

# Física Estadística 2026-1 - Tarea 2

Emilio Moreno Ledesma

19 de septiembre de 2025

## 1. Ejercicio 1. (Computacional)

Sean dos sólidos de Einstein, con  $N_A = 300$ ,  $N_B = 200$  osciladores y un número total de paquetes de energía  $q_{tot} = 100$  para distribuir entre los dos sólidos.

- a) Genera una sola tabla de datos que contenga los paquetes de energía del sólido  $A$ ,  $q_A$ ; la multiplicidad  $\Omega_A$ ; la entropía normalizada,  $S_A/k_B$ ; y el inverso de la temperatura,  $dS_A/dU_A$ , con  $U_A = \epsilon_0 q_A$  la energía del sistema  $A$  y  $\epsilon_0$  una constante igual a 1. Haz lo mismo para el sólido  $B$ , con la  $q_B$  correspondiente a cada  $q_A$  tal que  $q_A + q_B = q_{tot}$  (en la misma tabla, como se hizo en clase). Una vez hecho eso, agrega los valores para el sistema  $A+B$  de multiplicidad total,  $\Omega_{total}$ ; y de entropía total normalizada,  $S_{total}/k_B$ .

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import pandas as pd
from scipy.special import factorial as sp_factorial

factorial = lambda n: sp_factorial(n, exact=True) if n < 10**3 else sp_factorial(n)
factorial = np.vectorize(factorial)
e = np.e
plt.rcParams.update({"font.family": "Times New Roman", "mathtext.fontset": "cm"})

NA, NB, q = 300, 200, 100
epsilon = 1

# a)
def Omega(q, N):
    return factorial(N - 1 + q) / (factorial(q) * factorial(N - 1))

# A
qA = np.arange(0, q+1)
OmegaA = []
for qa in qA:
    OmegaA.append(Omega(qa, NA))
OmegaA = np.array(OmegaA)
SA = np.log(OmegaA)
TA = np.zeros(len(SA))
TA[1:] = SA[1:] - SA[:-1]
TA[0] = TA[1]

# B
qB = q - qA
OmegaB = []
for qb in qB:
    OmegaB.append(Omega(qb, NB))
```

```

OmegaB = np.array(OmegaB)
SB = np.log(OmegaB)
TB = np.zeros(len(SB))
TB[1:] = -(SB[1:] - SB[:-1])
TB[0] = TB[1]

# Total
OmegaT = OmegaA * OmegaB
ST = SA + SB

AB = np.array([qA, qB, OmegaA, OmegaB, SA, SB, TA, TB, OmegaT, ST]).T
AB_columns = ["$q_A$","$q_B$","$\Omega_A$","$\Omega_B$",
              "$S_A/k$","$S_B/k$","$T_A^{-1}/k$","$T_B^{-1}/k$",
              "$\Omega_{total}$","$S_{total}/k$"]

df = pd.DataFrame(AB, columns=AB_columns)

```

Figura 1: Tabla de datos de los sólidos  $A$  y  $B$ .

$q_A$	$q_B$	$\Omega_A$	$\Omega_B$	$S_A/k$	$S_B/k$	$T_A^{-1}/k$	$T_B^{-1}/k$	$\Omega_{total}$	$S_{total}/k$
0.0	100.0	1.000000e+00	2.772168e+81	0.000000	187.529022	5.703782	1.095273	2.772168e+81	187.529022
1.0	99.0	3.000000e+02	9.271464e+80	5.703782	186.433749	5.703782	1.095273	2.781439e+83	192.137531
2.0	98.0	4.515000e+04	3.080117e+80	10.717746	185.331775	5.013963	1.101974	1.390673e+85	196.049521
3.0	97.0	4.545100e+06	1.016335e+80	15.329560	184.223010	4.611815	1.108765	4.619344e+86	199.552571
4.0	96.0	3.442913e+08	3.330557e+79	19.656999	183.107362	4.327438	1.115648	1.146682e+88	202.764361
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
96.0	4.0	6.338115e+93	6.868505e+07	215.986995	18.045042	1.414538	3.708682	4.353337e+101	234.032037
97.0	3.0	2.587519e+94	1.353400e+06	217.393698	14.118131	1.406703	3.926912	3.501948e+100	231.511829
98.0	2.0	1.048209e+95	2.010000e+04	218.792667	9.908475	1.398969	4.209655	2.106901e+99	228.701142
99.0	1.0	4.214013e+95	2.000000e+02	220.183999	5.298317	1.391332	4.610158	8.428026e+97	225.482317
100.0	0.0	1.681391e+96	1.000000e+00	221.567790	0.000000	1.383791	5.298317	1.681391e+96	221.567790

- b) Determina la entropía total para la cual las temperaturas inversas de  $A$  y  $B$  son las más cercanas entre sí.

