

รวมอยู่ ✓
✓ ของสมุดบันทึก ตามวิเทศ
ม.๗๐ จ. ๓๗๑๗
13/ก.๒/๒๗ .

539.6
๗ ๒๑๗๑
๓ ๓

คลังเครื่องดนตรีและอินทรีลดทอนไม่ได้สำหรับแบบจำลองไอซิ่ง

บนเฟซ เช่น เครื่องวิเทศ

ปริญญาโท

ของ

วัลลภ กุลทรัพย์ดี

๑๖ ต.ค ๒๕๖๖.

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประธาเมตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต,

สิงหาคม ๒๕๒๗

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

173995

กัลส เตอร์อินทิกรัลและอินทิกรัลลทอนไม่ได้สำหรับแบบจำลองไอซิ่ง
บนเฟซเช่น เตอร์คิวบิก ลททิฟ

บทคัดย่อ
ของ
วัลลภ กุลทีรณย์เมธี

เสนอต่อมหาวิทยาลัยเกริก รินทร์วิโรฯ ประสานมิตร
เพื่อ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต
สิงหาคม 2527

แกนอ็อกทาร์ทิซันฟังก์ชันสำหรับแบบจำลองไอย์นงเขตติช-กาย สามารถพิจารณาเฉพาะอินติกรานต์ซึ่งเป็นผลรวมของผลคูณฟังก์ชันความถี่ของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่เกิดจากกลศาสตร์โมเลกุล ผลของอันตรกิริยาในแต่ละระดับควอร์เรชันแทนได้ด้วยแบบจำลองแผนภาพ อินติกรัลลดทอนไม่ได้ β_1 , β_2 และ β_3 สามารถหาได้จากกรวยแบบจำลองแผนภาพลดทอนไม่ได้ด้วยอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลของกลศาสตร์ 2 - 4 โมเลกุลกว่าของกลศาสตร์อินติกรัลสามารถหาได้จากความสัมพันธ์ของฟังก์ชัน

$$b_\ell = \frac{1}{\ell^2} \sum_{n_k} \prod_k \frac{(\ell \beta_k)^{n_k}}{n_k!}$$

$$\sum_{k=1}^{\ell-1} k n_k = \ell - 1$$

CLUSTER INTEGRAL AND IRREDUCIBLE INTEGRAL
ON FACE-CENTERED CUBIC LATTICE
FOR ISING MODEL

AN ABSTRACT

BY

WALLOP KULHIRUNMANEE

Presented in partial fulfillment of the requirements

for the Master of Education degree

at Srinakharinwirot University

August 1984


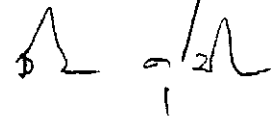
Canonical partition function for Ising lattice gas model can be considered specifically by its integrand which is the sum of product of potential strength function depicting interaction between molecules in the cluster. Resulting interaction in each cluster can then be replaced by diagram model. Irreducible integrals β_1 , β_2 and β_3 can be determined by the expansion of irreducible diagram model with interaction between clusters of 2 - 4 molecules. The value of cluster integral can be found from equation

$$b_\ell = \frac{1}{\ell^2} \sum_{n_k} \prod_k \frac{(\ell \beta_k)^{n_k}}{n_k!}$$

$$\sum_{k=1}^{\ell-1} k n_k = \ell - 1$$

คณะกรรมการที่ปรึกษาประจำตัวนิสิตและคณะกรรมการสอบ ได้พิจารณาปฏิญานพนธ์
ฉบับนี้แล้ว เห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาคณะนักศึกษาคณะศึกษาศาสตร์
ของมหาวิทยาลัยเร็นจิรินทรวิโรฒได้

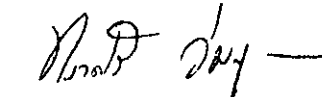
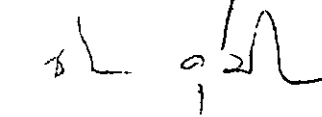
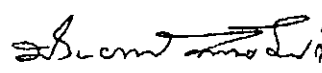
คณะกรรมการที่ปรึกษา

ประธาน

กรรมการ

คณะกรรมการสอบ

ประธาน

กรรมการ

กรรมการ

ประกาศกฤษฎีกา

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความช่วยเหลือในการถ่ายทอดความรู้ กำแนะนำ และการตรวจแก้ไข จากผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ทรงกรี วิมลวิชัย ประธานกรรมการที่ปรึกษา และรองศาสตราจารย์ ดร. ชัยวัฒน์ กุประตกุล กรรมการที่ปรึกษา ผู้วิจัยรู้สึกซาบซึ้งและขอกราบขอบพระคุณในความเมตตาของท่านอาจารย์ทั้งสองที่มีต่อผู้วิจัยเป็นอย่างสูง

ขอกราบขอบพระคุณรองศาสตราจารย์ ดร. ประยงค์ พงษ์ทองเจริญ ที่ให้ความช่วยเหลือและแนะนำอย่างดียิ่ง








ขอบูชาในพระพุทธคุณ ธรรมคุณ สังฆคุณ กับเตี้ยและแม่ที่เป็นสิ่งที่ให้และสร้างวิถีทางการดำเนินชีวิตของผู้วิจัย




วัลลภ กุลศิริวัฒน์

สารบัญ

บทที่

หน้า

1	บทนำ	1
	ความมุ่งหมายของการวิจัย	11
	ความสำคัญของการวิจัย	11
	ขอบเขตของการวิจัย	11
	ข้อตกลงเบื้องต้น	12
	กำหนดนิยามศัพท์เฉพาะ	12
2	ทฤษฎีและเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	16
	แบบจำลองไอซิง	16
	พลังงานของแบบจำลองไอซิง	16
	แคนอนนิคัลพาร์ติชันฟังก์ชันและการกระจายภาคอิสระ	17
	สมการสำหรับคลัสเตอร์อินทิกรัลในเทอมของอินทิกรัลสองมิติ \mathcal{Z}_k	22
	จำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซเซตเตอร์กิวบิคแลตทิซ	32
3	วิธีดำเนินการ	35
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้	35
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพ 	39
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพ 	40
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพ 	41
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพ 	44
	การกระจายแบบจำลองแผนภาพ 	48
	ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้	51
	ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ 	52
	ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ 	52

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ		53
ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ		53
ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ		54
การคำนวณหาค่าของอินติกรัลสองชั้นไม่ได้และค่าอีเกนแวลูของอินติกรัล		55

4 ผลการวิจัย	56
อินติกรัลสองชั้นไม่ได้สามอันดับแรก	56
ค่าอีเกนแวลูของอินติกรัลอันดับ สอง สาม และสี่	57
การวิเคราะห์ค่าของอินติกรัลสองชั้นไม่ได้และอินติกรัลสองชั้นไม่ได้	59

5 บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ	62
บทย่อ	62
ความมุ่งหมายของการวิจัย	62
เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย	62
วิธีดำเนินการ	62
การวิเคราะห์ผล	63
สรุปผลการวิจัย	63
อภิปรายผลการวิจัย	63
ข้อเสนอแนะในการวิจัย	68

บรรณานุกรม	70
ภาคผนวก	73

บัญชีตาราง

ตาราง

หน้า

1. แสดงความสัมพันธ์ของค่าเอกซ์โปเนนซ์ของจุดวิกฤตกับค่าต่าง ๆ ที่พิจารณาในระบบของเหลว-ก๊าซ และระบบแม่เหล็กเมื่อ $T > T_C$ และ $T < T_C$ 8
2. อินทิกรัลลทอนไม่ได้สามอันดับแรก เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดตามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน 60
3. คลัสเตอร์อินทิกรัลอันดับที่สอง สาม และสี่ เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดตามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน 61
4. แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของอนุกรมความหนาแน่นที่แตกต่างกันจากการเปรียบเทียบผลการวิจัยของซาร์เรเจอร์ กับ บุญเรือง เจริญทรัพย์ 67

