar magnético.
- m denota la masa.
- \vec{p} denota el momento lineal.
- ϵ denota la energía total.
- k_B denota la constante de Boltzman.
- K denota la unidad de temperatura Kelvin.

- μ_B denota el magnetón de Bohr.
- \mathcal{T} denota el espacio fase.
- \mathcal{E} denota el espacio de equilibrio termodinámico.
- Θ_G denota la una forma de Gibbs.
- G denota el elemento de línea en el espacio fase \mathcal{T} .
- g denota el elemento de línea en el espacio de equilibrio termodinámico \mathcal{E} .
- Z^A denota las coordenadas en el espacio fase.
- E^a denota las variables extensivas.
- I^a denota las variables intensivas.
- Φ denota el potencial termodinámico.
- Los índices repetidos se suman (convención de suma de Einstein).

Índice general

Dedicatoria	III
Agradecimientos	V
Introducción	VII
Convenciones y notaciones	XIII
1. Sustancias paramagnéticas	1
1.1. Introducción	1
1.2. Gas ideal paramagnético	1
1.3. Temperaturas altas	4
1.4. Modelo unidimensional de Ising	6
1.5. Función fundamental	6
2. Transiciones de fase	9
2.1. Introducción	9
2.2. Transición de fase	9
2.3. Capacidad calorífica	10
2.4. Orden de las transiciones de fase	11
3. Geometrotermodinámica (GTD)	13
3.1. Introducción	13
3.2. Espacios en GTD	13
3.3. Invarianza de Legendre	14
3.4. Métrica en GTD	16
4. GTD de los modelos paramagnéticos	19
4.1. Introducción	19

4.2. La métrica del gas ideal paramagnético	19
4.3. La métrica del modelo unidimensional de Ising	21
4.4. Curvatura e interacción termodinámica	23
4.5. Curvatura y transiciones de fase	24
4.6. Invarianza de la capacidad calorífica	28
4.7. Geodésicas y transición de fase	31
4.7.1. Geodésicas del gas ideal paramagnético	34
4.7.2. Geodésicas del modelo unidimensional de Ising	37
5. Conclusiones	39
A. Sistema Internacional de Unidades (SI)	43
A.1. Nuestra convención de Unidades	45
B. Deducción de la función de partición	49
B.1. Introducción	49
B.2. Función de partición	49
Bibliografía	51

Capítulo 1

Sustancias paramagnéticas

1.1. Introducción

Las sustancias paramagnéticas, en presencia de un campo magnético externo, se imanán y adquieren una polarización magnética proporcional al campo magnético externo y en el mismo sentido; por esa razón, son atraídas por un imán. Tal comportamiento se debe a que, en las sustancias, los átomos que las constituyen tienen un electrón sin aparear en su última órbita o capa electrónica; electrón cuyo espín queda alineado en presencia de un campo magnético.

En el presente capítulo, haremos una revisión de los modelos que describen este tipo de sistemas físicos.

1.2. Gas ideal paramagnético

Los átomos de estas sustancias tienen un momento dipolar magnético $\vec{\mu}$. Si las sustancias son sujetas a un campo magnético externo \vec{H} , el dipolo trata de alinearse en la dirección de dicho campo. En este caso, la energía potencial de cada dipolo se define por $-\vec{\mu} \cdot \vec{H}$, y todos los momentos magnéticos de los átomos se sumarán al momento de magnetización total \vec{M} ¹ de la sustancia. También sabemos que la temperatura tiende a desalinear los dipolos magnéticos. Por tanto, cuando existen temperaturas altas, la magnetización desaparece, porque el movimiento estadístico de los dipolos contrarresta el

¹ \vec{M} es conocido como el vector de magnetización y representa el momento dipolar magnético por unidad de volumen.

alineamiento y los dipolos son estadísticamente distribuidos, cancelándose los momentos magnéticos unos con otros. La dependencia de la magnetización respecto a la temperatura se conoce como la ley de Curie y tiene la siguiente forma:

$$\vec{M} \propto \frac{\vec{H}}{T}, \quad (1.1)$$

con T que representa a la temperatura. Cuando en el estudio de dichas sustancias no se considera la interacción entre los espines de los átomos que las constituyen, se dice que estamos analizando un gas ideal paramagnético. En caso contrario, el modelo se conoce como modelo de Ising. En la sección actual analizaremos el caso ideal.

Para encontrar la función fundamental, calculamos primero la función de partición del modelo. También debemos considerar un sistema constituido por N dipolos que no interaccionan. La energía del sistema es, entonces,

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}, \quad (1.2)$$

en la cual se ha ignorado la energía de rotación de los dipolos. De acuerdo con [20], la función de partición del sistema tiene la forma²:

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[4\pi \frac{\sinh(\beta\mu H)}{\beta\mu H} \right]^N, \quad (1.3)$$

y de acuerdo con [21], la energía libre de Helmholtz F para este sistema será:

$$F = -\frac{N}{\beta} \left[\ln V - \ln N - \frac{3}{2} \ln \beta + \ln \left| 4\pi \frac{\sinh(\beta\mu H)}{\beta\mu H} \right| + F_0 \right], \quad (1.4)$$

donde F_0 es una constante.

De acuerdo con [22], la ecuación (1.4) es una ecuación o función fundamental del sistema termodinámico, en este caso del gas ideal paramagnético. Decimos, entonces, que tenemos dicha expresión en la representación de

²Ver el apéndice B.

Helmholtz. Ésta es fundamental porque a partir de ella es posible conocer toda la termodinámica del sistema, por ejemplo sus ecuaciones de estado o su capacidad calorífica.

Si utilizamos los conocimientos de la Termodinámica, podemos calcular la entropía S del sistema, misma que se define por la expresión

$$S = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta}. \quad (1.5)$$

Si se sustituye la ecuación (1.4) en la relación (1.5), se obtiene

$$S = N \left[\ln V - \ln N - \frac{3}{2} \ln \beta + \ln \left| 4\pi \frac{\sinh(\beta\mu H)}{\beta\mu H} \right| - \beta\mu H \coth(\beta\mu H) + S_0 \right], \quad (1.6)$$

donde S_0 es una constante.

Ahora, si consideramos que la magnetización M se expresa como

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H}, \quad (1.7)$$

también la podemos calcular utilizando la relación (1.4). El resultado de la operación es

$$M = -\frac{N}{\beta H} \left[1 - \beta\mu H \coth(\beta\mu H) \right], \quad (1.8)$$

y sustituyendo esta última expresión en la ecuación (1.6), obtenemos que la entropía se puede escribir en la forma:

$$S = N \left[\ln V - \ln N - \frac{3}{2} \ln \beta + S_0 \right] - \beta H M + N \ln \left| 4\pi \frac{\sinh(\beta\mu H)}{\beta\mu H} \right|. \quad (1.9)$$

La ecuación (1.9) es la entropía para un gas ideal paramagnético.

Ahora bien, si queremos obtener la energía interna del sistema, debemos aplicar la relación:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z, \quad (1.10)$$

en la que, si utilizamos nuevamente la relación (1.3), se transforma en

$$U = \frac{N}{\beta} \left[\frac{3}{2} + \left(1 - \beta\mu H \coth(\beta\mu H) \right) \right]. \quad (1.11)$$

1.3. Temperaturas altas

Si el campo magnético aumenta para temperaturas finitas, la magnetización M crece linealmente con el campo magnético H . Esta región es interesante porque los momentos dipolares atómicos son del orden de la magnitud del magnetón de Bohr $\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \frac{\text{Coulomb}}{\text{Kg}}$, por ejemplo, a temperatura ambiente, $T = 293,15K$ y también para campos magnéticos intensos $\beta\mu H \ll 1$. Solamente en el caso de temperaturas muy bajas, cuando $T \rightarrow 0$, la región de saturación $\beta\mu H \gg 1$ puede ser alcanzada, en donde casi todos los dipolos se alinean en dirección del campo.

Si consideramos la región $\beta\mu H \ll 1$, podemos hacer la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} 1 - \beta\mu H \coth(\beta\mu H) &= 1 - \beta\mu H \left[\frac{1}{\beta\mu H} + \frac{1}{3}\beta\mu H - \frac{(\beta\mu H)^3}{45} + \dots \right], \\ &\approx -\frac{1}{3}\beta^2\mu^2 H^2, \end{aligned} \quad (1.12)$$

$$\sinh(\beta\mu H) = \beta\mu H + \frac{(\beta\mu H)^3}{3!} + \dots \approx \beta\mu H. \quad (1.13)$$

En ella, la magnetización M se obtiene sustituyendo la relación (1.12) en (1.8), con lo cual se logra que

$$M = \frac{1}{3}N\beta\mu^2 H, \quad (1.14)$$

de aquí concluimos que el campo magnético se expresa como

$$H = \frac{3M}{N\beta\mu^2}. \quad (1.15)$$

Si utilizamos la aproximación (1.13) junto con la ecuación (1.15) en la expresión para la entropía (1.9), obtenemos:

$$S = N \left[\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln T - \frac{3}{\mu^2} \frac{M^2}{N^2} + s_0 \right], \quad (1.16)$$

donde s_0 es un valor constante y consideramos que $\beta = \frac{1}{T}$. Esta última ecuación tiene la forma de la ecuación (3.3) en [25], que ha sido empleada en estudios de geometrización de la Termodinámica.

Para el caso de la representación energética, sustituimos la aproximación (1.12) en la relación (1.11) para obtener

$$U = \frac{3N}{2\beta} - \frac{1}{3} N \beta \mu^2 H^2, \quad (1.17)$$

y utilizando la expresión (1.15) para el campo magnético, llegamos a la relación

$$U = \frac{3N}{2\beta} - \frac{3}{\beta \mu^2} \frac{M^2}{N}, \quad (1.18)$$

que es la ecuación fundamental, en la representación de la energía, para esta aproximación.

Ahora, la ecuación (1.18) implica que la temperatura T queda representada por la relación

$$T = \frac{2U}{3N} \frac{1}{\left[1 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right]}, \quad (1.19)$$

en donde utilizamos la ecuación $\beta = \frac{1}{T}$. Si sustituimos la ecuación anterior para la temperatura en la ecuación (1.16), obtenemos

$$S = N \left[\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{U}{N} \right) - \frac{3}{2} \ln \left| 1 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right| - \frac{3}{\mu^2} \frac{M^2}{N^2} + s'_0 \right], \quad (1.20)$$

donde s'_0 es una constante. Finalmente, con la última ecuación podemos obtener la energía que tiene la forma:

$$U = N \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \left(1 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right)^{\frac{2}{3}} e^{\frac{2}{3} [\frac{S}{N} + s'_0 + \frac{3M^2}{\mu^2 N^2}]}. \quad (1.21)$$

Las relaciones (1.20) y (1.21) son las ecuaciones o funciones fundamentales en la representación de la entropía y de la energía, respectivamente, en esta aproximación, y son de vital importancia, porque a partir de ellas es posible conocer toda la termodinámica del sistema.

