

Solución de la ecuación de Debye mediante método numérico

¿Para qué los métodos numéricos?

Se utilizan para resolver gran parte de los problemas matemáticos importantes dentro de la ciencia y la ingeniería.

Sin embargo, en aspectos específicos, algunos de los usos más comunes son los cálculos de derivadas, ecuaciones diferenciales, integrales, interpolaciones, operaciones con matrices, así también ajuste de curvas y resolución de polinómios.

Regla de Simpson compuesto

La regla de Simpson compuesto es útil cuando se desea obtener una aproximación más precisa de la integral de una función en un intervalo dado. Dividir el intervalo en subintervalos más pequeños y aplicar la regla de Simpson en cada uno de ellos permite una mejor aproximación de la función y reduce el error de aproximación.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i}) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_{2i-1}) + f(x_n) \right]$$

Donde:

- $\int_a^b f(x) dx$ representa la integral definida de la función $f(x)$ desde a hasta b .
- h es el ancho de cada subintervalo, $h = \frac{b-a}{2n}$.

Modelo de Debye

La fórmula de Debye para la capacidad calorífica C_v de un sólido es:

$$C_v = 9NKg(u)$$

Y la integral de este modelo es:

$$g(u) = u^3 \int_0^{\frac{1}{u}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

Donde $u = \frac{T}{T_D}$, T representa la temperatura en escala absoluta y T_D es la temperatura de Debye.

Principio del fonón, frecuencia y temperatura

El modelo de Debye explica cómo la temperatura influye en la capacidad calorífica de un material.

Los átomos en el material vibran más rápido a medida que aumenta la temperatura. Estas vibraciones colectivas, conocidas como fonones, son importantes en el estudio de las propiedades térmicas.

A bajas temperaturas, solo algunos modos de vibración son relevantes debido a la limitada energía térmica. El modelo de Debye analiza la contribución de cada modo de vibración a la capacidad calorífica total, revelando cómo se distribuye la energía térmica en el material.

