

Entregable 3

Física del Estado Sólido

29 de febrero de 2024

Capacidad calorífica molar del diamante

C. V. Raman (Premio Nobel de Física en 1930) ha analizado la capacidad calorífica del diamante entre 0 y 1000 K, para lo que ha recopilado los datos experimentales obtenidos por diferentes investigadores [véase C. V. Raman, Proc. Indian Acad. Sci. **46**, 323 (1957)]. El archivo `datos.dat` contiene dos columnas con los datos publicados en el artículo citado. La primera columna corresponde a la temperatura T medida en K mientras que la segunda columna presenta la capacidad calorífica molar C_v expresada en cal/mol K.

El objetivo del trabajo que se propone a continuación es comprobar la fiabilidad del modelo de Debye para ajustar los resultados experimentales en todo el rango de temperatura.

1. Utilice la ley T^3 de Debye, esto es $C_v = 234R(T/\Theta)^3$, para ajustar los valores de C_v a baja temperatura ($T < 35$ K) y obtenga la temperatura de Debye Θ . Compruebe que el valor obtenido es similar a los presentados en la tabla 2 del artículo publicado por J. E. Desnoyers y J. A. Morrison en Phil. Mag. **3**, 42 (1958).
2. Utilice la temperatura de Debye obtenida en el apartado anterior para determinar la capacidad calorífica molar en todo el rango de temperatura ($0 < T \leq 1000$ K) a partir del modelo de Debye

$$C_v = 9R \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

La integral debe resolverse por medio de métodos numéricos. Se recomienda el uso del algún programa para hacerlo (**Maple**, **Mathematica**).

3. Compare los resultados obtenidos en el apartado anterior con los valores experimentales. Compruebe que el ajuste, particularmente a temperaturas por encima de ambiente, no es muy bueno. Sin embargo, reduciendo el valor de Θ , el ajuste a alta temperatura mejora sensiblemente. A la vista de esto, analice y discuta lo que se afirma en el artículo de Desnoyers y Morrison antes mencionado en relación con la figura 1.