1.4. Modelo unidimensional de Ising

Cuando en un sistema paramagnético consideramos la interacción entre los espines de los átomos, estamos en presencia del llamado modelo de Ising, que se ha utilizado para describir diferentes fenómenos en los cuales los efectos colectivos son producidos por interacciones locales entre partículas en dos estados cuánticos (espines), como es el caso de los materiales ferromagnéticos. El modelo de Ising se ha estudiado en una y dos dimensiones, siendo el unidimensional el de mayor simplicidad, pues el modelo unidimensional simple de Ising es de los pocos que describen partículas interactuantes; además, se conoce su solución exacta. El modelo unidimensional de Ising igualmente nos permite la comprensión del fenómeno de transición de fase. Del mismo modo, si se extiende a dos dimensiones, es la base de diversos métodos de cálculo en la física estadística de los fenómenos críticos. Así mismo se sabe que el modelo sirve no sólo para explicar fenómenos físicos, sino también de carácter biológico [23] [24]. A continuación, estudiaremos la función fundamental para este sistema termodinámico.

1.5. Función fundamental

La mecánica estadística nos dice que el elemento principal para encontrar la función fundamental es la función de partición. De acuerdo con [26], el logaritmo de la función de partición, para el modelo unidimensional de Ising, tiene la forma:

$$\ln Z = \frac{J}{T} + \ln \left| \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4\frac{J}{T}}} \right|, \quad (1.22)$$

donde μ es el momento dipolar magnético y J es un parámetro que depende de la separación entre átomos, que mide la fuerza del cambio de interacción.

Entonces, la mecánica estadística indica que la energía libre de Helmholtz F está dada por la expresión:

$$F = -T \ln Z. \quad (1.23)$$

Si sustituimos la relación (1.22) en la ecuación (1.23), obtenemos:

$$F = - \left\{ J + T \ln \left| \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4\frac{J}{T}}} \right| \right\}. \quad (1.24)$$

De acuerdo con [22], la relación (1.24) es la ecuación fundamental en la representación de Helmholtz.

Nuevamente, como en la sección 1.2, la energía interna U se determina por la ecuación

$$U = -\frac{\partial[\ln Z]}{\partial\beta}, \quad (1.25)$$

con $\beta = \frac{1}{T}$. Usando otra vez la ecuación (1.22) en la ecuación para la energía (1.25), obtenemos:

$$U = \frac{J e^{-4\frac{J}{T}} - \mu H \sinh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] - J \left[I \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]}{I \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]}, \quad (1.26)$$

donde

$$I(T, H) = \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4\frac{J}{T}}}. \quad (1.27)$$

De esta manera, de acuerdo con (1.5), la entropía tiene la forma:

$$S = \frac{T \ln \left[\cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + I \right] \left[\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) - I \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) - e^{-4 \frac{J}{T}} \right] + \mu H \sinh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] - 2J e^{-4 \frac{J}{T}}}{T I \left[\cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + I \right]}, \quad (1.28)$$

Cuando $J = 0$, las ecuaciones (1.24), (1.26) y (1.28) toman la siguiente forma:

$$F = -T \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right), \quad (1.29)$$

$$U = -\mu H \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right), \quad (1.30)$$

$$S = -\frac{\ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]}{\cosh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right)} + \frac{\mu H}{T} \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right), \quad (1.31)$$

cuyas ecuaciones son las correspondientes para el caso en que no existe interacción entre espines.

Capítulo 2

Transiciones de fase

2.1. Introducción

Las transiciones de fase suceden en muchas situaciones del mundo físico, por ejemplo, en la evaporación de un líquido o en la condensación de un gas. Lo interesante del fenómeno es que presenta similitudes en una cierta región del espacio de parámetros llamada región crítica. El problema que enfrenta la termodinámica en equilibrio es explicar estas transiciones. En este capítulo haremos una revisión de dichos conceptos.

2.2. Transición de fase

Las propiedades termodinámicas de un sistema están dadas por los atributos físicos macroscópicos observables en él, mediante la observación directa o mediante algún instrumento de medida. Por esta razón, se puede decir que un sistema está en equilibrio termodinámico cuando no se observa ningún cambio en sus propiedades termodinámicas a lo largo del tiempo. Los sistemas en equilibrio termodinámico cumplen con un requisito de estabilidad que se refiere a que la entropía debe ser máxima. Tal requisito lleva a los siguientes criterios de estabilidad [22] que están en la representación de la energía interna U , donde S y V representan a la entropía y al volumen respectivamente:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} > 0, \quad \frac{\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} - [\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}]^2}{\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}} > 0, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} > 0. \quad (2.1)$$

Estos criterios deben ser satisfechos simultáneamente por la ecuación fundamental de todo sistema que deba permanecer homogéneo y estable; si no se cumplen, el sistema se separa en dos o más partes. Dicha separación se conoce como transición de fase.

2.3. Capacidad calorífica

Cuando un sistema absorbe calor, puede o no tener lugar una variación de temperatura, dependiendo de la naturaleza del proceso. Si un sistema termodinámico experimenta un cambio de temperatura ΔT de una T_i a una T_f , durante la transferencia de calor Q , se define como capacidad calorífica media \bar{C} del sistema a la cantidad [27]

$$\bar{C} = \frac{Q}{T_f - T_i}. \quad (2.2)$$

Por tanto, la capacidad calorífica instantánea se expresará como

$$C = \lim_{T_f \rightarrow T_i} \frac{Q}{T_f - T_i} = \frac{dQ}{dT}, \quad (2.3)$$

donde d representa la diferencial inexacta. Para un proceso infinitesimal cuasiestático, la primera ley de la Termodinámica tiene la forma:

$$dQ = dU - dW, \quad (2.4)$$

donde dW es el trabajo cuasiestático asociado con los diferentes procesos termodinámicos. Por eso, la capacidad calorífica queda definida como

$$C_X = \left(\frac{dU}{dT} \right) \Big|_X, \quad (2.5)$$

donde X denota el conjunto de parámetros que se mantienen constantes durante el proceso.

Si un sistema absorbe una cantidad infinitesimal de calor dQ durante un proceso reversible, la variación de la entropía del sistema es igual a

$$dS = \frac{dQ}{T}. \quad (2.6)$$

Por tanto, la cantidad total de calor transferido en el proceso se expresa como

$$Q = \int_i^f T dS. \quad (2.7)$$

El calor se representa por el área bajo la curva en un diagrama de Temperatura contra Entropía. La naturaleza de la curva del diagrama se determina por la clase de proceso reversible que experimenta el sistema. Un proceso isotérmico quedará representado geoméricamente por una línea recta horizontal. En el caso de un proceso adiabático reversible, tenemos que $dQ = 0$, y en consecuencia, $dS = 0$, lo que supone una entropía constante. La representación geométrica de un proceso a entropía constante, en un diagrama TS , es una línea recta vertical.

Si dos sistemas están infinitesimalmente próximos, se tiene que $dQ = TdS$, lo que implica que

$$\frac{dQ}{dT} = T \frac{dS}{dT}. \quad (2.8)$$

Entonces, a X constante tenemos

$$C_X = \left(\frac{dQ}{dT} \right) \Big|_X = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) \Big|_X. \quad (2.9)$$

2.4. Orden de las transiciones de fase

Las transiciones de fase de un sistema termodinámico se pueden clasificar de acuerdo con las discontinuidades de las derivadas del potencial termodinámico conocido como la energía libre de Gibbs. A tal clasificación se acostumbra llamarla clasificación de Ehrenfest. A continuación la describiremos brevemente.

La energía libre de Gibbs \mathcal{G} es una función de las variables termodinámicas E^a , tales como N (número de partículas), T (temperatura), P (presión), \vec{E} (campo eléctrico), \vec{H} (campo magnético), etc., es decir,

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}(N, T, P, \vec{E}, \vec{H}, \dots), \quad (2.10)$$

también tendremos variables I^a asociadas a las variables E^a que se calculan mediante la expresión

$$I^a = \pm \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial E^a}. \quad (2.11)$$

Entonces, tendremos una transición de fase de primer orden en los puntos donde la primera derivada de la energía libre de Gibbs presente discontinuidades:

$$S = -\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial T} \Big|_{N,P,\dots}, \quad V = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial P} \Big|_{N,T,\dots}, \quad M = -\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial H} \Big|_{N,T,\dots}. \quad (2.12)$$

Una transición de fase de segundo orden ocurrirá en puntos donde la energía libre de Gibbs \mathcal{G} y sus primeras derivadas son continuas, pero sus segundas derivadas sean discontinuas:

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial T^2} \Big|_{N,P,\dots}, \quad \kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial P^2} \Big|_{N,T,\dots}, \quad \alpha = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial P \partial T} \Big|_{N,\dots}, \quad \chi = -\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial H^2} \Big|_{N,T,\dots}. \quad (2.13)$$

Las transiciones de fase de orden superior se definen de forma análoga.

Capítulo 3

Geometrotermodinámica (GTD)

3.1. Introducción

El estudio de cualquier sistema termodinámico requiere especificar las variables extensivas, las variables intensivas y el potencial termodinámico que lo describen. Por ejemplo, en el caso más sencillo donde se involucran únicamente dos grados de libertad termodinámico, el potencial termodinámico es solamente una función de dos variables independientes.

En el presente capítulo, mostraremos cómo la Geometrotermodinámica geometriza la Termodinámica al considerar como coordenadas de una variedad diferenciable \mathcal{T} las variables termodinámicas. A partir de ello, se pueden estudiar todas las propiedades físicas de los sistemas termodinámicos; en particular, las transiciones de fase y la interacción termodinámica.

3.2. Espacios en GTD

En Geometrotermodinámica partimos del hecho de que podemos construir una variedad diferenciable, a la cual llamaremos espacio fase y que denotaremos con la letra \mathcal{T} . En él se pueden introducir diferentes objetos geométricos, como los que mencionaremos a continuación.

El primer objeto geométrico que definiremos en nuestro espacio \mathcal{T} se conoce como una forma de Gibbs:

$$\Theta_G = d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b, \quad (3.1)$$

que, como veremos más adelante, contiene la información relacionada con la primera ley de la Termodinámica.

El siguiente objeto, igualmente valioso, que definiremos en el mismo espacio, será la métrica G , que dependerá de todas las coordenadas de \mathcal{T} . El conjunto de elementos \mathcal{T} , Θ_G y G recibe el nombre de *variedad Riemanniana de contacto*, y representa una estructura auxiliar necesaria para implementar de manera consistente las propiedades termodinámicas del sistema en estudio.

Otro elemento fundamental en GTD es el espacio de estados de equilibrio termodinámico \mathcal{E} . Es aquí donde los sistemas en equilibrio termodinámico existen y sus propiedades pueden ser investigadas. El espacio \mathcal{E} es un subespacio del espacio fase \mathcal{T} , donde se cumple:

$$\Theta_G \Big|_{\mathcal{E}} = 0. \quad (3.2)$$

Dicha ecuación significa que la proyección de la forma fundamental de Gibbs, sobre el espacio de estados de equilibrio termodinámico, desaparece. De la misma forma, si proyectamos la métrica G , ésta inducirá una métrica g en \mathcal{E} , es decir,

$$G \Big|_{\mathcal{E}} = g, \quad (3.3)$$

que además heredará las propiedades de G , como por ejemplo *la invarianza de Legendre*.

