

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ЭЛЕМЕНТЫ ТЕРМОДИНАМИКИ ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ ОДНОАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ В ПРИБЛИЖЕНИИ БЛИЖНИХ И ВТОРЫХ СОСЕДЕЙ.

Рожков А.А., Сыркин Е.С.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков*

Следует отметить, что особый интерес представляет определение плотности состояний в ООЦ в приближении ближних соседей и с учетом вторых соседей. В приближении ближних соседей плотность состояний имеет две особенности при $\omega = 0$, $\omega = \omega_m$ и минимум строго посередине.

Степень влияния вторых соседей зависит от соотношения между силовыми константами взаимодействия. При $\left| \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \right| < \frac{1}{4}$ зависимость будет, как и в случае ближних соседей, иметь две особенности на границах зоны Бриллюэна, но в то же время распределение между границами будет несимметричным и будет зависеть также от знака $\frac{\alpha_2}{\alpha_1}$. Минимум для положительного отношения силовых констант сместится в область низких частот и займет более низкое положение чем в случае ближних соседей.

Сама кривая распределения приобретает несимметричный вид. Таким образом влияние вторых соседей оказывает влияние на распределение по частотам даже в случае не сильных связей вторых соседей.

Другой важный вопрос связан с явлениями теплопередачи в цепочках. Его удобно рассмотреть на примере теплоемкости. Было получено выражение для теплоемкости одноатомной цепочки в приближениях ближних и вторых соседей в модели, предложенной Хортоном и Шиффом. В этой модели термодинамические функции записываются через плотность состояний.

Получена температурная зависимость теплоемкости. В случае $h\omega \ll kT$ первое слагаемое в теплоемкости содержит линейную зависимость от температуры. То есть результат отличается от обычных кристаллов когда теплоемкость зависит от куба температуры.

Получено выражение для теплоемкости в приближениях ближних и дальних соседей. В целом разложение по малому параметру содержит нечетные степени по температуре.