```

# b)
min_index = np.argmin(np.abs(1/TA - 1/TB))
TA_min, TB_min, _, ST_forTeq = AB[min_index, -4:]
ST_max = np.max(ST)

print(1/TA_min, 1/TB_min, ST_forTeq, ST_max)

```

La diferencia en temperaturas se minimiza para  $S_{T,eq} = 264,41 k$ , que es cercano al valor máximo de la entropía:  $S_{T,max} = 264,42 k$ . Dentro del código, estos datos difieren por un índice, por lo que esta discrepancia puede deberse a la manera en la que calculamos las diferencias finitas.

- c) Grafica  $S_{total}$ ,  $S_A$  y  $S_B$  vs.  $q_A$  (en una misma gráfica para poder comparar entre sí). Muestra en la gráfica el valor de  $q_A$  para el cuál se maximiza la entropía.

```

fig, ax = plt.subplots()

max_index = np.argmax(ST)

ax.scatter([qA[max_index]], [ST[max_index]], color="r", zorder=1, label="$S_{total, \text{máx}}$")
ax.plot(qA, SA, label="$S_A/k$", zorder=0)
ax.plot(qA, SB, label="$S_B/k$", zorder=0)
ax.plot(qA, ST, label="$S_{\{total\}}/k$", zorder=0)

ax.set(title="Entropías como función de $q_A$", xlabel="$q_A$", ylabel="$S/k$")