3.3. Invarianza de Legendre

Es por todos conocido que las propiedades termodinámicas de los sistemas físicos que se estudian, no deben depender del potencial termodinámico utilizado para su descripción [22], porque diferentes potenciales termodinámicos se relacionan por medio de una transformación de Legendre, característica conocida como *invarianza de Legendre*. Por tanto, en GTD se requiere que la

estructura del espacio fase \mathcal{T} sea invariante de Legendre. La transformación de Legendre se define en \mathcal{T} como el cambio de coordenadas

$$\left(\Phi, E^a, I^a\right) \longrightarrow \left(\tilde{\Phi}, \tilde{E}^a, \tilde{I}^a\right), \quad (3.4)$$

tal que [28]

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l \quad ; \quad E^i = -\tilde{I}^i \quad ; \quad E^j = \tilde{E}^j; \quad I^i = \tilde{E}^i; \quad I^j = \tilde{I}^j. \quad (3.5)$$

Donde $i \cup j$ es cualquier disposición ajena del conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$, y $k, l, = 1, \dots, i$. En particular, para $i = \{1, \dots, n\}$ e $i = \emptyset$, se obtiene la transformación total de Legendre y la identidad, respectivamente. La tilde indica las nuevas coordenadas. Para ejemplificar la citada transformación, consideremos el caso de un espacio fase con coordenadas U, S, V, T y P . Entonces, la transformación de Legendre será

$$\left(U, S, V, T, P\right) \longrightarrow \left(\tilde{U}, \tilde{S}, \tilde{V}, \tilde{T}, \tilde{P}\right), \quad (3.6)$$

con las siguientes posibilidades:

$$\tilde{U}_1 = U - TS, \quad S = -\tilde{T}, \quad T = \tilde{S}, \quad V = \tilde{V}, \quad P = \tilde{P}, \quad (3.7)$$

$$\tilde{U}_2 = U + PV, \quad S = \tilde{S}, \quad T = \tilde{T}, \quad V = \tilde{P}, \quad -P = \tilde{V}, \quad (3.8)$$

$$\tilde{U}_3 = U - TS + PV, \quad S = -\tilde{T}, \quad T = \tilde{S}, \quad V = \tilde{P}, \quad -P = \tilde{V}. \quad (3.9)$$

En los libros de texto de Termodinámica, los potenciales \tilde{U}_1 , \tilde{U}_2 y \tilde{U}_3 son conocidos como la energía libre de Helmholtz, la entalpía y la energía libre de Gibbs, respectivamente.

Si denotamos por $\Theta_{\mathcal{G}i}$, con $i = 1, 2, 3$, el resultado de aplicar cualquiera de las transformaciones de Legendre precedentes a la uno forma de Gibbs, entonces encontramos que

$$\tilde{\Theta}_{\mathcal{G}i} = d\tilde{U}_i - \tilde{T}d\tilde{S} + \tilde{P}d\tilde{V}, \quad (3.10)$$

lo que muestra que la uno forma de Gibbs es un objeto geométrico invariante de Legendre. Es en este mismo sentido que se pide que la métrica G en \mathcal{T} sea invariante de Legendre.

3.4. Métrica en GTD

Al incorporar la *invarianza de Legendre* en la estructura geométrica del espacio fase y en el espacio de estados de equilibrio termodinámico, se logra que los resultados obtenidos en GTD no dependan de la elección del potencial termodinámico usado para su descripción.

El punto de partida en GTD es construir una métrica invariante de Legendre en el espacio \mathcal{T} y proyectarla en el espacio de equilibrio termodinámico para obtener una métrica igualmente invariante de Legendre en \mathcal{E} [11]

$$g = g_{ab}dx^a dx^b. \quad (3.11)$$

Aquí, las x^a son las coordenadas en \mathcal{E} , y g_{ab} son las componentes de la métrica que, en general, son funciones de las coordenadas x^a . Por consiguiente, el espacio de estados de equilibrio termodinámico se convierte en una variedad Riemanniana, cuyas propiedades geométricas se relacionan con las propiedades del correspondiente sistema termodinámico que se está estudiando.

Los objetos geométricos más importantes en una variedad Riemanniana son los símbolos de Christoffel, que se definen por

$$\Gamma^a{}_{bc} = \frac{1}{2}g^{ad} \left(\frac{\partial g_{db}}{\partial x^c} + \frac{\partial g_{cd}}{\partial x^b} - \frac{\partial g_{bc}}{\partial x^d} \right), \quad (3.12)$$

y el tensor de curvatura

$$R^a{}_{bcd} = \frac{\partial \Gamma^a{}_{bd}}{\partial x^c} - \frac{\partial \Gamma^a{}_{bc}}{\partial x^d} + \Gamma^a{}_{ec} \Gamma^e{}_{bd} - \Gamma^a{}_{ed} \Gamma^e{}_{bc}, \quad (3.13)$$

los cuales serán utilizados a lo largo de la tesis para investigar las propiedades del espacio de estados de equilibrio.

Además del tensor de curvatura, también es posible construir el tensor de Ricci

$$R_{ab} = g^{cd} R_{acbd}, \quad (3.14)$$

y el escalar de curvatura

$$R = g^{ab}R_{ab}. \quad (3.15)$$

En GTD, el tensor de curvatura es una medida de la interacción termodinámica, es decir, si el tensor de curvatura es cero indicará la ausencia de interacción termodinámica, y será diferente de cero para sistemas con interacción termodinámica intrínseca. Por tal motivo, la curvatura en el espacio de estados de equilibrio termodinámico se llama *Curvatura termodinámica*.

Otro elemento geométrico importante, para el espacio considerado, son las ecuaciones geodésicas, las cuales son curvas que satisfacen la ecuación diferencial

$$\frac{d^2x^a}{dt^2} + \Gamma^a_{bc} \frac{dx^b}{dt} \frac{dx^c}{dt} = 0, \quad (3.16)$$

donde t es un parámetro a lo largo de la geodésica.

En GTD, el concepto de *geodésica termodinámica* es la solución de las ecuaciones geodésicas (3.16), que cumplen con las leyes de la Termodinámica. El estudio de las ecuaciones geodésicas permite analizar ecuaciones de estado y transiciones de fase, al relacionar las variables termodinámicas o al examinar la incompletitud geodésica.

En este trabajo utilizaremos la métrica invariante de Legendre, dada por la GTD, en el espacio \mathcal{T} , que tiene la forma [18]:

$$G = \left(d\Phi - I_a dE^a\right)^2 + \Lambda \left(E_a I_a\right)^{2k+1} dE^a dI^a, \quad (3.17)$$

donde Λ es una constante arbitraria. Se exige que las proyecciones de la uno forma de Gibbs y la métrica satisfagan

$$\Theta_{\mathcal{G}} \Big|_{\mathcal{E}} = 0, \quad G \Big|_{\mathcal{E}} = g. \quad (3.18)$$

Obtenemos, así, la primera ley de la Termodinámica y las condiciones de equilibrio termodinámico

$$d\Phi = \delta_{ab} I^a dE^b, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial E^a} = \delta_{ab} I^b, \quad (3.19)$$

donde $\delta_{ab} = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$ y la métrica termodinámica es:

$$g = G|_{\mathcal{E}} = \Lambda \left(E_a \frac{\partial \Phi}{\partial E^a} \right)^{2k+1} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c} \delta_{ab} dE^a dE^c. \quad (3.20)$$

La ecuación (3.20) nos informa que la métrica en \mathcal{E} queda completamente determinada, si el potencial termodinámico Φ nos es proporcionado. Por tanto, esta construcción geométrica, llamada GTD, puede ser aplicada a cualquier sistema termodinámico para investigar sus propiedades geométricas. En esta tesis ejemplificaremos lo anterior analizando el gas ideal paramagnético y el modelo unidimensional de Ising.

Capítulo 4

GTD de los modelos paramagnéticos

4.1. Introducción

En este capítulo aplicaremos lo aprendido en el capítulo precedente, a dos sistemas termodinámicos ordinarios conocidos con los nombres de gas ideal paramagnético y modelo unidimensional de Ising. Calcularemos sus métricas termodinámicas y analizaremos sus propiedades termodinámicas mediante la geometría que se obtiene de éstas.

4.2. La métrica del gas ideal paramagnético

Para el espacio fase del gas ideal paramagnético, vamos a considerar una variedad Riemanniana de siete dimensiones con coordenadas

$$Z^A = \left\{ S, U, V, M, \frac{1}{T}, -\frac{P}{T}, \frac{H}{T} \right\}. \quad (4.1)$$

Entonces, la uno forma de Gibbs se define por la expresión

$$\Theta_{\mathcal{G}} = dS - \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV - \frac{H}{T}dM, \quad (4.2)$$

y de acuerdo con (3.17), la métrica en este espacio toma la forma:

$$\begin{aligned}
G &= (dS - \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV - \frac{H}{T}dM)^2 + \\
&+ \Lambda \left[\left(\frac{U}{T} \right)^{2k+1} dU d\left(\frac{1}{T} \right) + \left(-\frac{VP}{T} \right)^{2k+1} dV d\left(-\frac{P}{T} \right) + \left(\frac{MH}{T} \right)^{2k+1} dM d\left(\frac{H}{T} \right) \right]. \quad (4.3)
\end{aligned}$$

Aplicando la primera de las condiciones (3.18), obtenemos

$$dS = \frac{1}{T}dU - \frac{P}{T}dV + \frac{H}{T}dM, \quad (4.4)$$

ecuación que es equivalente a la primera ley de la Termodinámica, si se hace un despeje algebraico, e implica las condiciones de equilibrio

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}, \quad -\frac{P}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}, \quad \frac{H}{T} = \frac{\partial S}{\partial M}. \quad (4.5)$$

Las condiciones anteriores nos conducen a la siguiente métrica termodinámica:

$$\begin{aligned}
g &= \Lambda \left\{ \left[U \frac{\partial S}{\partial U} \right]^{2k+1} \frac{\partial^2 S}{\partial U \partial U} (dU)^2 + \right. \\
&+ \left[\left(U \frac{\partial S}{\partial U} \right)^{2k+1} + \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right)^{2k+1} \right] \frac{\partial^2 S}{\partial U \partial V} dU dV + \\
&+ \left[\left(U \frac{\partial S}{\partial U} \right)^{2k+1} + \left(M \frac{\partial S}{\partial M} \right)^{2k+1} \right] \frac{\partial^2 S}{\partial U \partial M} dU dM + \\
&+ \left[V \frac{\partial S}{\partial V} \right]^{2k+1} \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial V} (dV)^2 + \\
&+ \left[\left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right)^{2k+1} + \left(M \frac{\partial S}{\partial M} \right)^{2k+1} \right] \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial M} dV dM + \\
&+ \left. \left[M \frac{\partial S}{\partial M} \right]^{2k+1} \frac{\partial^2 S}{\partial M \partial M} (dM)^2 \right\}. \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Para calcular explícitamente la métrica (4.6) del gas ideal paramagnético, utilizamos el potencial S , que se obtuvo en la sección 1.3. Si empleamos la

ecuación (1.20),

$$S = N \left[\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{U}{N} \right) - \frac{3}{2} \ln \left| 1 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right| - \frac{3}{\mu^2} \frac{M^2}{N^2} + s'_0 \right], \quad (4.7)$$

en la relación (4.6), conseguimos que

$$g = -\Lambda \left\{ \left(\frac{3}{2} N \right)^{2(k+1)} \left[\frac{dU^2}{U^2} + \left(\frac{2}{3} \right)^{2(k+1)} \frac{dV^2}{V^2} \right] - \right. \\ \left. - 2^{2k+1} \left(\frac{2}{\mu N} \right)^2 \left(\frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right)^{4k+3} \frac{\left[3 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right]}{\left[1 - \frac{2M^2}{\mu^2 N^2} \right]^{2k+3}} dM^2 \right\}. \quad (4.8)$$

