

Física Estadística 2026-1 - Tarea 5

Emilio Moreno Ledesma

1 de octubre de 2025

Ejercicio 1.

En la clase encontramos la solución de **campo medio** para el modelo de Ising de dipolos interactuantes, y encontramos que la energía libre de Helmholtz por dipolo adimensional es $F^* = U^*(x) - T^*S^*(x)$, donde

$$F^* = \left(\frac{F}{N \cdot J} \right), \quad U^* = -2x^2, \quad T^* = \left(\frac{k_B T}{J} \right)$$
$$S^* = - \left\{ \frac{1+x}{2} \ln \left(\frac{1+x}{2} \right) + \frac{1-x}{2} \ln \left(\frac{1-x}{2} \right) \right\}.$$

De manera explícita:

$$F^* = -2x^2 + T^* \left\{ \frac{1+x}{2} \ln \left(\frac{1+x}{2} \right) + \frac{1-x}{2} \ln \left(\frac{1-x}{2} \right) \right\},$$

donde $-1 \leq x \leq 1$ es la fracción de dipolos orientados en la misma dirección.

a) Muestra en una misma la figura, las gráficas de F^* vs. x para $T = \{3, 3.5, 4, 4.5, 5\}$.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

plt.rcParams.update({"font.family": "Times New Roman", "mathtext.fontset": "cm"})

T_star = np.arange(3, 5.5, 0.5)
x = np.linspace(-0.999, 0.999, 1000)
U_star = -2*x**2

fig, ax = plt.subplots(dpi=300)
ax.set(title="Energía libre de Helmholtz\n para un sistema de dipolos en la aproximación de campo medio",
      xlabel="$x$",
      ylabel="$F^*$")
for t_star in T_star:
    F_star = U_star + t_star * ((1 + x)/2 * np.log((1 + x)/2) + (1 - x)/2 * np.log((1 - x)/2))
    ax.plot(x, F_star, label=f"$T^* = {t_star}$")
plt.legend()