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ	หน้า
1. ภาพแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับอุณหภูมิ T ของเฟสทั้งสามของสารกึ่ง ของแข็ง ของเหลว และก๊าซ	2
2. กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับความหนาแน่น ρ ของเฟสของของเหลวและก๊าซ ที่สถานะอุณหภูมิมีค่าต่าง ๆ กัน บริเวณอุณหภูมิวิกฤต	2
3. กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่น ρ กับอุณหภูมิ T ของเฟสของของเหลว และแก๊ส	3
4. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิ T กับสนามแม่เหล็ก H ของระบบแม่เหล็ก	5
5. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าสภาพความเป็นแม่เหล็ก M กับสนามแม่เหล็ก H ของระบบแม่เหล็ก และภาพตัดขวางไอโซเทอร์มอลของพื้นผิว MHT ที่โปรเจกชันบนระนาบ n^{th}	5
6. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิ T กับค่าสภาพความเป็นแม่เหล็ก M	6
7. กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความถี่ของค่าเฉลี่ยปริมาตรคงที่กับอุณหภูมิ	9
8. เฟสของไดอะแกรมสถานะ	13
9. แสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดที่จุดเริ่มต้นแรกในแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาซซิงเกิลเฟส บนไดอะแกรมในสามมิติ	13
10.(a) แบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนได้ของกาส์เตอร์โมเลกุลที่มีจำนวนโมเลกุลในกลุ่มเป็น 3 และ 4 โมเลกุลตามลำดับ	14
10 (b) แบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ของกาส์เตอร์โมเลกุลที่มีจำนวนโมเลกุลในกลุ่มเป็น 2 - 4 โมเลกุลตามลำดับ	14

11. แสดงความสัมพันธ์ของเส้นกราฟระหว่าง $V(r_{1j})$; r_{1j} กับ
ระยะห่างระหว่างคู่อิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกัน $|r_1 - r_j|$. 19

12. แสดงจำลองแผนภาพของระบบโมเลกุลที่ประกอบด้วยอิเล็กตรอนต่าง ๆ . 20

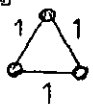
13. แสดงแผนภาพของอิเล็กตรอน 3 โมเลกุล ที่สามารถจัดรูปแบบได้
แตกต่างกัน 4 วิธี 21

14. แผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ 10 แบบที่เป็นองค์ประกอบของ β_3 25

15. การขยับแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ของอิเล็กตรอน 4 โมเลกุลที่ประกอบด้วย
4 บอนด์ 29

16. การขยับแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ของอิเล็กตรอน 4 โมเลกุลที่ประกอบด้วย
5 บอนด์ 29

17. แสดงการขยับแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ของอิเล็กตรอน 2 - 4 โมเลกุล
ที่มีองค์ประกอบของ E_0 (เส้นประ) รวมอยู่ด้วย แผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ .. 30-31

18. แสดงวิธีคำนวณหาจำนวนวิธีที่แผนภาพ  สามารถบรรจุ
ลงในเฟสเช่น เฟอร์มิออนและโบซอน 34

19. แสดงลักษณะแบบจำลองแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ 8 แบบของค่า β_4 66

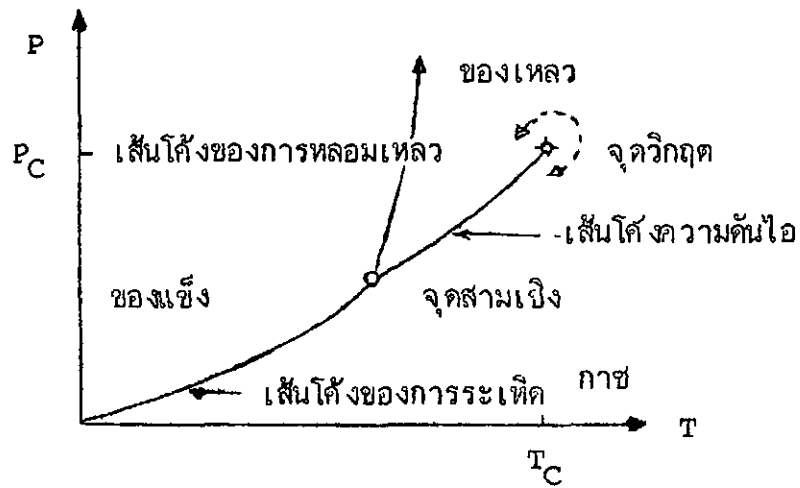
/

บทที่ 1

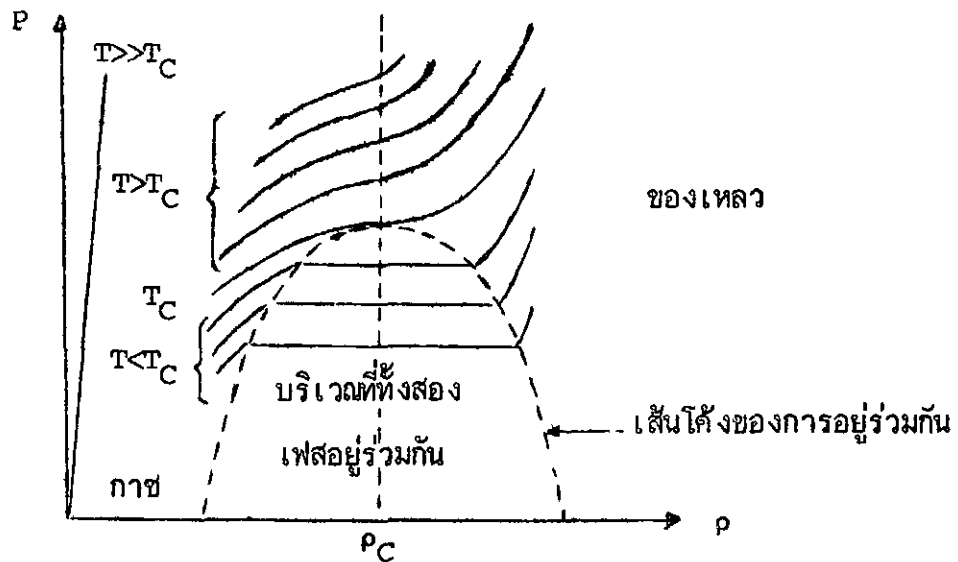
บทนำ

นักวิทยาศาสตร์ได้สังเกตพฤติกรรมวิกฤต (critical behaviour) และการเปลี่ยนเฟส (phase transition) ของระบบของไหล (fluid system) และระบบแม่เหล็ก (magnetic system) มานานมากกว่าร้อยปี ในขณะที่ลักษณะวิกฤตการณ์บางอย่างของระบบเพิ่งถูกค้นพบในระยะไม่กี่ปีมานี้เอง จากสิ่งดังกล่าวทำให้สามารถแบ่งปรากฏการณ์วิกฤต (critical phenomena) ได้เป็นสองยุค คือ ยุคเก่า (classical era) ที่เกี่ยวข้องกับปรากฏการณ์ของระบบ ณ บริเวณวิกฤตยุคใหม่ (modern era) ที่ศึกษาค่าเอกซ์โปเนนต์ (exponent) ของระบบ ณ บริเวณวิกฤต