4.3. La métrica del modelo unidimensional de Ising

Ahora vamos a utilizar la métrica para el modelo unidimensional de Ising, que, como vimos en la sección 1.5, tiene por ecuación fundamental

$$F = - \left\{ J + T \ln \left| \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4\frac{J}{T}}} \right| \right\}. \quad (4.9)$$

Para el espacio fase del modelo, vamos a considerar una variedad Riemanniana de cinco dimensiones con coordenadas

$$Z^A = \{F, T, H, -S, -M\}. \quad (4.10)$$

Entonces, la uno forma de Gibbs queda representada por la expresión:

$$\Theta_{\mathcal{G}} = dF + SdT + MdH, \quad (4.11)$$

y de acuerdo con (3.17), la métrica en este espacio tiene la forma:

$$G = \Theta_{\mathcal{G}}^2 + \Lambda \left[(-TS)^{2k+1} dT d(-S) + (-HM)^{2k+1} dH d(-M) \right]. \quad (4.12)$$

Aplicando la primera de las condiciones (4.12), obtenemos

$$dF = -SdT - MdH, \quad (4.13)$$

ecuación que es equivalente a la primera ley de la Termodinámica, después de una transformación de Legendre, e implica las condiciones de equilibrio

$$-S = \frac{\partial F}{\partial T}, \quad -M = \frac{\partial F}{\partial H}. \quad (4.14)$$

La segunda condición nos dirige a la métrica termodinámica

$$\begin{aligned} g &= \Lambda \left\{ \left[T \frac{\partial F}{\partial T} \right]^{2k+1} \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial T} (dT)^2 + \right. \\ &+ \left. \left[\left(T \frac{\partial F}{\partial T} \right)^{2k+1} + \left(H \frac{\partial F}{\partial H} \right)^{2k+1} \right] \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial H} dT dH \right\} + \\ &+ \left. \left[H \frac{\partial F}{\partial H} \right]^{2k+1} \frac{\partial^2 F}{\partial H \partial H} (dH)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Para calcular explícitamente la métrica (4.15) en el modelo unidimensional de Ising, utilizamos el potencial F , encontrado en la sección (1.5). Al utilizar la ecuación (1.24) en la relación (4.6), obtenemos:

$$\begin{aligned} g &= \Lambda \left\{ \left[-\frac{T(f \ln f + T f_T)}{f} \right]^{2k+1} \left[\frac{T(f_T^2 - f f_{TT}) - 2f f_T}{f^2} \right] dT^2 + \right. \\ &+ \left[\left[-\frac{T(f \ln f + T f_T)}{f} \right]^{2k+1} + \left[\frac{\mu H \sinh(\frac{\mu H}{T})}{f - \cosh(\frac{\mu H}{T})} \right]^{2k+1} \right] \times \\ &\times \frac{e^{-\frac{4J}{T}} \left[\mu H \cosh(\frac{\mu H}{T}) + 2J \sinh(\frac{\mu H}{T}) \right]}{T^2 \left[f - \cosh(\frac{\mu H}{T}) \right]^3} dT dH + \\ &+ \left. \left[\frac{\mu H \sinh(\frac{\mu H}{T})}{f - \cosh(\frac{\mu H}{T})} \right]^{2k+1} \left[\frac{e^{-\frac{4J}{T}} \cosh(\frac{\mu H}{T})}{T \left[f - \cosh(\frac{\mu H}{T}) \right]^3} \right] dH^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Aquí el subíndice simboliza derivadas parciales, y la función f tiene la forma:

$$f = \cosh\left(\frac{\mu H}{T}\right) + \sqrt{\sinh^2\left(\frac{\mu H}{T}\right) + e^{-4\frac{J}{T}}}. \quad (4.17)$$

4.4. Curvatura e interacción termodinámica

Cuando hacemos uso del programa de computación Maple 13, podemos calcular el escalar de curvatura para el gas ideal paramagnético y para el modelo unidimensional de Ising.

Si utilizamos la métrica (4.8), obtenemos:

$$R = 0. \quad (4.18)$$

De acuerdo con la GTD, el resultado nos indica que para el gas ideal paramagnético, independientemente del valor de las constantes Λ y k , no existe interacción termodinámica. Para el modelo unidimensional de Ising, usamos la métrica (4.16) y obtenemos que

$$R \neq 0. \quad (4.19)$$

Desafortunadamente no es posible escribir de forma compacta el escalar de curvatura. Sin embargo, de acuerdo con la GTD, el resultado indica que en el modelo unidimensional de Ising existe interacción termodinámica y esta interacción se debe al espín, como mostraremos a continuación.

Cuando no existe interacción entre espines, el valor de la constante J es cero. En este caso la relación (4.17) toma la forma:

$$f = 2 \cosh\left(\frac{\mu H}{T}\right), \quad (4.20)$$

entonces la métrica (4.16) adopta la forma:

$$\begin{aligned}
g &= \Lambda \left\{ \left[T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) - \mu H \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] \right]^{2k+1} \left[\frac{H^2}{T^3} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] dT^2 + \right. \\
&+ \left[\left[\mu H \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right) - T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] \right]^{2k+1} - \left[\mu H \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]^{2k+1} \right] \times \\
&\times \left. \left[\frac{\mu H}{T^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] dT dH + \left[\mu H \tanh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]^{2k+1} \left[\frac{1}{T} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] dH^2 \right\}. \quad (4.21)
\end{aligned}$$

El uso del programa de computación Maple 13 nos permite calcular el escalar de curvatura y obtenemos

$$R = 0. \quad (4.22)$$

El resultado muestra que la curvatura es una medida de la interacción termodinámica entre espines, es decir, si no hay interacción entre espines ($J = 0$) entonces no hay curvatura ($R = 0$).

4.5. Curvatura y transiciones de fase

Como ya explicamos en la sección 2.4, tendremos una transición de fase de orden n en los puntos donde las derivadas de ese orden presenten divergencias o discontinuidades. En particular, serán de segundo orden cuando el problema se presente en la capacidad calorífica. Hasta el momento, la GTD ha interpretado geoméricamente las transiciones de segundo orden como singularidades del escalar de curvatura. Esto se cumple para el Gas ideal paramagnético, cuya capacidad calorífica está dada, de acuerdo con las ecuaciones (1.16) y (2.13), por la expresión

$$C \Big|_{V,P} = \frac{3}{2}, \quad (4.23)$$

la cual no posee puntos de divergencia. En consecuencia, no hay transiciones de fase de segundo orden. La GTD confirma esto al no existir singularidades en su escalar de curvatura (el escalar de curvatura es cero).

En el modelo unidimensional de Ising, el análisis del escalar de curvatura presenta una mayor dificultad para saber si existen singularidades, ya que no

es posible escribir su expresión analítica explícitamente. Para solucionar este problema, utilizamos el programa computacional Maple 13, y graficamos el escalar de curvatura R^{GTD} en función de los parámetros temperatura T y campo magnético H . La gráfica obtenida se muestra en la figura 4.1. Esta gráfica señala que el escalar de curvatura R^{GTD} tiene muchas singularidades, lo que indicaría, de acuerdo con la GTD, que el modelo unidimensional de Ising presenta transiciones de fase. Esto lo podemos observar más claramente si hacemos cortes en un campo magnético dado; por ejemplo, cuando $H = 85$, se obtienen las gráficas que aparecen en las figuras 4.2 y 4.3.

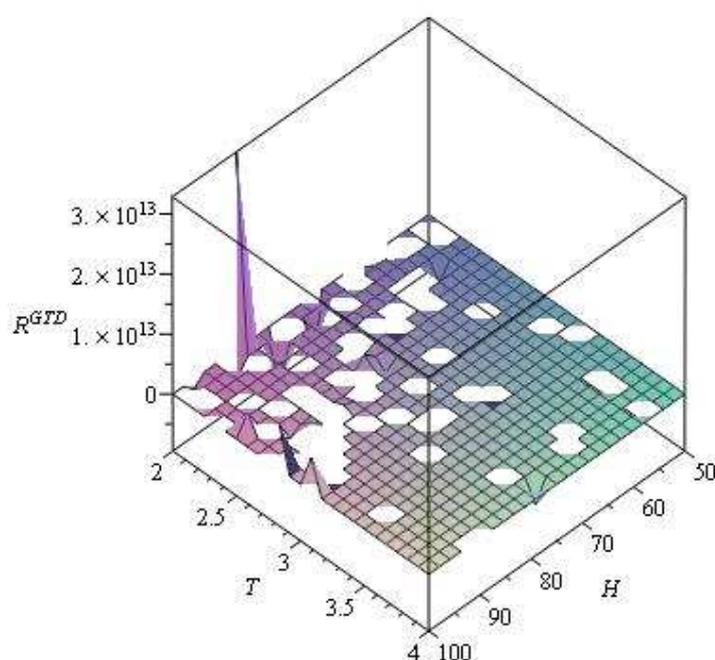


Figura 4.1: Escalar de curvatura R^{GTD} como una función de la temperatura T y el campo magnético H . Para la gráfica fueron considerados los valores $k = -1$ y $J = 1$.

Para saber si alguna de estas singularidades corresponde a una transición de fase de segundo orden, es necesario calcular la capacidad calorífica del sistema C . Y como estamos trabajando en la representación de Helmholtz F , la capacidad calorífica C , de un campo magnético H y magnetización M

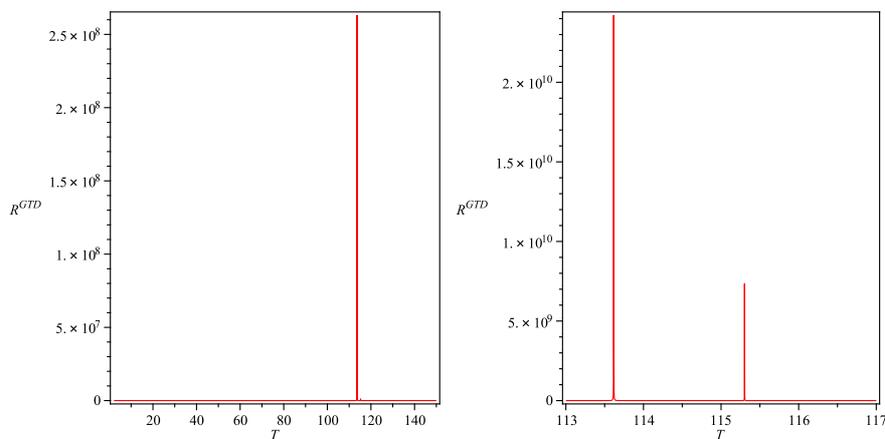


Figura 4.2: Escalar de curvatura R^{GTD} como una función de la temperatura T . Aquí hemos considerado el valor del campo magnético $H = 85$.