plt.savefig("figures/Ejercicio1.png")
```

Energía libre de Helmholtz
para un sistema de dipolos en la aproximación de campo medio

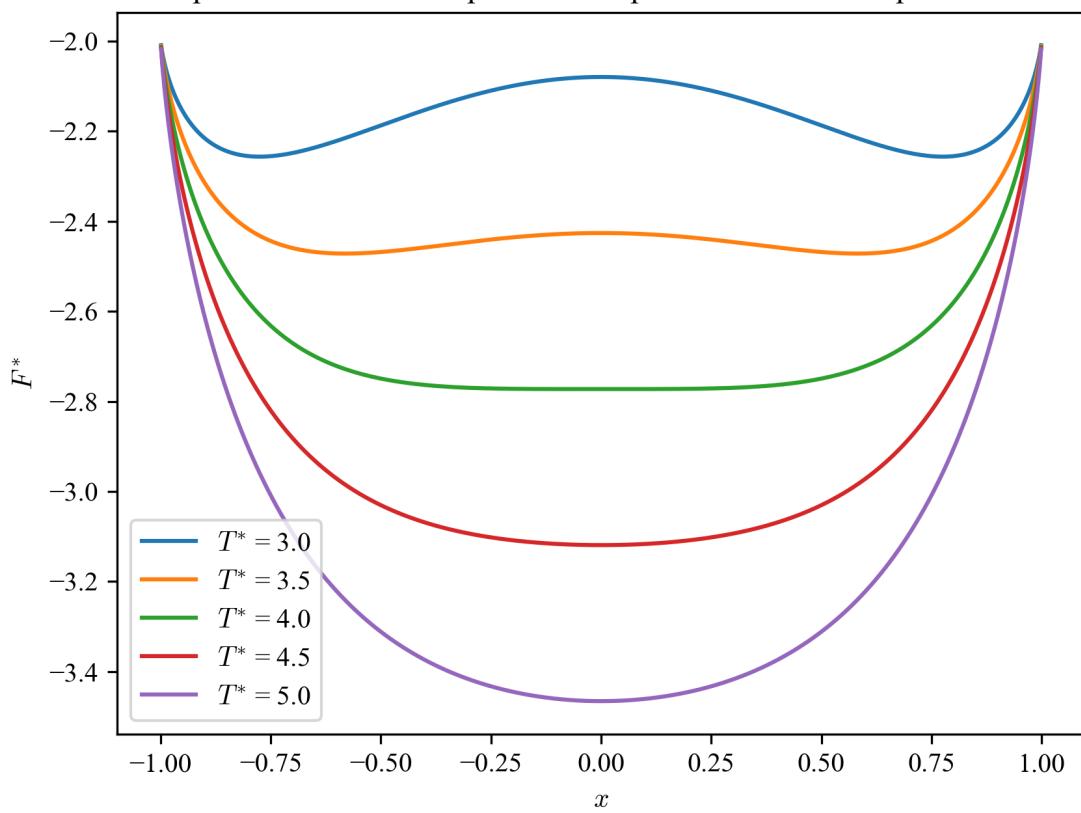


Figura 1: Energía libre de Helmholtz para un sistema de dipolos interactuantes en la aproximación de campo medio.

b) ¿A qué temperatura se encuentra el sistema en el estado crítico? Justifica tu respuesta.

Ejercicio 1:

b) Si realizamos una expansión de Taylor de F^* en términos del parámetro crítico x , hallamos

$$\begin{aligned} F^* &= -2x^2 + T^* \left\{ \frac{1+x}{2} \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) + \frac{1-x}{2} \ln\left(\frac{1-x}{2}\right) \right\} \\ &= -2x^2 + \frac{T^*}{2} \left\{ (1+x) \ln(1+x) + (1-x) \ln(1-x) - 2 \ln(2) \right\} \\ &= -T^* \ln(2) - 2x^2 + \frac{T^*}{2} \left\{ (1+x) \left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + O(x^4) \right) \right. \\ &\quad \left. + (1-x) \left(-x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} + O(x^4) \right) \right\} \\ &= -T^* \ln(2) + \frac{1}{2} (T^* - 4)x^2 + \frac{T^*}{12} x^4 + O(x^5). \end{aligned}$$

El término que acompaña a x^2 cambia de signo al cruzar $T^* = 4$, siendo negativo y produciendo dos mínimos para $T^* < 4$, y siendo positivo y produciendo un único mínimo para $T^* \geq 4$. Por lo que $T^* = 4$ es nuestra temperatura crítica.

Figura 2: Ejercicio 1.b).

Ejercicio 2.

Para el mismo sistema en el ejercicio 1, sigue el método que establecimos para encontrar a la energía como función de la temperatura partiendo de la expresión de $S(U)$. Explícitamente:

- Identifica a $U(x)$.
- Identifica a $S(x)$.
- Calcula $\frac{1}{T} = \frac{dS(x)}{dx} \frac{dx}{dU}$.
- Encuentra una ecuación trascendental para x , en la que de un lado aparezca únicamente el término $\ln \frac{1+x}{1-x}$.

y en el otro aparezca el término $T^* = \frac{k_B T}{J}$.

Ejercicio 2:

a) Consideremos N dipolos con una energía de interacción:

$$U = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} y_i y_j.$$

Siendo $x = \sqrt{\frac{U}{-2NJ}}$, con lo que

$$\frac{\partial x}{\partial U} = \frac{1}{2^{3/2} \sqrt{-NJ}} \frac{1}{x} = \frac{1}{2^{3/2} \sqrt{2NJ} e^{-x^2}} = \frac{1}{4NJ} \frac{1}{|x|}.$$

donde $y_i y_j \in \{-1, 1\}$ son las orientaciones con lo que de los dipolos.

Ahora, si usamos la aproximación de campo medio $y_i y_j \rightarrow \langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$, encontramos

$$U = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \langle y \rangle^2 = -2NJ \langle y \rangle^2 = -2NJx^2.$$

Donde definimos $x := \langle y \rangle$

b) Si ademas consideramos que la orientación de cada dipolo es independiente, tendremos un sistema de dos estados con la misma energía que los dipolos no interactuantes:

$$S = N \left[\left(\frac{1+x}{2} \right) \ln \left(\frac{1+x}{2} \right) + \left(\frac{1-x}{2} \right) \ln \left(\frac{1-x}{2} \right) \right].$$

c) Hay funciones

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial U} = \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial U} \\ &= \frac{N}{2} \left[\ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right) \right] \frac{\partial x}{\partial U} \end{aligned}$$

$$\frac{4NJ}{T} |x| = \frac{N}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$$

$$\frac{4J}{kT} |x| = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$$

$$\frac{8}{T^2} |x| = \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right).$$

Figura 3: Ejercicio 2.a,b,c,d).

e, f, g) Grafica ambos lados de la ecuación en una misma figura para $T^* = 6, 4, 3$.