plt.legend()
plt.savefig("Figures/1-b.png", dpi=300)

```

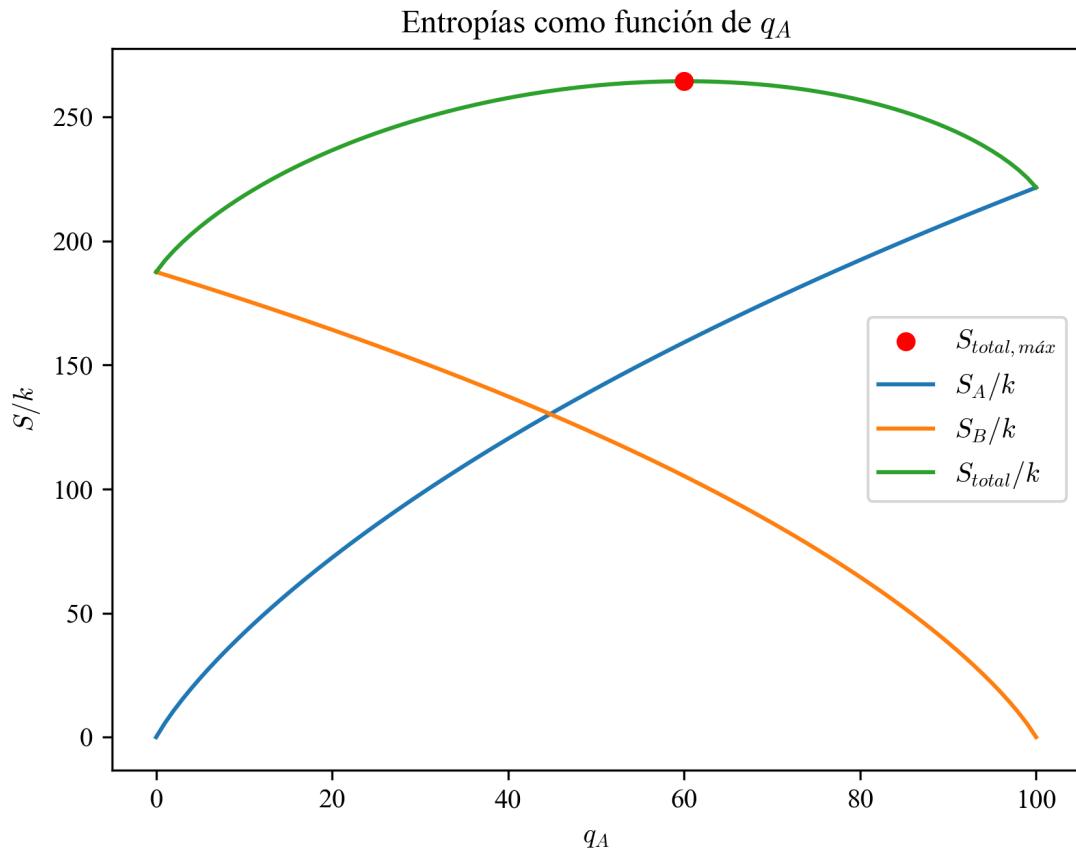


Figura 2: Entropías de los sólidos A y B como función de la energía en A.

## 2. Ejercicio 2.

Considera un sólido de Einstein con  $N$  osciladores y  $q$  unidades de energía.

- a) Muestra que en el límite en que  $q \gg N$ ,

$$\log(\Omega) \approx N \log\left(\frac{q}{N}\right) + N + \frac{N^2}{q}, \quad (1)$$

- b) y que si además  $q \gg N^2$ , entonces:

$$\Omega(N, q) \approx \left(\frac{eq}{N}\right)^N. \quad (2)$$

### 3. Ejercicio 3.

Considera ahora dos sólidos de Einstein en la misma aproximación que en el ejercicio 2, con cuantos de energía  $q_A$  y  $q_B$ , y número de osciladores  $N_A = N_B = N$ .

- a) Encuentra la multiplicidad del sistema  $A + B$ .
- b) De manera análoga a como hicimos con la distribución binomial para aproximarla a una Normal, define una nueva variable  $x$  que cuantifica qué tan lejos estamos del promedio de  $q_A$  es decir,  $q_A = (q/2) + x$ ,  $q_B = (q/2) - x$ . Utiliza el mismo método que vimos en clase para mostrar que en el límite en que  $x \ll 1$  (en las inmediaciones de  $q/2$ ),

$$\Omega \propto e^{-N(x/q)^2}, \quad (3)$$

es decir, que la multiplicidad se aproxima a una distribución normal centrada en  $x = 0$ , (o de manera equivalente, que está centrada en  $q_A = q/2$ ).

- c) ¿Cuál es el coeficiente de variación de  $q_A$ ? Pista: Recuerda que  $\Omega(q_A)$  es proporcional a la probabilidad de encontrar al sistema en el macroestado con energía  $q_A$ .

Ejercicio 2:

a) La multiplicidad para un sólido de Einstein es

$$S_2 = \frac{(N+q)!}{q! (N-q)!}$$

Siendo entonces

$$\ln S_2 = \ln[(N+q)!] - \ln(q!) - \ln[(N-q)!].$$

Asumiendo que  $N, q \gg 1$ , de manera

que podemos usar la aproximación  $\ln x \approx \ln \left( \frac{x}{N} \right)^N + N$

de Stirling:

$$\begin{aligned} \ln S_2 &\approx (N+q) \ln(N+q) - (N+q) \\ &\quad - q \ln q + q - (N-q) \ln(N-q) + (N-q) \\ &= (N+q) \ln(N+q) - q \ln q - (N-q) \ln(N-q). \end{aligned}$$