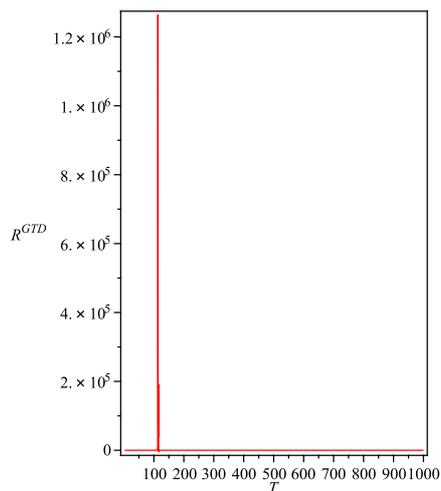


Figura 4.3: Escalar de curvatura R^{GTD} como una función de la temperatura T . En la gráfica hemos usado el valor del campo magnético $H = 85$.

constantes, puede ser calculada en esta representación. Para ello partimos de la definición

$$C \Big|_{H,M} = \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_{H,M}. \quad (4.24)$$

Utilizamos la transformación de Legendre $U = F + TS + HM$, y la capacidad calorífica toma la forma:

$$C \Big|_{H,M} = \frac{\partial}{\partial T} [U = F + TS + HM] = \frac{\partial F}{\partial T} + T \frac{\partial S}{\partial T} + S. \quad (4.25)$$

Si empleamos la condición de equilibrio termodinámico $-S = \frac{\partial F}{\partial T}$ en esta última ecuación, obtenemos

$$\begin{aligned} C \Big|_{H,M} &= \frac{\partial F}{\partial T} - T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\partial F}{\partial T} \right] - \frac{\partial F}{\partial T}, \\ &= -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Si aplicamos la ecuación (1.24), obtenemos explícitamente

$$C \Big|_{H,M} = - \frac{e^{-\frac{4J}{T}} W(T, H)}{T \left[\sinh^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J}{T}} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\cosh \left(\frac{H}{T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J}{T}}} \right]^2}, \quad (4.27)$$

con

$$\begin{aligned} W(T, H) &= 4HJ \sinh \left(\frac{H}{T} \right) \left[e^{-\frac{4J}{T}} - 1 \right] + 2 \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J}{T}}} \left[H \cosh \left(\frac{H}{T} \right) + 2J \sinh \left(\frac{H}{T} \right) \right]^2 + \\ &+ \cosh \left(\frac{H}{T} \right) \left[8HJ \sinh \left(\frac{H}{T} \right) \cosh \left(\frac{H}{T} \right) + \left[H^2 + 4J^2 \right] e^{-\frac{4J}{T}} + \right. \\ &+ \left. H^2 \cosh^2 \left(\frac{H}{T} \right) + \left[H^2 + 8J^2 \right] \sinh^2 \left(\frac{H}{T} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Esta capacidad calorífica no presenta puntos de divergencia. Por tanto, de acuerdo con la clasificación de Ehrenfest, no tenemos transiciones de fase de segundo orden. Este hecho se puede constatar también en la gráfica que se muestra en la figura 4.4

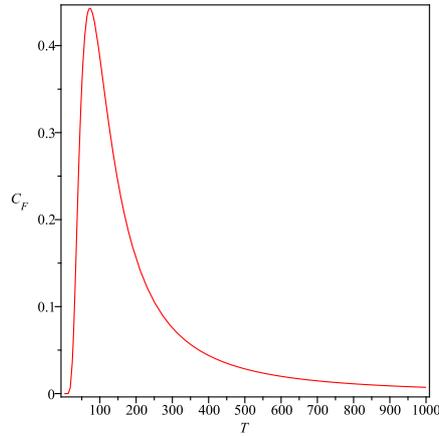


Figura 4.4: Capacidad calorífica C como una función de la temperatura T . Para esta gráfica, tomamos el valor del campo magnético $H = 85$.

Por eso suponemos que las singularidades del escalar de curvatura deben representar otro tipo u orden de transiciones de fase.

4.6. Invarianza de la capacidad calorífica

Como vimos en la sección 4.5, para el modelo unidimensional de Ising, la GTD, mediante el escalar de curvatura, predice transiciones de fase que no corresponden a las de segundo orden, de acuerdo con la clasificación de Ehrenfest, es decir, la capacidad calorífica de este sistema, calculada utilizando el potencial F no presenta divergencias.

Sin embargo, veamos qué sucede si calculamos la capacidad calorífica C utilizando la regla de la cadena, cuando el campo magnético H y la magnetización M son constantes

$$C \Big|_{H,M} = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\frac{\partial U}{\partial S}}{\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}}. \quad (4.29)$$

Usamos la regla de la cadena, ya que $U = U(T, H)$ y $S = S(T, H)$. De esta manera, calculamos la primera y segunda derivadas:

$$\frac{\partial U}{\partial S} = \frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial U}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial S}, \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial U}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial S} \right] \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial}{\partial H} \left[\frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial U}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial S} \right] \frac{\partial H}{\partial S}, \quad (4.31)$$

sustituimos estas cantidades en la ecuación (4.29) y obtenemos

$$C = \frac{T}{\frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial U}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial S} \right] \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial}{\partial H} \left[\frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial S} + \frac{\partial U}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial S} \right] \frac{\partial H}{\partial S}}. \quad (4.32)$$

Empleamos las relaciones (1.26) y (1.28) para calcular el valor explícito de la capacidad calorífica, que resulta demasiado extenso para escribirlo aquí. No obstante, para conocer si existen puntos donde la función no está bien comportada, graficamos la capacidad calorífica. Para ello utilizamos Maple 13 y obtenemos la gráfica que aparece en la figura 4.5

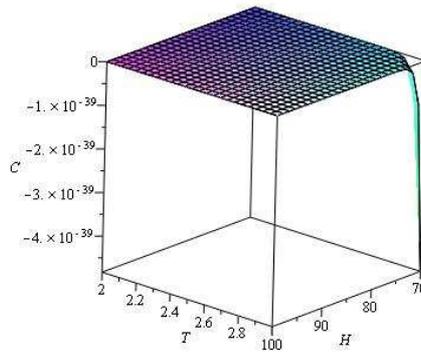


Figura 4.5: Capacidad calorífica C como una función de la temperatura T y el campo magnético H .

La gráfica muestra que existe una divergencia en la capacidad calorífica, lo que indica una transición de fase de segundo orden en el modelo unidimensional de Ising. Si realizamos un corte en $H = 85$, obtenemos la gráfica que se presenta en la figura 4.6, la cual señala, más claramente, este punto de divergencia.

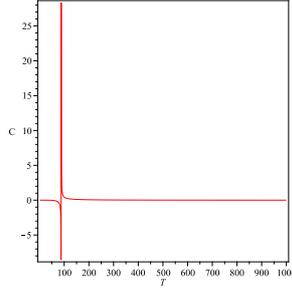


Figura 4.6: Capacidad calorífica C como una función de la temperatura T y el campo magnético H .

De acuerdo con este cálculo, existen regiones donde pueden ocurrir transiciones de fase de segundo orden a nivel de la capacidad calorífica cuando se usa U como potencial termodinámico en (4.29); sin embargo, si en su lugar usamos F , la capacidad calorífica correspondiente, es decir (4.26), no predice ninguna transición. Para corroborar este resultado calculamos C usando diferentes potenciales y representaciones, y obtuvimos que en particular la capacidad calorífica

$$C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M = - \frac{4\sqrt{1-M^2} e^{-\frac{2}{T}}}{T^2 \sqrt{M^2 [e^{-\frac{4}{T}} - 1] + 1} \left[\sqrt{M^2 [e^{-\frac{4}{T}} - 1] + 1} + e^{-\frac{2}{T}} \right]}, \quad (4.33)$$

presenta regiones con transiciones de fase, tal como se observa en la gráfica 4.7.

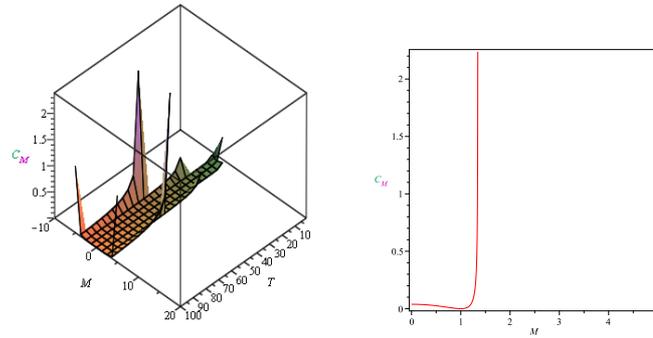


Figura 4.7: La capacidad calorífica como función de M y T , y la capacidad calorífica como función de M para $T = 5$. En ambos casos se ha utilizado $J = 1$.

Estos resultados demuestran que es necesario investigar todas las posibles capacidades caloríficas para poder asegurar si existen o no transiciones de fase. Además, resulta claro que la definición de la capacidad calorífica, mediante derivadas parciales de un potencial termodinámico con respecto a una variable termodinámica, no es una definición invariante con respecto a cambios del potencial.

Por otra parte, en GTD interpretamos las transiciones de fase como singularidades en el escalar de curvatura, criterio que es obviamente invariante ante transformaciones de Legendre. Surge entonces la pregunta si es posible en GTD definir la capacidad calorífica de tal manera que sea invariante de Legendre. Ciertamente ésta es una interrogante que merece ser investigada *per se*, pero estaría fuera del contexto y del alcance de la presente tesis.

4.7. Geodésicas y transición de fase

En el espacio de estados de equilibrio termodinámico \mathcal{E} , el elemento de línea g es una medida de la distancia entre un punto de coordenadas E^a y otro de coordenadas $E^a + dE^a$.

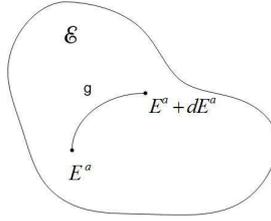


Figura 4.8: g es una medida entre la distancia existente entre dos puntos en el espacio \mathcal{E} .

Asumiendo que estos puntos pertenecen a la curva $\gamma(t)$, la longitud termodinámica se define como [13]

$$L = \int_{E^a}^{E^a + dE^a} g = \int_{E^a}^{E^a + dE^a} \sqrt{g_{ab} dE^a dE^b} = \int_{E^a}^{E^a + dE^a} \sqrt{g_{ab} \frac{dE^a}{dt} \frac{dE^b}{dt}} dt, \quad (4.34)$$

donde t es el parámetro a lo largo de la curva.