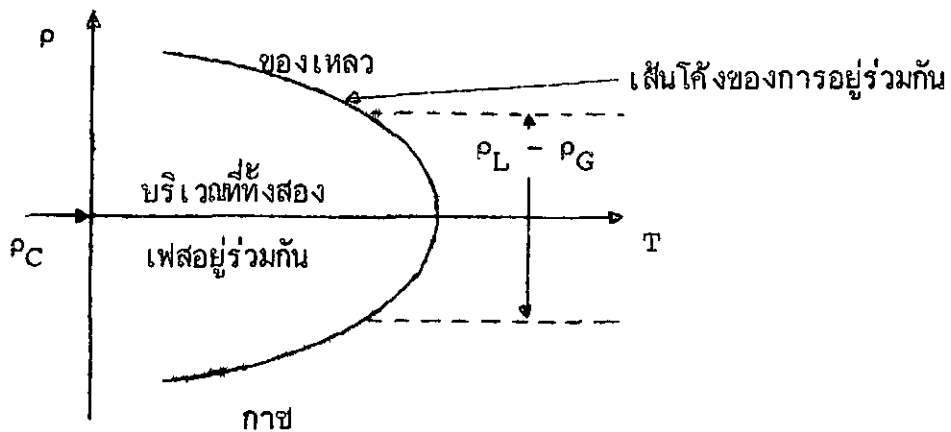
การศึกษาระบบของไหลหรือระบบของเหลว-ก๊าซ (liquid-gas system) เป็นการพิจารณาสมการสถานะ (equation of state) ของระบบซึ่งมีรูปแบบสมการเขียนได้เป็น $f(P, \rho, T) = 0$ (Stanley, 1971 : 1) สมการที่ได้จะแสดงความสัมพันธ์ของตัวแปรมหภาคทางอุณหพลศาสตร์ (thermodynamics) คือ ความดัน P ความหนาแน่น ρ และอุณหภูมิ T ตามลำดับ สำหรับพื้นที่ผิวในสเปซ (space) สามมิติที่มีโคออร์ดิเนต (coordinate) P, ρ, T แต่ละจุดบนพื้นผิวจะสอดคล้องกับสถานะสมดุลของระบบตามสมการสถานะ เพื่อสะดวกในการพิจารณาค้นผิว P, ρ, T จะอาศัยการโปรเจก (projection) พื้นผิวลงบนระนาบของ $PT, P\rho$ และ ρT ดังแสดงในภาพประกอบ 1, 2 และ 3



ภาพประกอบ 1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับอุณหภูมิ T ของเฟสทั้งสามของสสาร คือ ของแข็ง ของเหลว และก๊าซ



ภาพประกอบ 2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับความหนาแน่น ρ ของเฟสของของเหลวและก๊าซ ที่สถานะอุณหภูมิมีค่ามากกว่าอุณหภูมิวิกฤต, เท่ากับอุณหภูมิวิกฤต และน้อยกว่าอุณหภูมิวิกฤต



ภาพประกอบ 3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่น ρ กับอุณหภูมิ T ของเฟสของของเหลว และก๊าซ

จากภาพประกอบ 1 การโปรเจกของพื้นผิว $p\rho T$ ลงบนระนาบ PT จะมีผลทำให้เกิดการแบ่งแยกเฟส (phase) ของสารออกเป็นสามส่วน คือ ของแข็ง ของเหลว และก๊าซ เฟสของของแข็งและก๊าซจะอยู่ในสถานะสมดุลตามแนวเส้นโค้งของการระเหิด (sublimation curve) เฟสของของแข็งและของเหลวจะอยู่ในสถานะสมดุลตามแนวเส้นโค้งของการหลอมเหลว (fusion curve) และเฟสของของเหลวและก๊าซจะอยู่ในสถานะสมดุลตามแนวเส้นโค้งความดันไอ (vapour-pressure curve) แต่ละจุดบนเส้นโค้งทั้งสามนี้จะแสดงสถานะสมดุลที่เฟสสองเฟสหรือมากกว่าสองเฟสสามารถพบกันได้ เราเรียกจุดซึ่งสถานะทั้งสามมาพบกันว่าจุดสามเชิง (triple point) และจากภาพประกอบ 1 นี้เราพบว่าเส้นโค้งความดันไอจะสิ้นสุดที่จุด ๆ หนึ่งและเรียกจุดนี้ว่าจุดวิกฤต (critical point) ตำแหน่งจุดวิกฤตของระบบของเหลว-ก๊าซจะมีค่าความดันเป็นความดันวิกฤต P_C (critical pressure) อุณหภูมิวิกฤต T_C (critical temperature) และความหนาแน่นเป็นความหนาแน่นวิกฤต ρ_C (critical density) ณ จุดวิกฤตนี้ของเหลวสามารถเปลี่ยนเป็นก๊าซหรือก๊าซเปลี่ยนเป็นของเหลวได้อย่างต่อเนื่องโดยไม่ต้องผ่านเส้นการเปลี่ยนแปลงเฟสระหว่างของเหลวและก๊าซ ดังแสดงด้วยเส้นประหรืออาจจะกล่าวได้ว่า ณ จุดวิกฤตนี้จะไม่มีความแตกต่างระหว่างเฟสของระบบของเหลวและก๊าซ ส่วนเส้นโค้งของการหลอมเหลวจะไม่สิ้นสุดที่จุดใดจุดหนึ่ง

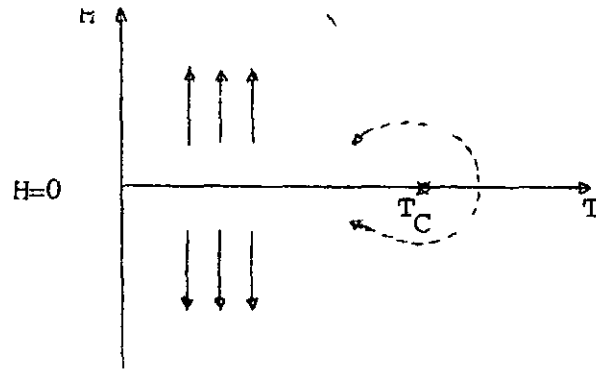
จากภาพประกอบ 2 และ 3 พบว่าช่วงบริเวณที่อุณหภูมิต่ำกว่าอุณหภูมิวิกฤตมาก ๆ ความแตกต่างระหว่างความหนาแน่นของของเหลว (ρ_L) และก๊าซ (ρ_G) จะมีค่ามากและมีค่าลดลงเรื่อย ๆ เมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น และมีค่าเป็นศูนย์เมื่ออุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิวิกฤต ผลต่างของความหนาแน่น $\rho_L - \rho_G$ เป็นพารามิเตอร์เชิงระเบียบ (order parameter) สำหรับจุดวิกฤตของระบบของเหลว-ก๊าซ

ลักษณะที่สำคัญแบบหนึ่งของภาพประกอบ 2 ก็คือลักษณะของเส้นกราฟไอโซเทอร์ม (isotherm) ที่อุณหภูมิสูงมาก ๆ กฎของก๊าซอุดมคติยังคงใช้ได้ เนื่องจากเส้นกราฟไอโซเทอร์มมีลักษณะเป็นเส้นตรงและให้ผลเป็นไปตามสมการสถานะของก๊าซอุดมคติคือ $p = \frac{\rho k_B T}{m}$ เมื่อ k_B เป็นค่าคงตัวของโบลต์ซมาน (Boltzmann constant) และ m เป็นค่ามวลของก๊าซหนึ่งโมเลกุล ขณะเมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้จุดอุณหภูมิวิกฤตลักษณะของเส้นกราฟไอโซเทอร์มจะเปลี่ยนแปลงซึ่งเป็นผลมาจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล (molecular interaction) ของระบบของเหลว-ก๊าซ การแสดงผลในสถานการณ์ที่เกิดขึ้นเช่นนี้สามารถศึกษาได้จากการใช้แบบจำลองแลตทิซ-ก๊าซ (lattice-gas model)