Además, como  $N-q \gg 1$ ,  $N-q \approx N$ :

$$\ln S_2 \approx (N+q) \ln(N+q) - q \ln q - N \ln N.$$

Ahora sumando los errores,

$$\begin{aligned} \ln S_2 &\approx (N+q) \ln(N+q) - (N+q) \ln q \\ &\quad - N \ln N - q \ln q \\ &= (N+q) \ln\left(\frac{N+q}{q}\right) - N \ln\left(\frac{N}{q}\right) \\ &= N \ln\left(\frac{q}{N}\right) + (N+q) \ln\left(1 + \frac{N}{q}\right) \\ &\approx N \ln\left(\frac{q}{N}\right) + (N+q) \frac{N}{q} \\ &= N \ln\left(\frac{q}{N}\right) + N + \frac{N^2}{q}. \end{aligned}$$

En donde nuestra aproximación anterior nos dice que  $\ln(1+x) \approx x$ , para  $x = \frac{N}{q} \ll 1$ .

b) Si  $\frac{N^2}{q} \ll 1$ , podemos dividirlos

de este término;

$$\ln S_2 \approx N \ln\left(\frac{q}{N}\right) + N$$

$$\ln S_2 \approx \ln\left[\left(\frac{q}{N}\right)^N\right] + N$$

y exponentiando,

$$S_2 \approx \left(\frac{q}{N}\right)^N e^N = \left(\frac{e^q}{N}\right)^N.$$

Ejercicio 3:

Dos sólidos de Einstein con  $q_A, q_B$ ;  $N_A = N_B = N$ ;  $N^2/q \gg 1$ .

a) Usando la aproximación del anterior ejercicio

$$\begin{aligned} S_2 = S_A S_B &\approx \left(\frac{e^{q_A}}{N}\right)^N \left(\frac{e^{q_B}}{N}\right)^N \\ &= \left(\frac{e^{q_A+q_B}}{N}\right)^N. \end{aligned}$$

b) Definiendo  $q_A = (q/2) + x$ ,  $q_B = (q/2) - x$ , podemos escribir:

$$\begin{aligned} S_2 &\approx \left(\frac{e}{N}\right)^N \left[ (q/2 + x)/(q/2 - x) \right]^N \\ &= \left(\frac{e}{N}\right)^N \left[ q^2/4 - x^2 \right]^N \end{aligned}$$

Figura 3: Ejercicio 2 y primer mitad del Ejercicio 3

$$= \left(\frac{\sigma}{N}\right)^N \left(1 - \left(\frac{x}{q/2}\right)^2\right)^N.$$

Ahora, para  $x \ll q/2$  (o más restrictivamente, para  $N \gg 1$ ):

$$\begin{aligned} e^{-\left(\frac{x}{q/2}\right)^2} &= 1 - \left(\frac{x}{q/2}\right)^2 + O\left(\left(\frac{x}{q/2}\right)^4\right) \\ &\approx 1 - \left(\frac{x}{q/2}\right)^2. \end{aligned}$$

Con lo que