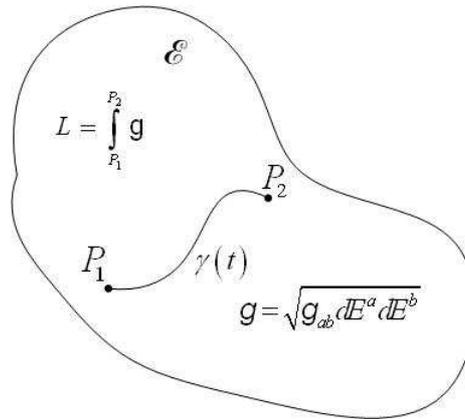


Figura 4.9: Geodésica en \mathcal{E} (línea de mínima longitud que une dos puntos en una superficie dada y está contenida en esa superficie).

Las ecuaciones que describen estas curvas termodinámicas se obtienen a partir de considerar que la longitud termodinámica es un extremo, es decir, que $\delta L = 0$, donde δL es una operación matemática conocida como la *variación* de L . Dichas ecuaciones reciben el nombre de ecuaciones geodésicas y tienen la forma

$$\frac{d^2 E^a}{dt^2} + \Gamma^a_{bc} \frac{dE^b}{dt} \frac{dE^c}{dt} = 0, \quad (4.35)$$

donde Γ^a_{bc} son los símbolos de Christoffel de la métrica termodinámica g_{ab} . Las soluciones a la ecuación diferencial (4.35) representan a las ecuaciones geodésicas en el espacio de estados de equilibrio termodinámico \mathcal{E} con parámetro t .

Físicamente aquellas geodésicas en donde a lo largo de ellas se satisfacen las leyes de la termodinámica, representan procesos cuasiestáticos, es decir, conectan estados de equilibrio termodinámico que son compatibles con las leyes de la Termodinámica. Por tanto, en GTD un proceso cuasiestático tiene la misma interpretación que en la Termodinámica ordinaria [22], o sea, se interpreta como una sucesión de estados de equilibrio termodinámico. En este caso, el parámetro t etiqueta cada uno de estos estados que son parte de la geodésica.

En GTD, la transiciones de fase de los sistemas termodinámicos están representadas por las singularidades en el espacio de estados de equilibrio termodinámico, porque son los puntos en donde el escalar de curvatura se indetermina. La interpretación geométrica de los sistemas termodinámicos permite considerar a las geodésicas de este espacio como una manera de determinar los puntos de singularidad correspondientes a las transiciones de fase. La manera de hacerlo se conoce como incompletez geodésica y significa que existen geodésicas que están indeterminadas a partir de cierto valor del parámetro afín t_s . En un cálculo numérico, por ejemplo, la incompletez se vería en el hecho de que para cualquier $t > t_s$ resulta imposible integrar las ecuaciones de las geodésicas, debido a que por lo menos uno de sus términos diverge, tiene discontinuidades o no está bien definido. De esta forma, una incompletez geodésica en GTD indicará que existe una singularidad en el espacio de estados de equilibrio termodinámico y, en consecuencia, una transición de fase en el sistema.

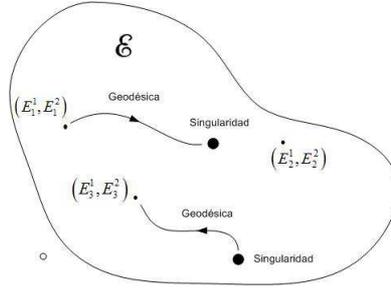


Figura 4.10: Incompletitud geodésica. Significa que existen geodésicas que están indeterminadas a partir de cierto valor del parámetro afín t_s .

4.7.1. Geodésicas del gas ideal paramagnético

Las ecuaciones geodésicas del gas ideal paramagnético, de acuerdo con (4.35), tienen la siguiente forma:

$$\frac{d^2U}{dt^2} - \frac{1}{U} \left[\frac{dU}{dt} \right]^2 = 0, \quad (4.36)$$

$$\frac{d^2V}{dt^2} - \frac{1}{V} \left[\frac{dV}{dt} \right]^2 = 0, \quad (4.37)$$

$$P_1 \frac{d^2M}{dt^2} + P_2 \left[\frac{dM}{dt} \right]^2 = 0, \quad (4.38)$$

en la cual P_1 y P_2 son polinomios en M

$$\begin{aligned} P_1 &= 16M^9 - 32N^2M^7 - 4N^4(\mu^4 + 2\mu^2 - 6)M^5 - \\ &- 8N^6(1 - \mu^2)M^3 + N^8(\mu^4 - 2\mu^2 + 1)M, \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} P_2 &= 16(2k + 1)M^8 - 16N^2[2 + k(\mu^2 + 4)]M^6 + \\ &+ 4N^4(\mu^4 + 2\mu^2 + 6)M^4 + 4N^6[3k\mu^2 + \mu^4(k + 2) - 2(2k + 1)]M^2 + \\ &+ N^8[\mu^4(2k + 1) + (2k + 1) - 2\mu^2(2k + 1)]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Las ecuaciones geodésicas (4.36) y (4.37) tienen por solución

$$U = ae^{bt}, \quad (4.41)$$

$$V = ce^{dt}, \quad (4.42)$$

donde a , b , c y d son constantes de integración. En virtud de que la solución de la ecuación (4.38) no se puede determinar de manera analítica, es necesario utilizar métodos numéricos. Con el programa de computación Maple 13, obtenemos que las geodésicas que dan la solución a la ecuación diferencial (4.38) tienen la forma mostrada en la figura 4.11.

Con base en las expresiones (4.41) y (4.42), junto con las gráficas 4.11, podemos afirmar que el gas ideal paramagnético no presenta incompletez geodésica porque las curvas se pueden continuar indefinidamente para cualquier valor del parámetro t . Por tanto, no se encuentran singularidades en el espacio de estados de equilibrio termodinámico. En consecuencia, de acuerdo con la GTD, se carece de puntos de transiciones de fase.

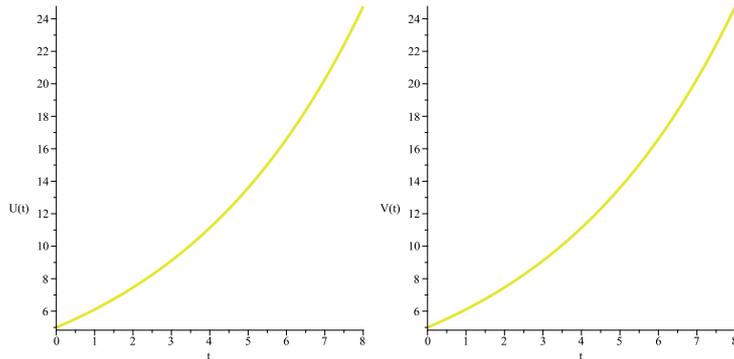


Figura 4.11: La energía interna U y el volumen V como función del parámetro afín t .

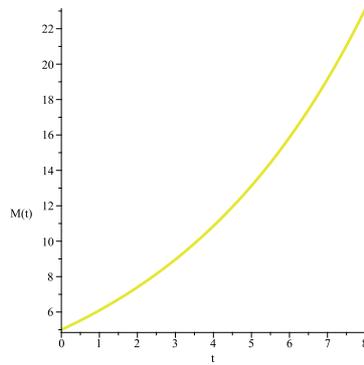


Figura 4.12: La magnetización M como función del parámetro afín t .

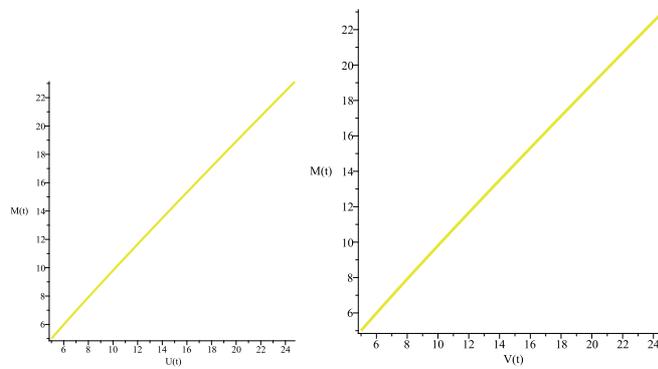


Figura 4.13: La magnetización M en función de la energía y el volumen .

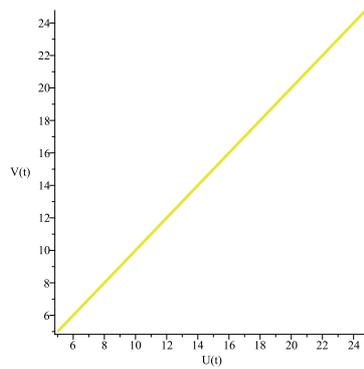


Figura 4.14: El volumen V como función de la energía interna U .

4.7.2. Geodésicas del modelo unidimensional de Ising

De acuerdo con (4.35), las ecuaciones geodésicas tienen la forma

$$\frac{d^2T}{dt^2} + \Gamma^T_{TT} \left[\frac{dT}{dt} \right]^2 + 2\Gamma^T_{TH} \frac{dT}{dt} \frac{dH}{dt} + \Gamma^T_{HH} \left[\frac{dH}{dt} \right]^2 = 0, \quad (4.43)$$

$$\frac{d^2H}{dt^2} + \Gamma^H_{TT} \left[\frac{dT}{dt} \right]^2 + 2\Gamma^H_{TH} \frac{dT}{dt} \frac{dH}{dt} + \Gamma^H_{HH} \left[\frac{dH}{dt} \right]^2 = 0. \quad (4.44)$$

Desafortunadamente, las ecuaciones geodésicas del modelo unidimensional de Ising son demasiado extensas para escribirlas de forma simplificada en este trabajo. No obstante, es posible analizarlas de manera numérica. Cuando utilizamos el programa Maple 13, encontramos que el comportamiento de las geodésicas es como lo muestran las siguientes figuras:

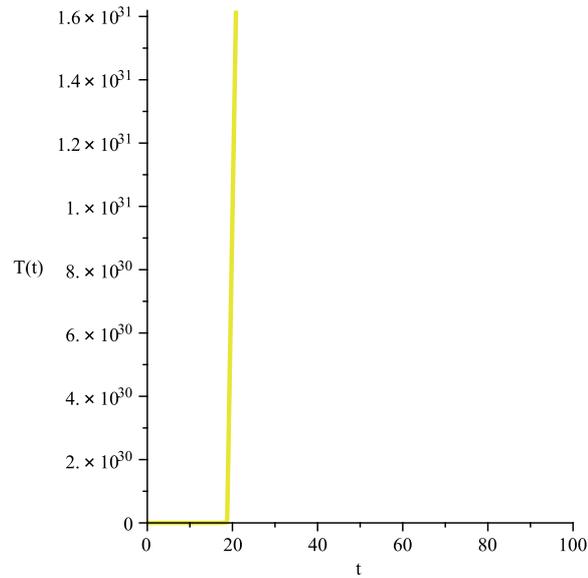


Figura 4.15: Gráfica de T en función del parámetro afín t .