```
fig, axs = plt.subplot_mosaic([[6, 4, 3]], sharey=True, dpi=300)
```

```
x = np.linspace(0, 0.999, 1000)
T_star = [6, 4, 3]
RHS = np.log((1 + x)/(1 - x))
```

```
for t_star in T_star:
    LHS = 8 * x / t_star
```

```

if t_star == 6: ylabel = "Ecuación transcendental ($f(x)$)"
else: ylabel = ""
axs[t_star].set(title=f"Soluciones para $T^* = ${t_star}", xlabel="$x$", ylabel=ylabel)
axs[t_star].plot(x, RHS)
axs[t_star].plot(x, LHS)

plt.savefig("figures/Ejercicio2.png")

```

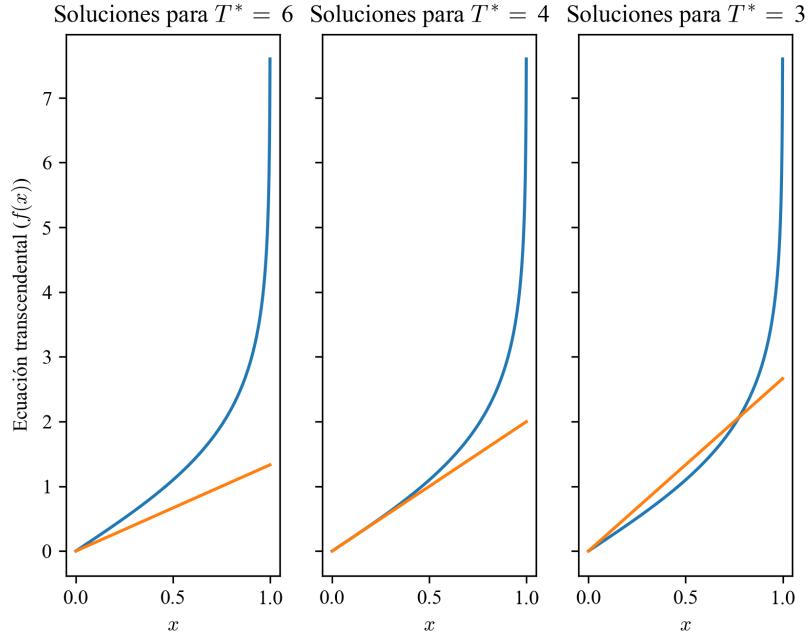


Figura 4: Ecuaciones trascendentales para los puntos de estabilidad de un sistema de dipolos interactuantes en la aproximación de campo medio.

h) ¿Cómo relacionas lo que observas en estas gráficas (el número de soluciones que obtienes como función de T^* , con los resultados del ejercicio 1?

Para temperaturas mayores o iguales a la temperatura crítica, obtenemos soluciones con $x = 0$, que corresponden a la posición de los mínimos centrales en las gráficas del Ejercicio 1. Por otro lado, para temperaturas menores a la temperatura crítica, tenemos una solución en $x = x_0 \neq 0$, lo que produce dos mínimos en $x = \pm x_0$, que se manifiestan en este régimen de temperaturas para las gráficas del Ejercicio 1.

Ejercicio 3.

Comprueba explícitamente que habías llegado a la misma solución para n/N en problema de las n vacancias en un cristal de N átomos, partiendo de la minimización de la energía libre F como función de n , es decir $(\frac{\partial F}{\partial n})_T = 0$.

Ejercicio 3:

$$\text{Tenemos que } S = k \left\{ (N+n) \ln(N+n) - N \ln(N) - n \ln(n) \right\}$$

y que $\Omega(\epsilon) = n^e$, encontramos que

$$F = \epsilon - TS = \epsilon - kT \left\{ (N+n) \ln(N+n) - N \ln(N) - n \ln(n) \right\}$$

Siendo los valores que minimizan la energía libre de Helmholtz aquellos que cumplen:

$$0 = \left(\frac{\partial F}{\partial n} \right)_T = \epsilon - kT \left[1 + \ln(N+n) - 1 - \ln(n) \right] \\ = \epsilon - kT \ln \left(1 + \frac{N}{n} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\epsilon}{kT} = \ln \left(1 + \frac{N}{n} \right)$$

$$\Rightarrow 1 + \frac{N}{n} = e^{\epsilon/kT}$$

$$\frac{n}{N} = \frac{1}{e^{\epsilon/kT} - 1}$$

por lo que obtenemos la misma solución que si hubiéramos usado $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial \epsilon}$.