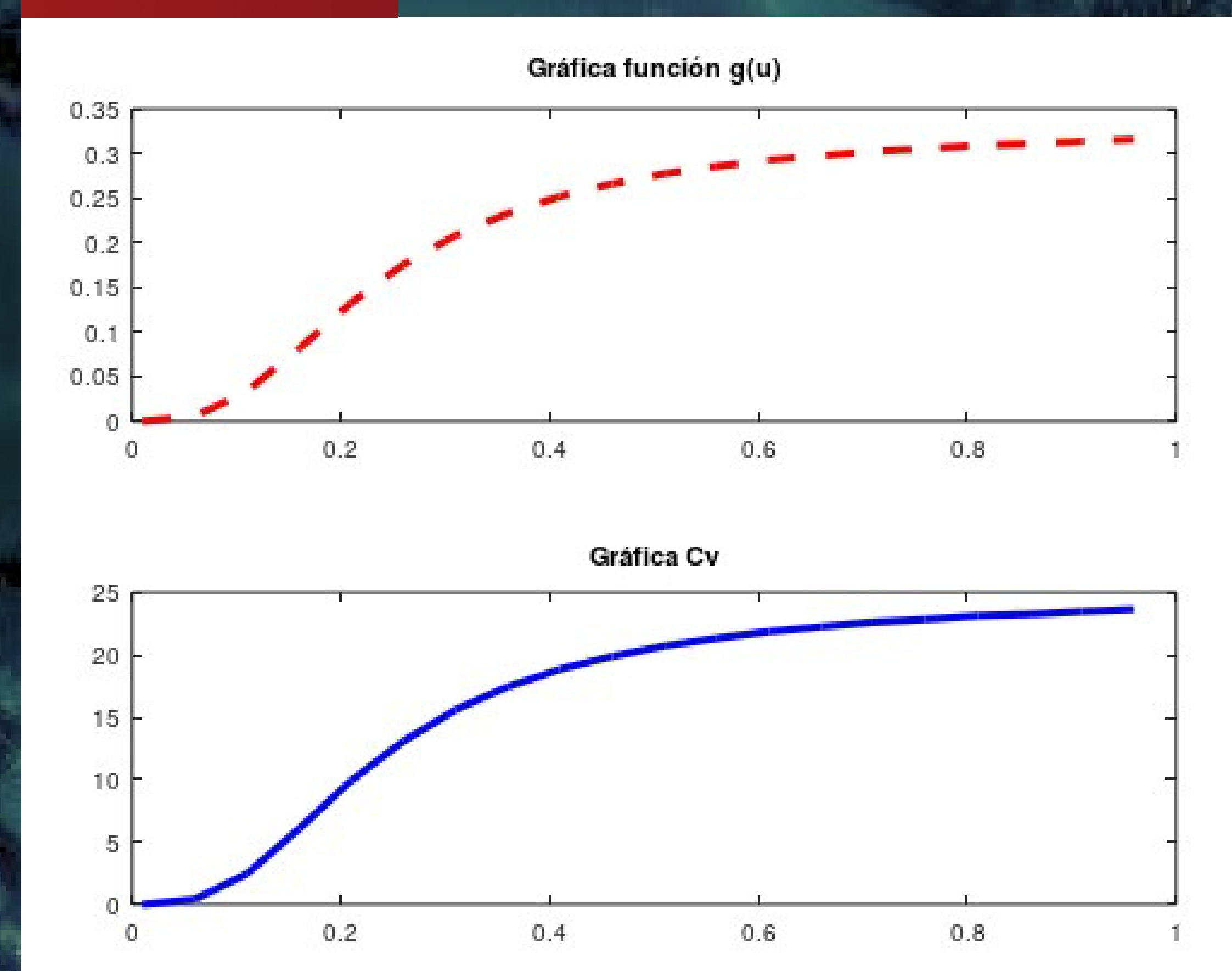
Código Octave

```
function gu=DebyeFormula
K=1.380649e-23;
N=6.023e23;
u=(0.01:0.05:1);
b=[1./u];
a=[(0.01)*ones(1,20)];
m=linspace(300,2000,20);
n=flip(m);
h=(b-a)/(2*n);
f=@(x)((x.^4).*exp(x))./(exp(x)-1).^2;
gu=ones(20,1);
for k=1:20
x=linspace(a(k),b(k),(2*n(k)+1));
s1=sum(f(x)(2:2:(2*n(k)))));
s2=sum(f(x)(3:2:2*n(k)-1));
gu(k)=(f(a(k))+f(b(k))+(4*s1)+(2*s2))*(h(k)/3).*(u(k).^3);
endfor
% formula capacidad Calorifica de Debye
Cv=9*N*K*gu;
% Crear una ventana de visualizacion
dividida en 2 filas y 1 columna
subplot(2, 1, 1); % Primera area
plot(u, gu, 'r--', 'LineWidth', 2);
title('Gráfica función g(u)');
subplot(2, 1, 2); % Segunda area
plot(u, Cv, 'b', 'LineWidth', 2);
title('Gráfica Cv');
endfunction
```



Peter Debye premio nobel de Química 1936

Gráficas



Curva universal de sólidos

2.5976e-05
5.6094e-03
3.2912e-02
8.1469e-02
1.3260e-01
1.7532e-01
2.0842e-01
2.3304e-01
2.5191e-01
2.6582e-01
2.7705e-01
2.8523e-01
2.9241e-01
2.9739e-01
3.0233e-01
3.0533e-01
3.0902e-01
3.1063e-01
3.1366e-01
3.1593e-01

1.9440e-03
4.1982e-01
2.4632e+00
6.0972e+00
9.9236e+00
1.3121e+01
1.5599e+01
1.7441e+01
1.8853e+01
1.9894e+01
2.0734e+01
2.1347e+01
2.1884e+01
2.2257e+01
2.2627e+01
2.2851e+01
2.3127e+01
2.3248e+01
2.3475e+01
2.3644e+01

Referencias:

- Libretexts. (2021). Debye Model For Specific Heat. Engineering LibreTexts. [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials_Science/Supplemental_Modules_\(Materials_Science\)/Electronic_Properties/Debye_Model_For_Specific_H](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials_Science/Supplemental_Modules_(Materials_Science)/Electronic_Properties/Debye_Model_For_Specific_H)