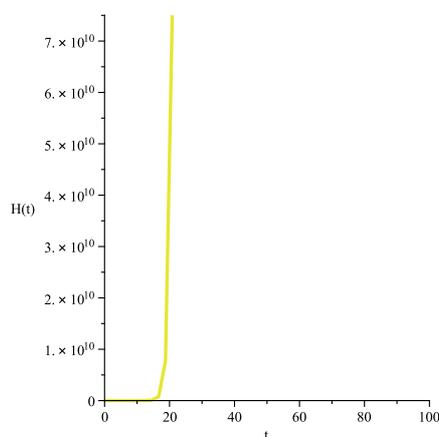


Figura 4.16: Gráfica de H en función del parámetro afín t .

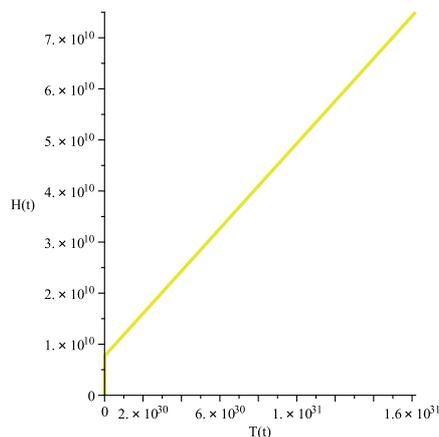


Figura 4.17: Gráfica H vs. T .

El programa Maple 13 evidencia, en todas las gráficas, que probablemente existe una singularidad en el punto $t = 21,464854$. Entonces las gráficas 4.15, 4.16 y 4.17 indican que hay incompletez geodésica. Por tanto, de acuerdo con la GTD, existen puntos de transición de fase para este modelo, lo cual es consistente con lo que se encuentra utilizando el escalar de curvatura.

Capítulo 5

Conclusiones

El propósito fundamental de este trabajo fue aplicar la Geometrotermodinámica a dos sistemas termodinámicos ordinarios:

- Gas ideal paramagnético.
- Modelo unidimensional de Ising.

A fin de poder comprobar si esta nueva teoría es capaz de:

1. Describir correctamente, desde el punto de vista geométrico, características físicas ya conocidas, tales como la interacción termodinámica y la capacidad calorífica de este tipo de sistemas termodinámicos.
2. Proporcionar nueva información sobre las propiedades físicas de estos sistemas.

Para llevar a cabo este trabajo, de todas las posibles métricas de la Geometrotermodinámica, se eligieron las más generales, ecuaciones (3.17) y (3.20), porque son invariantes ante transformaciones parciales y totales de Legendre. En esta tesis, a diferencia de los trabajos que se han efectuado en la misma dirección, las transiciones de fase también fueron estudiadas utilizando las geodésicas del espacio de equilibrio termodinámico. Esto permitió tener un elemento más de interpretación geométrica de dicha característica física. Los cálculos fueron verificados, y algunos de ellos obtenidos, con el programa de computación Maple 13. También para elaborar las gráficas aquí presentadas se utilizó el mismo programa.

Durante el desarrollo de esta investigación hemos llegado a las siguientes conclusiones:

1. La métrica (3.20) describe correctamente la interacción termodinámica y las transiciones de fase del gas ideal paramagnético mediante el escalar de curvatura, que tiene la función de indicarnos estas propiedades cuando es igual o diferente de cero y al observar sus posibles singularidades. Los resultados se resumen en la siguiente tabla:

Gas ideal paramagnético

Termodinámica	Geometrotermodinámica
No hay interacción termodinámica	El escalar de curvatura es cero
No hay transiciones de fase porque la capacidad calorífica $C = \frac{3}{2}$ no posee divergencias	No hay singularidades en el escalar de curvatura

2. La métrica (3.20) describe correctamente la interacción termodinámica del modelo unidimensional de Ising. Encontramos que esta interacción se debe a los espines (sección 4.4), ya que al hacer J (el parámetro responsable de la interacción) igual a cero, el escalar de curvatura también es cero. Resumimos los resultados en la siguiente tabla:

Modelo unidimensional de Ising

Termodinámica	Geometrotermodinámica
Sí hay interacción termodinámica	El escalar de curvatura es diferente de cero

3. La métrica (3.20) nos revela que el modelo unidimensional de Ising presenta transiciones de fase. Este resultado se encontró al analizar gráficamente el escalar de curvatura, debido a la imposibilidad de realizar un estudio analítico de este objeto geométrico (gráficas 4.1-4.3),

ya que es imposible escribir de manera compacta y simplificada la forma explícita de dicho escalar. El resultado contradice lo reportado en la literatura especializada, en la que se afirma que el modelo carece de transiciones de fase.

4. Una explicación posible a la discrepancia que hemos encontrado con respecto a las transiciones de fase, es que la capacidad calorífica, que ha sido nuestra referencia para describir estas transiciones, no es invariante de Legendre. Esto nos conduce a observar que la capacidad calorífica calculada en la representación que hemos utilizado, no muestra el comportamiento encontrado con el escalar de curvatura (sección 4.6 y gráficas 4.5-4.7). Sin embargo, como vimos en la sección 4.6, al calcular todas las posibles capacidades caloríficas encontramos algunas que sí indican la presencia de transiciones de fase. Concluimos, entonces, que es necesario investigar todas las posibles capacidades caloríficas para poder asegurar si existen o no transiciones de fase. Es interesante mencionar que recientemente también se descubrió este tipo de dificultades con las capacidades caloríficas en el contexto de sistemas termodinámicos asociados con hoyos negros en teorías de cuerdas [29] y se le dio el nombre de "the phase transition puzzle".
5. Otra explicación factible sería que la Geometrotermodinámica ha descubierto otras transiciones de fase que no se relacionan con la divergencia de la capacidad calorífica, y que por tal razón, es necesario realizar una investigación más detallada con respecto a la termodinámica de este sistema.
6. El análisis de las ecuaciones geodésicas (sección 4.7) confirma lo obtenido, con respecto a las transiciones de fase, para el gas ideal paramagnético, porque no existe incompletez geodésica (gráficas 4.11-4.14). Así que, no existen transiciones de fase, como lo muestra el escalar de curvatura al no tener singularidades.
7. Al estudiar las ecuaciones geodésicas (sección 4.7), confirmamos lo encontrado, con respecto a las transiciones de fase, para el modelo unidimensional de Ising, es decir, que existe incompletez geodésica (gráficas 4.15-4.17). Por tanto, hay transiciones de fase como lo señala el análisis gráfico del escalar de curvatura.

Finalmente, con base en lo anterior, podemos concluir que el formalismo de la Geometrotermodinámica -que tiene como bases fundamentales la Geometría Diferencial y la *Invarianza de Legendre*- es consistente para analizar sistemas termodinámicos ordinarios, como es el caso del gas ideal paramagnético y el modelo unidimensional de Ising. Además, la Geometrotermodinámica nos permite predecir propiedades físicas que no se observan utilizando la Termodinámica clásica. Esta es otra evidencia de que sí es posible la geometrización de conceptos termodinámicos de forma adecuada, como los aquí estudiados, y esto sólo se puede lograr aplicando la Geometrotermodinámica.

Apéndice A

Sistema Internacional de Unidades (SI)

En el SI, las variables y constantes que estamos utilizando tienen las siguientes unidades:

- Energía libre de Helmholtz F :

$$\left[F \right]_U = \text{Joules} . \quad (\text{A.1})$$

- Momento dipolar magnético $\vec{\mu}$:

$$\left[\vec{\mu} \right]_U = (\text{Amperes})(\text{metro})^2 . \quad (\text{A.2})$$

- Vector de intensidad magnética \vec{H} :

$$\left[\vec{H} \right]_U = \frac{(\text{Ampere})}{(\text{metro})} . \quad (\text{A.3})$$

- Constante de permeabilidad $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{(\text{Tesla})(\text{metro})}{(\text{Ampere})}$:

$$\left[\mu_0 \right]_U = \frac{(\text{Tesla})(\text{metro})}{(\text{Ampere})} . \quad (\text{A.4})$$

- Temperatura T :

$$\left[T \right]_U = Kelvin = K. \quad (A.5)$$

- Constante de Boltzman $k_B = 1,3806504 \times 10^{-23} \frac{Joules}{K}$:

$$\left[k_B \right]_U = \frac{Joules}{K}. \quad (A.6)$$

- Constante de Planck \hbar :

$$\left[\hbar \right]_U = (Joules)(segundo). \quad (A.7)$$

Ahora bien, la expresión explícita de F para el modelo unidimensional de Ising es

$$F = - \left\{ J + k_B T \ln \left| \cosh \left(\frac{\mu\mu_0 H}{k_B T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu\mu_0 H}{k_B T} \right) + e^{-4 \frac{J}{k_B T}}} \right| \right\}. \quad (A.8)$$

De acuerdo con las convenciones de las unidades antes mencionadas, tenemos que

▪

$$\begin{aligned} \left[\frac{\mu\mu_0 H}{k_B T} \right]_U &= \frac{(Ampere)(metro)^2 \frac{(Tesla)(metro)}{(Ampere)} \frac{(Ampere)}{(metro)}}{\left(\frac{Joules}{K} \right) (K)}, \\ &= \frac{(Ampere)(metro)^2 Tesla}{Joules}, \\ &= \frac{(Ampere)(metro)^2 \frac{Newton}{(Ampere)(metro)}}{(Newton)(metro)}, \\ &= 1, \end{aligned} \quad (A.9)$$

porque $Tesla = \frac{Newton}{(Ampere)(metro)}$ y $Joule = (Newton)(metro)$. Por tanto, este término no tiene unidades.

-

$$\begin{aligned} [k_B T]_U &= \left(\frac{\text{Joules}}{K} \right) (K), \\ &= \text{Joules}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Así que, para ser consistentes, la constante de acoplamiento J debe tener las unidades

-

$$[J]_U = \text{Joules}. \quad (\text{A.11})$$

Entonces,

-

$$\begin{aligned} \left[\frac{J}{k_B T} \right]_U &= \frac{(\text{Joule})}{\left(\frac{\text{Joules}}{K} \right) (K)}, \\ &= 1. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Por eso, este término no tiene unidades.

La Energía libre de Helmholtz F se mide en Joules, como debe ser en este sistema de unidades.

A.1. Nuestra convención de Unidades

En este trabajo consideraremos la siguiente convención de unidades:

- Constante de Boltzman k_B :

$$[k_B]_U = 1, \quad \Rightarrow \quad \text{Joules} = K. \quad (\text{A.13})$$

- Constante de permeabilidad μ_0 :

$$[\mu_0]_U = 1, \quad \Rightarrow \quad (\text{Tesla})(\text{metro}) = \text{Ampere}. \quad (\text{A.14})$$

- Constante de Planck \hbar :

$$[\hbar]_U = 1, \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\text{segundo}} = \text{Joule}. \quad (\text{A.15})$$

De conformidad con esta convención tenemos que:

- Para la energía las unidades son

$$[U]_U = \left[F - T \frac{\partial F}{\partial T} \right]_U = [F]_U - [T]_U \left[\frac{\partial F}{\partial T} \right]_U = \text{Joules}. \quad (\text{A.16})$$

- La entropía tiene por unidades

$$[S]_U = \left[- \frac{1}{k_B} \frac{\partial F}{\partial T} \right]_U = - \left[\frac{1}{k_B} \right]_U \left[\frac{\partial F}{\partial T} \right]_U = \frac{\text{Joule}}{K} = \frac{\text{Joule}}{\text{Joule}} = 1. \quad (\text{A.17})$$

Por lo que, la entropía es adimensional.