Figura 5: Ejercicio 3.

Ejercicio 4

Un paramagneto en una dimensión puede ser modelado como una cadena lineal de $N+1$ espines. Cada espín interactúa con sus vecinos de tal manera que la energía es:

$$U = n\varepsilon$$

donde n es el número de paredes de dominio que separan las regiones de espines arriba de los espines abajo.

1. ¿De cuántas maneras se pueden acomodar n paredes de dominio? Calcula la entropía $S(U)$ y luego muestra que la energía se relaciona con la temperatura T de la siguiente manera:

$$U = \frac{N\varepsilon}{\exp(\varepsilon/k_B T) + 1}$$

Ejercicio 4:

1. $111|11 \dots |11|11$

Podemos acomodar n partidos entre las posiciones de los espines, lo que nos da N lugares a elegir para Nn espines. Como debemos acomodar n partidos tenemos la multiplicidad:

$$\Omega(n) = \binom{N}{n} = \frac{N!}{(N-n)! n!}$$

Donde la entropía: $S(W) = k \ln \Omega(W)$. Ciudad anterior:

Usando la aproximación de Stirling

* partidos:

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{n} &= N \ln N - N - (N-n) \ln(N-n) + (N-n) \\ &\quad - n \ln n + n \\ &= N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n. \end{aligned}$$

Al ser $n = W/e$, tenemos una temperatura dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial T} \\ &= \frac{k}{e} \left[\ln(N-n) + 1 - \ln n - 1 \right] \\ &\Rightarrow \ln \left(\frac{N}{n} - 1 \right) = \frac{k}{e} T \\ &\Rightarrow \frac{N}{n} = e^{\frac{k}{e} T + 1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow n = \frac{N}{e^{\frac{k}{e} T} + 1}.$$

Con una energía

$$U = E_n = \frac{Ne}{e^{\frac{k}{e} T} + 1}.$$

2. Usando la primera ley de la termodinámica:

$$dQ = dU + PdV.$$

Con lo que a volúmen constante $dQ = dU$ y tenemos una capa-

ciudad anterior:

$$C_V = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

$$\begin{aligned} &= NE \frac{e}{K} \frac{1}{T^2} \frac{e^{\frac{k}{e} T}}{(e^{\frac{k}{e} T} + 1)^2} \\ &= \frac{NE^2}{KT^2} \frac{e^{\frac{k}{e} T}}{(e^{\frac{k}{e} T} + 1)^2}. \end{aligned}$$

Figura 6: Ejercicio 4.1.

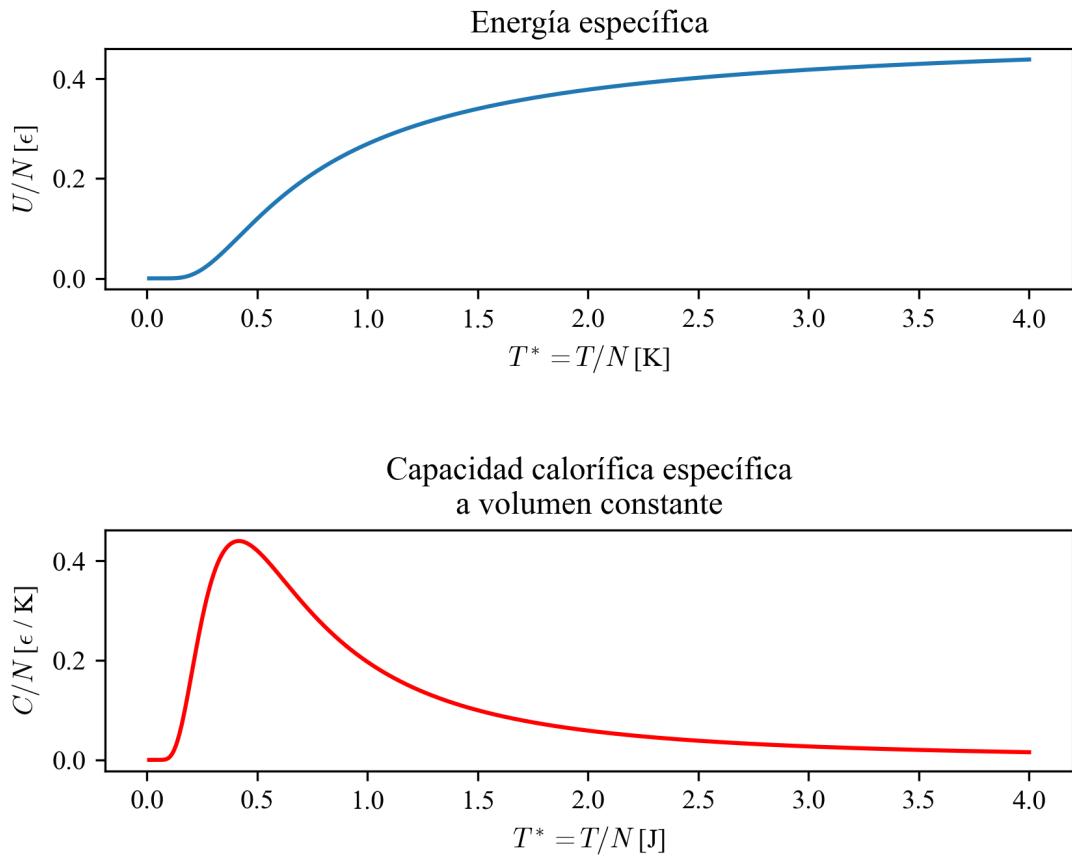


Figura 7: Energía específica y capacidad calorífica específica a volumen constante para un paramagneto unidimensional.

2. Grafica la energía y la capacidad calorífica como función de la temperatura, haciendo énfasis en el comportamiento asintótico para bajas y altas temperaturas.