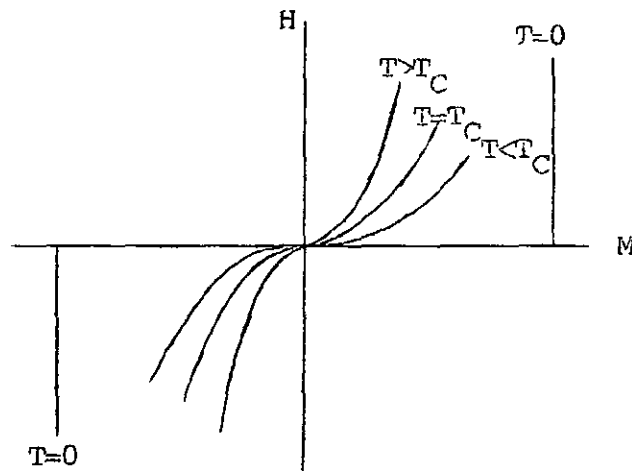
ในปี ค.ศ. 1869 แอนดรูว์ (Andrews) ค้นพบปรากฏการณ์วิกฤตของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ จากการทดลอง โดยอาศัยแบบจำลองของแลตทิซ-ก๊าซ หลังจากนั้นในปี ค.ศ. 1872 แวน เดอร์ วอลส์ (Van der Waals) ได้เสนอวิทยานิพนธ์ปริญญาเอกเกี่ยวกับทฤษฎีการอธิบายบริเวณวิกฤต (critical region) และเรียกทฤษฎีนี้ว่า "ทฤษฎี แวน เดอร์ วอลส์ ของการเปลี่ยนแปลงเฟสของของเหลว-ก๊าซ" (Stanley 1971 : 7)

การศึกษาระบบแม่เหล็กจะมีลักษณะคล้ายคลึงกับระบบของเหลว-ก๊าซและสามารถเปรียบเทียบได้ระหว่างการเปลี่ยนสถานะของแม่เหล็กกับการเปลี่ยนสถานะของของเหลว-ก๊าซ เช่น ความหนาแน่นของระบบของเหลว-ก๊าซสามารถทำให้มีค่าเพิ่มขึ้นได้โดยการเพิ่มความดันให้แก่ระบบ และถ้าให้สนามแม่เหล็ก H กับระบบแม่เหล็กเฟอร์โร (ferro-magnetic system) ก่าสภาพความเป็นแม่เหล็ก M (magnetization) จะเพิ่มสูงขึ้นเช่นกัน ดังนั้นค่าของ H จะเปรียบเทียบได้กับค่าของ p และ M เปรียบเทียบได้กับ ρ สำหรับพื้นผิวสมดุล $p-pT$ ของ

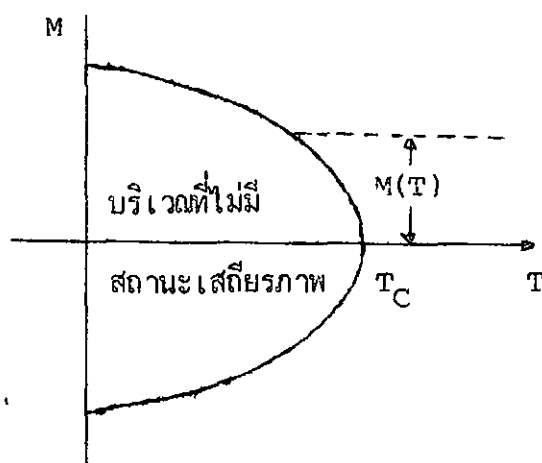
ระบบของเหลว-ก๊าซจะสอดคล้องกับพื้นผิวสมดุล HMT ของระบบแม่เหล็ก ความสัมพันธ์ของ H, M, T , สำหรับระบบแม่เหล็กจะเป็นไปตามภาพประกอบ 4, 5 และ 6 ตามลำดับ



ภาพประกอบ 4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิ T กับสนามแม่เหล็ก H ของระบบแม่เหล็ก



ภาพประกอบ 5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าสภาวะความเป็นแม่เหล็ก M กับสนามแม่เหล็ก H ของระบบแม่เหล็กและภาพตัดขวางไอโซเทอร์มของพื้นผิว HMT ที่โปรเจกลงบนระนาบ HM



ภาพประกอบ 6 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิ T กับค่าสภาพความเป็นแม่เหล็ก M

ความเจริญก้าวหน้าทางด้านวิชาการในช่วงต้นของศตวรรษที่ 20 เป็นผลให้เกิดความเข้าใจในการเปลี่ยนแปลงสภาพแม่เหล็ก ซึ่งเป็นไปตามแนวคิดของ แวน เดอร์ วอลล์ และในปี ค.ศ. 1907 เพียร์ วีสส์ (Pierre Weiss) ได้เสนอทฤษฎีเกี่ยวกับสภาพความเป็นแม่เหล็กเฟอร์โร (ferromagnetism) โดยอาศัยผลจากการสร้างแบบจำลองโมเลกุลสรุปได้ว่าโมเมนต์แม่เหล็ก (magnetic moment) มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกันในสนามโมเลกุลจะเป็นสัดส่วนกับค่าเฉลี่ยของสภาพความเป็นแม่เหล็ก (Stanley 1971 : 8)

แบบจำลองโมเลกุลที่ถูกสร้างเพื่ออธิบายอันตรกิริยาเนื่องจากโมเมนต์แม่เหล็กจำนวนมากถูกเสนอเผยแพร่ แบบจำลองเหล่านี้มีแนวความคิดสรุปได้ว่า โมเมนต์แม่เหล็กจะถูกวางในตำแหน่งที่แน่นอนบนแลตทิซไซต์ (lattice site) และจะมีอันตรกิริยากับโมเมนต์แม่เหล็กที่อยู่ใกล้เคียง ค่าพลังงานที่ได้จะมีค่าสูงสุดเท่ากับ $-J$ เมื่อโมเมนต์แม่เหล็กทั้งสองมีทิศทางแบบเดียวกันและเท่ากับ J เมื่อโมเมนต์แม่เหล็กทั้งสองมีทิศทางแบบตรงกันข้าม แบบจำลองที่น่าสนใจเป็นพิเศษในปัจจุบันมีอยู่สองแบบ คือ แบบจำลองของวิลเฮล์ม เลนซ์ (Wilhelm Lenz) ซึ่งเรียกว่าแบบจำลองไอซิง (Ising model) โมเมนต์แม่เหล็กของแบบจำลองชนิดนี้มีการวางตัวได้เพียงสองทิศทางในหนึ่งมิติ คือ ทิศทางขึ้น $|↑|$ และทิศทางลง $|↓|$ แบบจำลองแบบที่สองเป็นแบบจำลองไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg model) โดย