$$\begin{aligned} S_L &\approx \left(\frac{\sigma}{N}\right)^N \left(e - \left(\frac{x}{q/2}\right)^2\right)^N \\ &= \left(\frac{\sigma}{N}\right)^N e^{-N\left(\frac{x}{q/2}\right)^2}. \\ &\Rightarrow S_L \approx e^{-N\left(\frac{x}{q/2}\right)^2} \end{aligned}$$

Siendo  $q_{12}$  el promedio de  $q_A, q_B$ .

c) Veamos que

$$\begin{aligned} S_L(q_A) &\approx \left(\frac{\sigma}{N}\right)^N e^{-N\left(\frac{q_A - q/2}{q/2}\right)^2} \\ &= e^{\exp\left[-\left(\frac{q_A - q/2}{q/2\sqrt{N}}\right)^2\right]} \\ &= e^{\exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(q_A - q/2)^2}{(q/2)^2 N}\right]}. \end{aligned}$$

$$\approx Z \mathcal{N}\left(\mu = q/2, \sigma = \frac{\sigma}{\sqrt{2N}}\right)$$

con  $Z$  un factor de normalización.

Si como  $\chi(q_A) \approx S_L(q_A)$ ,

$$\chi(q_A) \approx \mathcal{N}\left(\mu = q/2, \sigma = \frac{\sigma}{\sqrt{2N}}\right).$$

Siendo entonces

$$CV(q_A) \approx \frac{\sigma}{\mu} = \frac{q/2^{3/2} \sqrt{N}}{q/2} = \frac{1}{\sqrt{2N}}.$$

Figura 4: Segunda mitad del Ejercicio 3

#### 4. Ejercicio 4. Capacidad calorífica del sólido de Einstein.

En la clase probamos que la energía por oscilador de un sólido de Einstein está dado por,

$$\overline{U}(T) = \frac{\epsilon}{e^{\epsilon/k_B T} - 1} \quad (4)$$

- a) Si hay 3 osciladores por número n de moléculas, obtén la capacidad calorífica (escribe primero cuánto vale la energía total como función de n). Escribe a la capacidad calorífica como función de la variable  $\Theta = k_B T / \epsilon$ .
- b) Muestra que la capacidad calorífica para temperaturas altas ( $k_B T \gg \epsilon$ ) es una constante igual a  $C_V = 3nk_B$ . Esta es la llamada **Ley de Dulong y Petit**.

Ejercicio 4:

La energía por oscilador para un sólido de Einstein es

$$u(T) = \frac{C}{e^{kT} - 1}$$

a) Teniendo la energía total para n moléculas con tres osciladores cada una:

$$U = 3nu = 3n \frac{C}{e^{kT} - 1}$$

O en términos de  $\theta = kT/e$

$$U = 3n \frac{C}{e^{kT/\theta} - 1}$$

Luego la rapidez superficial está dada por