```

epsilon = 1
u = lambda T: epsilon / (np.exp(epsilon/ (k*T)) + 1)
c = lambda T: epsilon**2/ (k * T**2) * np.exp(epsilon / (k * T))/ (np.exp(epsilon / (k * T)) + 1)**2
T = np.linspace(0.01, 4, 1000)

fig, axs = plt.subplot_mosaic([["u"], ["c"]], dpi=300)
axs["u"].set(title="Energía específica", xlabel="$T^* = T / N$ [K]", ylabel="$U / N$ [$\epsilon$]")
axs["c"].set(title="Capacidad calorífica específica\na volumen constante", xlabel="$T^* = T / N$ [J]", ylabel="$C / N$ [$\epsilon / K$]")

axs["u"].plot(T, u(T))
axs["c"].plot(T, c(T), color="r")

plt.subplots_adjust(hspace=1.0)

plt.savefig("figures/Ejercicio4.png")

```

Observamos que el sistema tiende a saturarse para temperaturas altas ($T^* > 2.5$), pues el aumento de temperatura produce cambios cada vez menores en la energía interna, llevando a la reducción de la capacidad

calorífica al pasar su máximo en $T^* \approx 0,5$. Por otro lado, para el régimen de temperaturas bajas ($T^* < 0,25$), la energía y la capacidad calorífica incrementan rápidamente con la temperatura.