พิจารณาโมเมนต์แม่เหล็กและเปรียบเทียบกับกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics) ของส่วนประกอบทั้งสามของตัวดำเนินการสปิน (three - component spin operators) และสรุปว่า พลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างโมเมนต์แม่เหล็กเป็นส่วนหนึ่งของผลคูณสเกลาร์ (scalar product) ของตัวดำเนินการสปินทั้งสาม ถึงแม้ว่าแบบจำลองไวส์ (Weiss model) จะง่ายในการแก้ปัญหาเกี่ยวกับระบบแม่เหล็กก็ตามแต่ทั้งแบบจำลองไวส์ แบบจำลองไอซิง และแบบจำลองไฮเซนเบิร์กก็ยังให้ผลลัพธ์ที่ไม่แน่นอนสำหรับแบบจำลองเฮลทซ์-กาชชนิดสามมิติ

การศึกษาและพัฒนาเกี่ยวกับปรากฏการณ์วิกฤตได้เริ่มอย่างจริงจังในปี ค.ศ. 1940 โดยกักเกนเฮม (Guggenheim) ค้นพบว่าเส้นโค้งของการอยู่ร่วมกัน (coexistence curve) ดังแสดงในภาพประกอบ 2 และ 3 ของระบบของเหลว-กาชไม่เป็นรูปพาราโบลา (parabola) (Stanley 1971 . 9) และผลจากการพิจารณาแบบจำลองไอซิง เฮลทซ์-กาชชนิดสองมิติของ ออนซาเกอร์ (Onsager. 1944 : 117) ในปี ค.ศ. 1944 เมื่อไม่พิจารณาผลจากสนามแม่เหล็กภายนอก พบว่าค่าความร้อเฉพาะที่ปริมาตรคงที่เมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤตมีค่าเป็นอนันต์ ในปี ค.ศ. 1952 แยงและลี (Yang and Lee 1952 . 404) ได้เสนอทฤษฎีการเป็นแม่เหล็กและไม่เป็นแม่เหล็กโดยใช้แบบจำลองเฮลทซ์-กาชที่มีลักษณะไม่ต่อเนื่อง พบว่ากราฟของความสัมพันธ์กับความหนาแน่นของระบบของเหลว-กาชจะคล้ายคลึงกับกราฟของสภาพความเป็นแม่เหล็กกับสนามแม่เหล็กของระบบแม่เหล็กดังแสดงในภาพประกอบ 2 และ 5 ประมาณต้นปี ค.ศ. 1960 เฮลเลอร์ เบเนดิก และ เจครอต (Heller, Benedek and Jacrot) ได้เสนอว่าค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุดวิกฤต (the critical-point exponents) ที่มีอยู่ประกอบด้วย α , β และ γ เป็นส่วนสำคัญในการนำไปสู่ความถูกต้องของการพิจารณาเฉพาะที่ต้องการของระบบ (Stanley 1971 . 9) เช่น ค่าพารามิเตอร์เชิงระเบียบจะแปรเปลี่ยนตามค่าของ $(-e)^\beta$ ซึ่ง $e = \frac{T-T_c}{T}$ และ β เป็นค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุดวิกฤตที่คำนวณจากค่าสภาพความเป็นแม่เหล็ก (Stanley 1971 : 11)

สัญลักษณ์ที่ใช้ของค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุดวิกฤตจะขึ้นกับอุณหภูมิของระบบซึ่ง α' , β , γ' จะใช้ในกรณีของ $T < T_c$ และ α , γ จะใช้ในกรณีของ $T > T_c$ ค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุดวิกฤตที่กล่าวถึงนี้จะมีความสัมพันธ์กับค่าต่าง ๆ ของระบบที่ล เรนตามตาราง 1

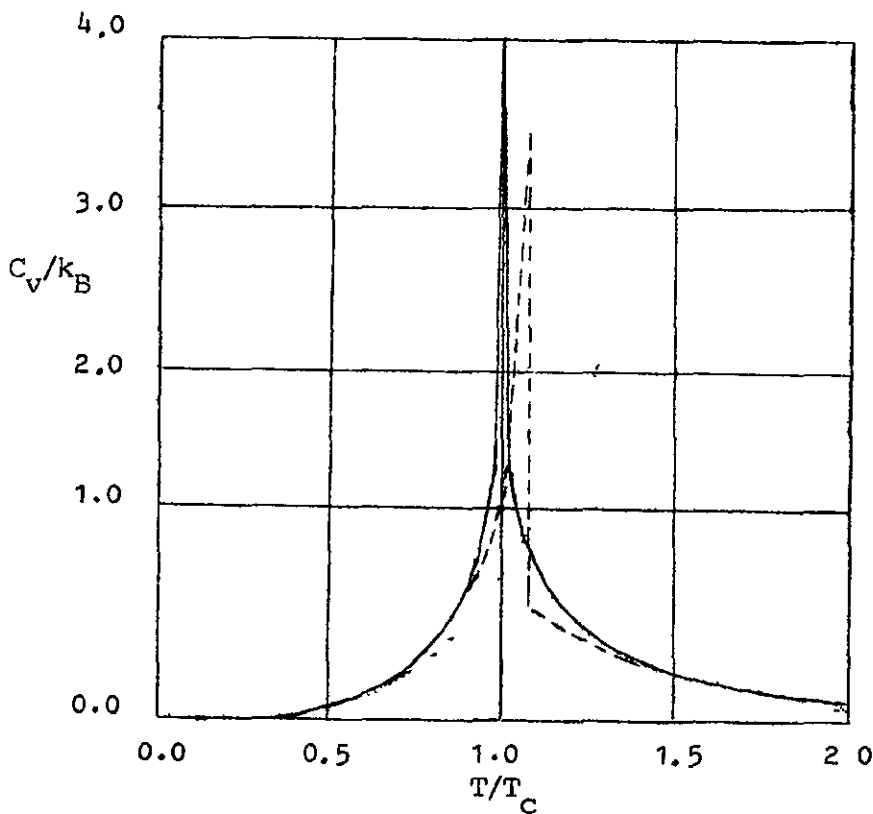
ตาราง 1 แสดงความสัมพันธ์ของค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุดวิกฤตกับค่าต่าง ๆ ที่พิจารณาในระบบของเหลว-ก๊าซและระบบแม่เหล็กเมื่อ $T > T_c$ และ $T < T_c$

สถานะภาพ	$\alpha'; \epsilon$	β	γ', ν	ϵ
ระบบ	$C_{V=\nu} \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$	$\rho_L - \rho_G \sim (-\epsilon)^\beta$	$K_T \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$	< 0
ของเหลว-ก๊าซ	$C_{V=\nu} \sim \epsilon^{-\alpha}$	—	$K_T \sim \epsilon^{-\gamma}$	> 0
ระบบ	$C_{H=0} \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$	$M_{H=0} \sim (-\epsilon)^\beta$	$K_T \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$	< 0
แม่เหล็ก	$C_{H=0} \sim \epsilon^{-\alpha}$	—	$K_T \sim \epsilon^{-\gamma}$	> 0

จากการใช้แบบจำลองไอซิงแลตทิซ-การชนีสองมิติของอนซาเกอร์ โดยพิจารณาฟังก์ชันพาร์ทิชันฟังก์ชัน (partition function) ที่สนามแม่เหล็ก $H = 0$ มีข้อบกพร่องที่ไม่สามารถหาค่าเอกซ์โปเนนต์ β , γ และ γ' โดยตรงได้ (Stanley, 1971 : 16) ค่าที่คำนวณได้จากการใช้แบบจำลองไอซิงแลตทิซ-การชนีสองมิติซึ่งอาจผิดพลาดในตาราง 1 ไม่สอดคล้องกับผลการทดลองในระบบของเหลว-ก๊าซ สำหรับแบบจำลองไอซิงบนบอร์นและแบบจำลองทรงกลม (spherical model) ที่สามารถใช้อธิบายปรากฏการณ์วิกฤตได้ แต่ก็มีข้อบกพร่องเช่นเดียวกับแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-การชนีสองมิติ