$$C = \frac{\partial Q}{\partial T}$$

Para un sólido podemos asumir que el cambio de volumen es despreciable respecto al cambio energético cuando aumentamos la temperatura, con lo que, por la primera ley de la termodinámica

$$dQ = dU + PdV \approx dU$$

$$\Rightarrow C = \frac{\partial Q}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$= \frac{\partial U}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial T}$$

$$= 3n\theta \frac{e^{1/\theta}}{\theta^2(e^{1/\theta}-1)^2} \frac{K}{\theta}$$

$$= 3nK \frac{1}{\theta^2} \frac{e^{-1/\theta}}{(e^{-1/\theta}-1)^2}$$

b)

Para  $kT \gg \theta \Leftrightarrow \frac{e^{-1/\theta}}{1-\theta} \approx \frac{1}{\theta}$

$$\frac{1}{e^{1/\theta}-1} \approx \frac{1}{1+\theta^{-1}} = \theta, \text{ con lo}$$

que  $C = 3nK \frac{\theta^2}{\theta^2} e^{-1/\theta} = 3nK e^{-\theta} \approx 3nK$ .

Algunas para la última aproximación que  $e^{-\theta} \ll 1$ .

Figura 5: Incisos a), b) del Ejercicio 4

- c) Grafica  $C_V/nk_B$  como función de  $\Theta$  en el rango  $1 \geq \Theta \geq 0$ . ¿Qué tipo de decaimiento observas conforme  $\Theta \rightarrow 0$  (en el régimen de bajas temperaturas)?

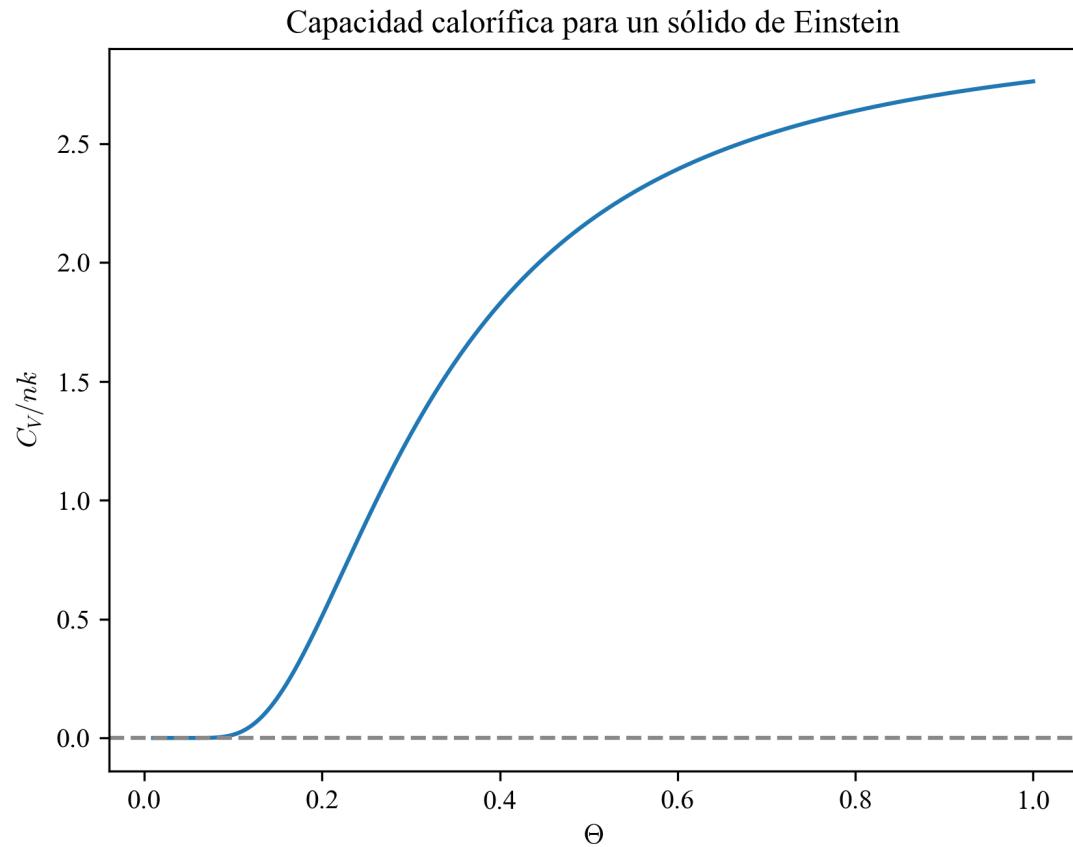


Figura 6: Capacidad calorífica para un sólido de Einstein

La capacidad calorífica parece tener un decaimiento exponencial hacia  $C_V = 0$  conforme la temperatura tiende a cero.

## 5. Ejercicio 5 (Computacional).

Considera dos sólidos de Einstein, uno mucho más grande que el otro, con  $N_A = 1$  y  $N_B = 100$ , y con un total de energía  $q_T = q_A + q_B = 500$

- a) Utilizando la aproximación de Stirling, elabora una tabla con el logaritmo de la multiplicidad  $\Omega_{total}$  del sistema total para valores de  $q_A$  entre 0 y 20.

$q_A$	$\ln\Omega_{total}$
0.0	268.540783
1.0	268.359964
2.0	268.178813
3.0	267.997329
4.0	267.815511
5.0	267.633358
6.0	267.450868
7.0	267.268040
8.0	267.084873
9.0	266.901365
10.0	266.717515
11.0	266.533323
12.0	266.348786
13.0	266.163904
14.0	265.978674