▪

$$[M]_U = - \left[\frac{1}{\mu_0} \right]_U \left[\frac{\partial F}{\partial H} \right]_U = \frac{\text{Joule}}{\frac{(\text{Ampere})}{(\text{metro})}} = \frac{(\text{Joule})(\text{metro})}{(\text{Ampere})}. \quad (\text{A.18})$$

Por tanto, con nuestra convención de unidades, las relaciones termodinámicas que utilizaremos en este trabajo tendrán la siguiente forma:

$$F = - \left\{ J + T \ln \left| \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4 \frac{J}{T}}} \right| \right\}, \quad (\text{A.19})$$

$$U = \frac{J e^{-4 \frac{J}{T}} - \mu H \sinh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] - J \left[I \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + \sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]}{I \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right]}, \quad (\text{A.20})$$

$$S = \frac{T \ln \left[\cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + I \right] \left[\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) - I \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) - e^{-4 \frac{J}{T}} \right] + \mu H \sinh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \left[I + \cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) \right] - 2J e^{-4 \frac{J}{T}}}{T I \left[\cosh \left(\frac{\mu H}{T} \right) + I \right]}, \quad (\text{A.21})$$

$$M = \frac{\mu \sinh \left(\frac{\mu H}{T} \right)}{I}, \quad (\text{A.22})$$

donde

$$I(T, H) = \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\mu H}{T} \right) + e^{-4 \frac{J}{T}}}. \quad (\text{A.23})$$

Aquí μ es el momento magnético de los espines.

La magnitud del momento magnético de espín total -medido a lo largo de la dirección del campo magnético aplicado- se calcula, de acuerdo con la mecánica cuántica, por medio de la relación

$$\mu = -g\mu_B \sqrt{s(s+1)}, \quad (\text{A.24})$$

donde

- $\mu_B = 9,27400915 \times 10^{-24} \frac{\text{Joules}}{\text{Teslas}}$ es el magnetón de Bohr.
- g_s es un número adimensional, que depende de cada partícula:
 - $g = 2$ para el electrón.
 - $g = 5,586$ para el protón
 - $g = 3,86$ para el neutrón
- s es el número cuántico del espín.

Como un ejemplo de lo anterior, cuando se tiene un único electrón, obtenemos

$$\blacksquare s = \frac{1}{2}$$

$$\mu = -\frac{\sqrt{3}}{2}g\mu_B = \sqrt{3}\mu_B = 1,732\mu_B. \quad (\text{A.25})$$

Para momentos magnéticos típicos de diversos complejos metálicos, tenemos los valores mostrados en la tabla siguiente:

Metal	Momento magnético del espín μ
Cobre	1.73 μ_B
Cromo	3.87 μ_B
Hierro	5.92 μ_B
Níquel	2.83 μ_B

Apéndice B

Deducción de la función de partición del GIP

B.1. Introducción

Los átomos de las sustancias poseen un momento dipolar magnético $\vec{\mu}$. Si tales sustancias están sujetas a un campo magnético externo \vec{H} , los dipolos tratarán de alinearse en la dirección del campo. La energía potencial de cada dipolo es $-\vec{\mu} \cdot \vec{H}$, y todos los momentos magnéticos de los átomos se suman para constituir el momento magnético total \vec{M} de la sustancia.

También a una temperatura dada, el movimiento estadístico de los dipolos contrarresta el alineamiento. Por eso, cuando la temperatura es muy alta todos los dipolos se encuentran estadísticamente distribuidos, y los momentos magnéticos se cancelan unos a otros, así que el momento total \vec{M} desaparece. En el caso de una temperatura finita, el momento total promedio $\langle \vec{M} \rangle$ se encuentra en algún lugar entre estos casos extremos.

B.2. Función de partición

Consideramos un sistema de N dipolos libres. Por esta razón, debemos calcular la función de partición de un sistema con energía

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}, \quad (\text{B.1})$$

en el que hemos ignorado la energía de rotación de los dipolos. De acuerdo con [20], la función de partición de este sistema tiene la forma:

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\int \int \int e^{-\beta[\frac{p^2}{2m} - \mu H \cos \theta]} \frac{d^3 \vec{p} d^3 \vec{r} d\Omega}{h^3} \right]^N, \quad (\text{B.2})$$

donde $d^3 \vec{r} = d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \dots d^3 \vec{r}_N$, $d^3 \vec{p} = d^3 \vec{p}_1 d^3 \vec{p}_2 \dots d^3 \vec{p}_N$, h es una constante, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y hemos usado $\vec{\mu} \cdot \vec{H} = \mu_z H_z = \mu H \cos \theta$. Aquí, \vec{r} es el vector de posición de los dipolos con momento \vec{p} . Al resolver la integral con respecto a \vec{p} y \vec{r} , la ecuación (B.2) toma la forma:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{N!} \left[\int \int \int e^{-\beta[\frac{p^2}{2m} - \mu H \cos \theta]} \frac{d^3 \vec{p} d^3 \vec{r} d\Omega}{h^3} \right]^N, \\ &= \frac{1}{N!} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 \vec{r}}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3 \vec{p} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\beta \mu H \cos \theta} d\Omega \right]^N, \\ &= \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_x^2}{2m}} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_y^2}{2m}} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_z^2}{2m}} dp_z \int_{-\infty}^{\infty} e^{\beta \mu H \cos \theta} d\Omega \right]^N, \\ &= \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{h^3} \left[\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right] \int_{-\infty}^{\infty} e^{\beta \mu H \cos \theta} d\Omega \right]^N, \\ &= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\int d\Omega e^{\beta \mu H \cos \theta} \right]^N, \\ &= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\int e^{\beta \mu H \cos \theta} \sin \theta d\theta d\phi \right]^N, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

donde hemos utilizado la relación $\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$.

Resolviendo la última integral obtenemos:

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\int e^{\beta \mu H \cos \theta} \sin \theta d\theta d\phi \right]^N, \\
&= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi e^{\beta \mu H \cos \theta} \sin \theta d\theta \right]^N, \\
&= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\left[2\pi \right] \left[-\frac{1}{\mu \beta H} \left(e^{-\mu \beta H} - e^{\mu \beta H} \right) \right] \right]^N, \\
&= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[\left[2\pi \right] \left[\frac{2 \sinh(\beta \mu H)}{\mu \beta H} \right] \right]^N, \\
&= \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N \left[4\pi \frac{\sinh(\beta \mu H)}{\beta \mu H} \right]^N, \tag{B.4}
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado la relación trigonométrica $\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$.

La ecuación (1.3) es la función de partición para el Gas Ideal Paramagnético (GIP).

Bibliografía

- [1] *Diccionario Hispánico Universal, Tomo 2*, W. M. Jackson, Inc., Editores, México, D.F.
- [2] R. Dedekind *Theory of the algebraic integers*, Cambridge Univ. Press, 1996.
- [3] J.R. Newman, *SIGMA, El mundo de las matemáticas, Tomo 1*, Grijalbo, 1997.
- [4] G.F.B. Riemann, *Über die Hypothesen, die der Geometrie Zugrunde liegen (Sobre las hipótesis que sirven de fundamento a la Geometría)*, Werke, 1854.
- [5] B. F. Schutz, *A first course in general relativity*, Cambridge University Press, 1984.
- [6] J.W. Gibbs, *A method of Geometrical Representation of the thermodynamic Properties of Substances by Means of Surfaces*, Transactions of the connecticut Academy, Vol II, part 2, pp.382–404, 1873.
- [7] J. C. Maxwell, *Teoría del calor*, Dover Publications, Inc. ISBN 0-486-41735-2.
- [8] F. Weinhold, *Metric Geometry of equilibrium thermodynamics I, II, III, IV, V*, J. Chem. Phys. **g3**, 2479, 2484, 2488, 2496 (1975); **65**, 558 (1976).
- [9] G. Ruppeiner, *Thermodynamics: A Riemannian geometric model*, Phys. Rev. A **20**, 1608 (1979).
- [10] J. L. Álvarez, H. Quevedo and A. Sánchez, *Unified geometric description of black hole thermodynamics*, Phys. Rev, D, **77**, 084004, (2008).

- [11] H. Quevedo, *Geometrothermodynamics*, J. Math. Phys., **48**, 013506 (2007).
- [12] H. Quevedo and A. Sánchez, *Geometrothermodynamics of asymptotically anti-de Sitter black holes*, JHEP **09**, 034 (2008).
- [13] H. Quevedo, A. Sánchez, and A. Vázquez, *Thermodynamic systems as bosonic strings*, arXiv:0805.4819v1 [hep-th] (2008).
- [14] H. Quevedo, A. Sánchez, and A. Vázquez, *Invariant geometry of the ideal gas*, arXiv:0811.0222v1 [math-ph] (2008).
- [15] H. Quevedo, and A. Sánchez *Geometric description of BTZ black holes thermodynamics*, Phys. Rev. D **79**, 024012 (2009)
- [16] H. Quevedo, and A. Sánchez, *Geometrothermodynamics of black holes in two dimensions*, Phys. Rev. D **79**, 87504 (2009).
- [17] H. Quevedo, A. Sánchez, S. Taj and A. Vázquez, *Phase transitions in geometrothermodynamics*, General Relativity and Gravitation. DOI 10.1007/s10714-010-0996-2 (2010).
- [18] A. Vázquez, H. Quevedo and A. Sánchez, *Thermodynamic systems as extremal hypersurfaces*, Journal of Geometry and Physics, **60**, 1942-1949 (2010).
- [19] H. Quevedo, A. Sánchez, S. Taj and A. Vázquez, *Curvature as a Measure of the thermodynamic Interaction*, Journal of the Korean Physical Society, **57**, 646-650 (2010).
- [20] H. Quevedo and M.N. Quevedo, *Statistical Thermodynamics of economic systems*, (2009).
- [21] L. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*. Pergamos Press, New York, U.S.A., (1980).
- [22] H.B. Callen, *Termodinámica*, editorial AC, Madrid (1985).
- [23] M. Gray, *MicroBio.Today*, 76, 89 (1993).
- [24] T. Dausxois *et al.*, *Dynamic and Thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation*, Phys. Rev. E **47**, 684 (1993).

- [25] M.Mijatović, V. Veselinović, and K. Trencovski, *Differential geometry of equilibrium thermodynamics* Phys. Rev. A. **35**,1863 (1987).
- [26] D. Brody and N. Rivier, *Geometrical aspects of statistical mechanics*, Phys. Rev. E **51**,1006 (1995).
- [27] M.W. Zemansky, *Calor y Termodinámica* (McGraw-Hill, México, 1985).
- [28] V. I. Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics*, Springer Verlag, New York, (1980).
- [29] N. Pidokrajt and J. Ward, *Thermodynamic Geometry and Type 0A Black Holes*, arXiv:1106.2831v1 [gr-qc], (2011).