ปัจจุบันยังไม่มีวิธีการใด ๆ ที่จะแก้ปัญหานี้แบบจำลองไอซิงแลตทิซ-การชนีสองมิติที่อุณหภูมิเข้าใกล้จุดวิกฤตเพื่อให้ได้คำตอบที่แน่นอน โดยทั่วไปการแก้ปัญหานี้เริ่มจากการกระจายอนุกรมของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ (calmole' free energy) และใช้วิธีการประมาณแบบต่าง ๆ เกี่ยวกับวิกฤต ในปี ค.ศ. 1960 (คอมบ) ได้แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่างความเร็วนำพาที่ประมาณได้กับอุณหภูมิของระบบของเหลว-ก๊าซ

โดยใช้การประมาณค่าแบบ เบทเท (Bethe approximation) และแบบक्रमเมอร์-แวนเนียร์ และกิกูจิ (Kramers-Wannier and Kikuchi approximation) และเปรียบเทียบกับ กราฟที่ได้จากผลการคำนวณที่แน่นอนของค่าความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่ของออนซาเกอร์ใน สองมิติพบว่ากราฟที่ได้จากผลทั้งสามกรณีมีความแตกต่างกัน (Stanley. 1971 : 15) ดังแสดงในภาพประกอบ 7



ภาพประกอบ 7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่กับอุณหภูมิ เมื่อ

- _____ แสดงผลการคำนวณของออนซาเกอร์
- แสดงผลการคำนวณโดยใช้วิธีการประมาณค่าแบบक्रमเมอร์-แวนเนียร์และกิกูจิ
- แสดงผลการคำนวณโดยใช้วิธีการประมาณค่าแบบเบทเท

แฟร์เรล และ เมเจอร์ (Farrell and Meijer, 1972 : 3747) ได้ใช้วิธีการประมาณค่าแบบพาเด (Pade' approximation) เพื่อหาค่าเอกซ์โปเนนต์ของจุด

วิกฤตของสภาพอึดตัวได้ของระบบของเหลว-ก๊าซ และสมมาตร ชิคญาติ (สมมาตร ชิคญาติ. 2525 : 70) ใช้วิธีการประมาณค่าแบบเอกซ์ตราโพล (extrapolate approximation) เพื่อหาค่าวิกฤตของอนุกรมความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่

การศึกษาแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซในสามมิติ จะต้องพิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแลตทิซไซต์และสามารถกำหนดลักษณะของอันตรกิริยาได้สองลักษณะ คือ มีค่าขนาดความแรงของอันตรกิริยาเท่ากันทุกอันดับที่มีระยะห่างระหว่างโมเลกุลแตกต่างกัน กับมีค่าแตกต่างกันโดยขนาดความแรงลดลงเมื่อระยะห่างระหว่างโมเลกุลมีค่าเพิ่มมากขึ้น มอริคา และ ฮิโรเกะ (Morita and Hiroike. 1961 : 537) กันแฟร์เรล และ เมเออร์ (Farrell and Meijer. 1972 : 3747) ได้พิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสี่อันดับแรกมีค่าขนาดความแรงของอันตรกิริยาแตกต่างกัน คอมม์ และ ดาลตัน (Domb and Dalton. 1966 : 859) กับ ดาลตัน และ วูด (Dalton and Wood. 1969 : 1271) ได้กำหนดให้ขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีค่าขนาดความแรงของอันตรกิริยาเท่ากันทุกอันดับ

ในการหาผลลัพธ์ของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแลตทิซไซต์ จะใช้วิธีการกระจายคลัสเตอร์ (cluster expansion) ของโมเลกุลผลที่ได้สามารถแสดงค่าของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซโดยมีอุณหภูมิและความหนาแน่นเป็นตัวแปร เมเออร์ แฟร์เรล และ ซอมเมอร์เฟลด์ (Meijer, Farrell and Sommerfeldt 1972 : 114) ใช้วิธีการกระจายคลัสเตอร์กับอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล เพื่อหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์จากแบบจำลองของก๊าซชนิดบอดี เซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (body-centered cubic lattice) และได้สัมประสิทธิ์ของอุณหภูมิเป็นฟังก์ชันโพลิโนเมียล (polynomial function) ของความหนาแน่น ซุลลิแวน (Sullivan. 1970 : 94) ใช้วิธีการกระจายคลัสเตอร์หาค่าสภาพอึดตัวได้ใกล้จุดวิกฤตของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซชนิดซิมเปิลคิวบิก (simple cubic lattice)

คลัสเตอร์โมเลกุลหนึ่ง ๆ จะมีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในคลัสเตอร์ซึ่งอาจจะมีขนาดความแรงของอันตรกิริยาแตกต่างกันได้ การแสดงคลัสเตอร์โมเลกุลในแต่ละลักษณะจะ

ขึ้นกับจำนวนบอนด์ (bond) ภายในโมเลกุล และสามารถใช้แบบจำลองแผนภาพ (diagram model) แทนลักษณะเฉพาะของกลศาสตร์โมเลกุล

โดยผลจากแบบจำลองแผนภาพ ผู้วิจัยมีความประสงค์ที่จะศึกษาแผนภาพของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในกลศาสตร์โมเลกุลสำหรับแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาชชนิดเฟส เช่น เตอร์ทิวิคในสามมิติ โดยใช้ผลการคำนวณหาจำนวนวิธีที่แผนภาพต่าง ๆ ตามบรรทัดในเสตคซ์ไฮด์ของทรงเรขาคณิตสามมิติ (Vimolvanich, 1973 : 66) มาช่วยในการวิเคราะห์แผนภาพ ซึ่งจะให้ผลลัพธ์เป็นค่าของกลศาสตร์อินทิกรัล (cluster integral) และค่าของอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ (irreducible integral)

ความมุ่งหมายของการวิจัย

เพื่อคำนวณหาค่าของกลศาสตร์อินทิกรัล และอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาชชนิดเฟส เช่น เตอร์ทิวิคในสามมิติ เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดทั้งสามอันคัมมีค่าเท่ากับ

ความสำคัญของการวิจัย

ค่าของกลศาสตร์อินทิกรัล หรืออินทิกรัลลดทอนไม่ได้นี้ เป็นองค์ประกอบสำคัญที่สามารถนำไปใช้เพื่อการคำนวณหาค่าของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์โดยวิธีภาคพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ ทำให้เราสามารถศึกษาคุณสมบัติและพฤติกรรมต่าง ๆ ทางอุณหพลศาสตร์ของระบบของเหลว-กาช ณ บริเวณวิกฤตได้

ขอบเขตของการวิจัย

1. การวิจัยครั้งนี้ใช้แบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาชชนิดเฟส เช่น เตอร์ทิวิคในสามมิติ เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทุกอันคัมมีค่าความแรงเท่ากัน และไม่พิจารณาผลเนื่องจากสนามแม่เหล็กภายนอก

2. แสดงค่ากลศาสตร์อินทิกรัล b_2 , b_3 และ b_4 กับอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ β_1 , β_2 และ β_3 เมื่อพิจารณาจาก

2.1 F.C.C. (1,0,0) เป็นผลจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับแรกบนเฟซเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

2.2 F.C.C. (1,1,0) เป็นผลจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสองอันดับแรกบนเฟซเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