15.0	265.793097
16.0	265.607170
17.0	265.420892
18.0	265.234262
19.0	265.047278

Figura 7: Multiplicidad vs energía en a)

Ejercicio 5:

Dos sólidos de Einstein.  $N_A = 1$ ,  $N_B = 100$

$$q_T = q_A \cdot q_B = 500.$$

a) Tenemos que

$$\Omega_B = \frac{(N_B - 1 + q_B)!}{(N_B - 1)! q_B!}, \quad \Omega_A = \frac{(N_A - 1 + q_A)!}{(N_A - 1)! q_A!}$$
$$\Omega_A = \frac{q_A!}{q_A!} = 1.$$

Por lo que

$$\Omega_{\text{total}} = \Omega_A \Omega_B = \frac{(N_B - 1 + (q_T - q_A))!}{(N_B - 1)! (q_T - q_A)!}$$

Para  $q_A \in [0, 20]$ ,  $q_T - q_A \gg 1$  y como también  $N_B \gg 1$ , podemos usar la aproximación de Stirling para escribir:

$$\ln \Omega_{\text{total}} \approx (N_B + q_T - q_A) \ln (N_B - 1 + (q_T - q_A))$$
$$- (q_T - q_A) \ln (q_T - q_A)$$
$$- (N_B - 1) \ln (N_B - 1).$$

Figura 8: Inciso a) del Ejercicio 5

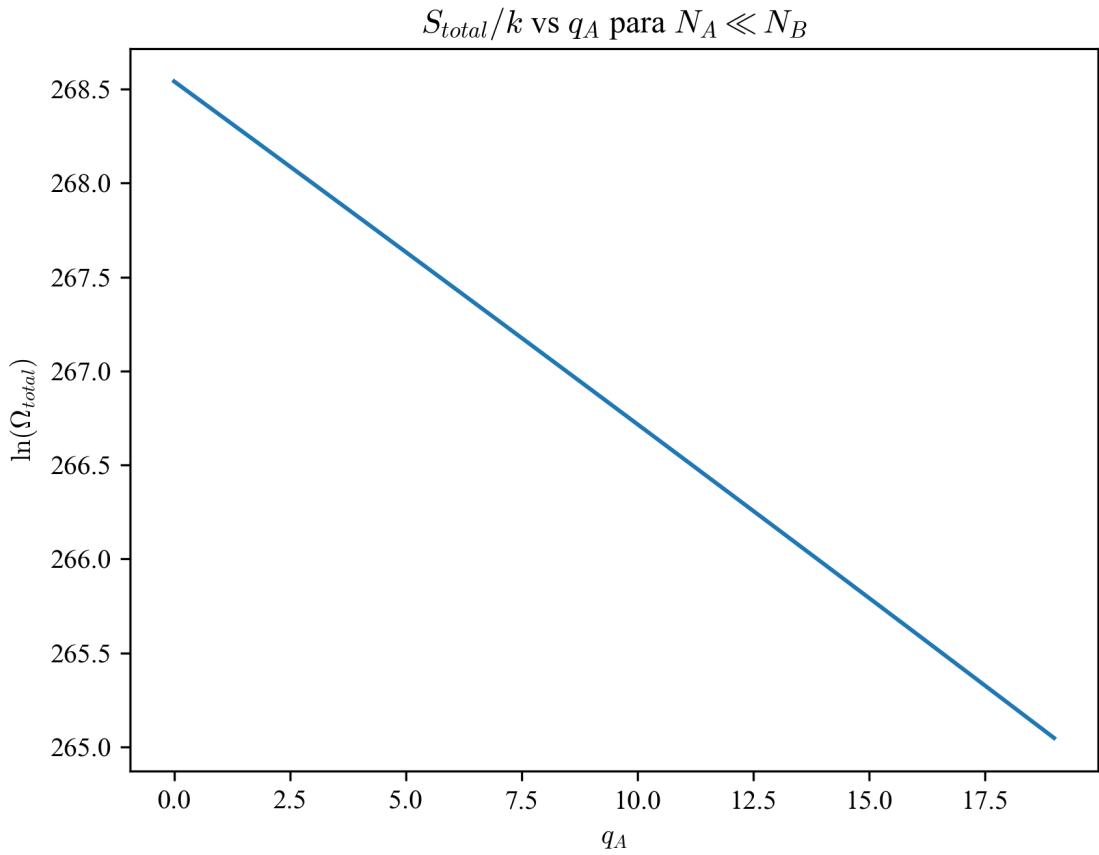


Figura 9: Ejercicio 5 inciso b)

- b) Grafica  $\log(\Omega_{total})$  contra  $q_A$  en ese mismo rango.
- c) ¿Qué concluyes de la forma funcional de  $\Omega_{total}$  como función de  $q_A$ ? Es decir, ¿qué forma parece tener la función de probabilidad de encontrar al sistema en el macroestado  $q_A$ ?

Observamos que la multiplicidad del sistema disminuye exponencialmente conforme aumenta la energía en el sólido  $A$ , por lo tanto, la probabilidad de encontrar al sólido  $A$  en una cierta configuración disminuye conforme aumentamos su energía. Esto puede explicarse porque el número de microestados con la energía distribuida sobre los muchos osciladores de  $B$  es mayor que el número de microestados con la energía concentrada sobre  $A$ . Así, el arreglo de osciladores prefiere distribuir su energía sobre muchos osciladores a concentrarla sobre sólo uno.

La función de probabilidad de  $A$  es proporcional a la multiplicidad del sistema  $\Omega(q_A)$ . Y como  $\ln\Omega(q_A) = -\lambda$ ,  $\lambda > 0$ . Esperamos que la función de probabilidad de  $A$  sea una exponencial negativa.