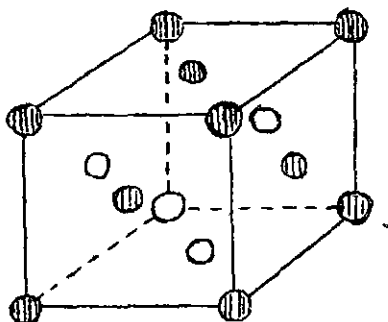
2.3 F.C.C. (1,1,1) เป็นผลจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกบนเฟซเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

ข้อตกลงเบื้องต้น

1. การคำนวณค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัลและอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาซชนิดเฟซเช่นเตอร์คิวบิกในสามมิติ จะใช้แบบจำลองแผนภาพคลัสเตอร์โมเลกุลเพื่อการกระจายค่าของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแลตทิซเตอร์ที่มีจำนวนโมเลกุล 2 ถึง 4 โมเลกุล
2. ใช้ผลการคำนวณหาจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซของ ทรงสี่เหลี่ยมฉาบ

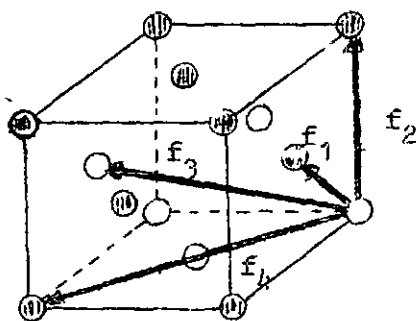
คำนิยามศัพท์เฉพาะ

1. แบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาซ (Ising lattice - gas model) เป็นแบบจำลองของกาซชนิดหนึ่งที่ใช้อธิบายการเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร ในกรณีที่อยู่เหนืออุณหภูมิของระบบที่พิจารณาต่ำกว่าอุณหภูมิคูรี (Curie temperature) สปินของแต่ละโมเลกุลจะมีการวางตัวในตำแหน่งและทิศทางที่แน่นอนบนแลตทิซโดยแต่ละเวกเตอร์สปินสามารถวางตัวได้สองลักษณะ คือ สปินในทิศทางขึ้นและสปินในทิศทางลง โมเลกุลต่าง ๆ ที่อยู่บนแลตทิซ-กาซจะมีอันตรกิริยาระหว่างกัน
2. เฟซเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซ (face - centered cubic lattice) เป็นแลตทิซที่มีโครงสร้างเป็นแบบลูกบาศก์ที่มีด้านทุกด้านยาวเท่ากัน และมีโมเลกุลวางอยู่ในตำแหน่งต่าง ๆ ของมุมและจุดกึ่งกลางของผิวแต่ละด้านบนแลตทิซดังกล่าวประกอบ 8



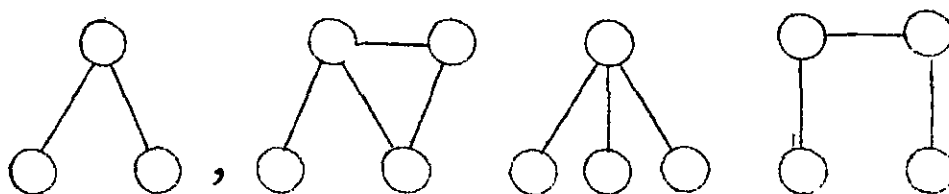
ภาพประกอบ 8 เฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ

3. อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสี่อันดับแรก (first four nearest neighbour molecular interaction) ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซชนิดเฟสเซนเตอร์คิวบิกในสามมิติ เป็นอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในเฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซที่มีระยะห่างเป็น 1 , $1/\sqrt{2}$ และ $\sqrt{2}$ เท่าของความยาวแต่ละด้านของคิวบิกตามลำดับ ดังแสดงในภาพประกอบ 9

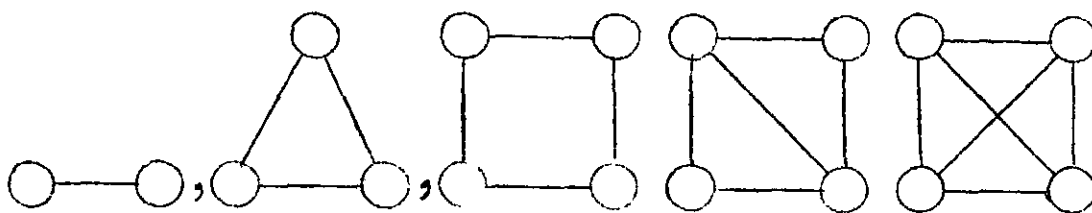


ภาพประกอบ 9 แสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสี่อันดับแรกในแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซชนิดเฟสเซนเตอร์คิวบิกในสามมิติ f_1 , f_2 , f_3 และ f_4 แทนความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับที่หนึ่ง, สอง, สาม, และสี่ตามลำดับ

4. แบบจำลองแผนภาพ (diagram model) เป็นแผนภาพที่ใช้แทนลักษณะของ คลัสเตอร์โมเลกุลที่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกันในกลุ่มโมเลกุล โดยการกำหนดวงกลมใช้แทนโมเลกุล และเส้นเชื่อมต่อระหว่างวงกลมใช้แทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล ลักษณะของแบบจำลอง แผนภาพสามารถแบ่งได้เป็นสองลักษณะ คือ แบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนได้ (reducible diagram model) และแบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ (irreducible diagram model) ดังแสดงในภาพประกอบ 10



ภาพประกอบ 10(a) แบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนได้ของคลัสเตอร์โมเลกุลที่มีจำนวนโมเลกุล ในกลุ่มเป็น 3 และ 4 โมเลกุลตามลำดับ



ภาพประกอบ 10(b) แบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ของคลัสเตอร์โมเลกุล ที่มีจำนวน โมเลกุลในกลุ่มเป็น 2, 3, และ 4 โมเลกุลตามลำดับ

5. คลัสเตอร์อินทิกรัล (cluster integral) เป็นค่าผลลัพท์จากอันตรกิริยา ระหว่างโมเลกุลในคลัสเตอร์ ซึ่งแต่ละโมเลกุลมีการปะทะกันด้วยอันตรกิริยาระหว่าง โมเลกุลในลักษณะของแบบจำลองแผนภาพต่าง ๆ แบ่งได้เป็นสอง ลักษณะ คือ แผนภาพที่ลดทอน ได้และลดทอนไม่ได้ ทำให้ค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัลสามารถแสดงแทนได้ด้วยผลรวมของแบบ จำลองแผนภาพสำหรับคลัสเตอร์หนึ่ง ๆ ที่ประกอบไปด้วย n โมเลกุล

6. อินทิกรัลลดทอนไม่ได้ (irreducible integral) เป็นค่าผลลัพธ์จาก
อินตกริยาระหว่างโมเลกุลในคลัสเตอร์เฉพาะส่วนที่โมเลกุลมีอินตกริยาภายในคลัสเตอร์
เป็นลักษณะแบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ และสามารถแสดงค่าของอินทิกรัลลดทอนไม่ได้
ด้วยผลรวมของแบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้สำหรับคลัสเตอร์หนึ่ง ๆ ที่ประกอบด้วย
 $k + 1$ โมเลกุล

ทฤษฎีและเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

แบบจำลองไอซิง (The Ising model)

ปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์ของโซลิตสเทท (Solid state) เฉพาะส่วนของสารแม่เหล็กเฟอร์โร สปินของอะตอมจะถูกโพลาไรซ์ (polarized) ให้อยู่ในทิศทางเดียวกันและให้ผลในการแสดงอำนาจสนามแม่เหล็กเมื่อพิจารณาแบบระบบมหภาค ลักษณะเช่นนี้เกิดขึ้นเมื่ออุณหภูมิของระบบมีค่าต่ำกว่าอุณหภูมิคูรี ถ้าอุณหภูมิมีค่าสูงกว่าอุณหภูมิคูรีมาก ๆ การจัดเรียงตัวของสปินจะสูญเสียความเป็นระเบียบทำให้ค่าความเป็นแม่เหล็กของระบบสูญเสียไปด้วย (Huang, 1963 : 329)

แบบจำลองไอซิงเป็นการกำหนดรูปแบบของระบบที่เป็นไปได้สำหรับโครงสร้างทางกายภาพของสารแม่เหล็กเฟอร์โร ระบบที่พิจารณาชั้นนี้ประกอบด้วยแนวของจุดที่ถูกกำหนดตำแหน่งแน่นอน N จุดเรียกว่า แลตทิซไซต์ แลตทิซไซต์กล่าวถึงนี้อาจจะมีโครงสร้างทางเรขาคณิตเป็นลูกบาศก์หรือรูปทรงหกด้าน เป็นต้น แต่ละแลตทิซไซต์จะมีสปินที่แปรเปลี่ยนได้เป็น S_i ($i = 1, 2, \dots, N$) ค่าของสปินนี้อาจจะมีค่าเป็น $+1$ หรือ -1 เท่านั้นโดยไม่มีค่าแปรเปลี่ยนเป็นอย่างอื่น ถ้า $S_i = +1$ แสดงว่าแลตทิซไซต์ที่ i มีสปินชี้ขึ้น (spin up) และถ้า $S_i = -1$ สปินจะชี้ลง (spin down)

พลังงานของแบบจำลองไอซิง (energy of Ising model)

จากแบบจำลองไอซิงถ้าให้เซตของจำนวน $\{S_i\}$ เป็นลักษณะเฉพาะคอนฟิกูเรชัน (configuration) ของระบบทั้งหมดที่สปินในแลตทิซไซต์มีอันตรกิริยาระหว่างกัน พลังงานของระบบ (Huang, 1963 : 330) ในลักษณะเฉพาะที่ถูกกำหนดคอนฟิกูเรชันโดย S_i จะมีค่าในสนามแม่เหล็กภายนอก B เป็น

$$E_I \{S_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i \quad \dots (1)$$

$E_I \left\{ S_i \right\}$	คือพลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซ
J_{ij}	คือพลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล i และ j กรณีของระบบที่ทุกค่าของ J_{ij} มีค่าเท่ากันเป็น J จะได้ว่า เมื่อ $J > 0$ ระบบจะมีสภาพเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร และถ้า $J < 0$ ระบบจะมีสภาพต้านทานการเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร (antiferromagnetism)
$S_i S_j$	คืออันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุล i และ j มีค่าเป็น $+1$ เมื่อสปินมีทิศทางแบบเดียวกัน $ \uparrow\uparrow$ และเท่ากับ -1 เมื่อสปินมีทิศทางแบบตรงกันข้าม $ \uparrow\downarrow$
$\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j$	คือพลังงานรวมทั้งหมดเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างสปินของทุกโมเลกุล i และ j
$B \sum_{i=1}^N S_i$	คือพลังงานรวมทั้งหมดของสปินของโมเลกุลเนื่องจากสนามแม่เหล็กภายนอก B

สัญลักษณ์ I เป็นส่วนย่อยของ Ising และ $\langle ij \rangle$ จะแทนคู่ของแต่ละสปินที่มีอันตรกิริยาที่อยู่ใกล้กันมากที่สุด โดยที่ $\langle ij \rangle$ กับ $\langle ji \rangle$ จะไม่แตกต่างกัน ดังนั้นผลรวมตลอดของ $\langle ij \rangle$ จะมีอยู่ $\frac{N}{2}$ เทอม เมื่อ γ เป็นจำนวนของตำแหน่งโมเลกุลใด ๆ ที่วางอยู่ใกล้กันมากที่สุด เช่น $\gamma = 12$ สำหรับคูโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับแรกในเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซใน 3 มิติ

ในกรณีสนามแม่เหล็กภายนอกมีค่าเป็นศูนย์ พลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซสามารถเขียนได้เป็น

$$E_I \left\{ S_i \right\}_{B=0} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad \dots (2)$$

แคนอนัลพัรติชันฟังก์ชันและการกระจายคลัสเตอร์ (canonical partition function and cluster expansion)

โดยการเริ่มจากพลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-ก๊าซ แคนอนัลพัรติชันฟังก์ชันของแบบจำลองไอซิง (Huang, 1963 : 330) ที่มีจำนวนสปินของโมเลกุล N สปินสามารถ

เขียนได้เป็น

$$Q_I(N, T) = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} \exp \left[-\beta E_I \{S_1\} \right] \quad \dots (3)$$

ซึ่ง $\beta = \frac{1}{k_B T}$

แกนอิลิตฟาริตซ์ฟังก์ชันสามารถนำไปสู่การกระจายกำลังเคอร์โดยอาศัยผลจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแลตทิซ จากการทำแต่ละสปินมีการวางตัวในทิศทางและตำแหน่งที่แน่นอนทำให้ค่าของพลังงานที่ได้อยู่ในรูปของพลังงานศักย์ และแกนอิลิตฟาริตซ์ฟังก์ชันที่ได้จะขึ้นกับตำแหน่งของระบบอนุภาคในแลตทิซ-กาซจำนวน N อนุภาคที่มีโคออร์ดิเนตเป็น $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ อนุภาคแต่ละอนุภาคที่พิจารณาโคออร์ดิเนต $r = 1, 2, \dots, L$ เมื่อ L เป็นจำนวนทั้งหมดของตำแหน่งแลตทิซ ในกรณีของระบบอนุภาคที่เหมือนกัน N อนุภาคซึ่งอยู่ในโดเมน (domain) Ω และมีปริมาตร $V = V(\Omega)$ แกนอิลิตฟาริตซ์ฟังก์ชันของแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาซจะมีรูปสมการเป็น

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \sum_{r_1=1}^L \dots \sum_{r_N=1}^L \exp \left[-\beta V(q) \right] \quad \dots (4)$$

ซึ่ง $V(q)$ คือพลังงานศักย์ของระบบอนุภาคที่ขึ้นกับระยะห่างระหว่างโมเลกุลที่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกัน

สำหรับระบบอนุภาค N โมเลกุลจะมีจำนวนโมเลกุลที่แตกต่างกันอยู่ทั้งหมด $\frac{N(N-1)}{2}$ คู่ ค่าของพลังงานศักย์ของระบบจึงเป็นค่าผลรวมของคู่โมเลกุลที่แตกต่างกัน $\frac{N(N-1)}{2}$ เทอมดังนี้

$$V(q) = \sum_{1>j}^N \sum_{j=1}^{N-1} V(r_{1j}) \quad \dots (5)$$

เมื่อ $V(r_{1j})$ หรือ $V(r_1 - r_j)$ คือพลังงานศักย์ของคู่โมเลกุล 1 และ j

ซึ่งอยู่ห่างกันเป็นระยะ r_{1j} หรือ $r_1 - r_j$

สมการ (4) สามารถกำหนดในเทอมของ $V(r_{1j})$ ได้เป็น

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \prod_{r_1=1}^L \prod_{r_N=1}^L \exp \left[- \sum_{1>j}^M \sum_{j=1}^{N-1} \beta V(r_{1j}) \right] \dots (6)$$

จากกฎเกณฑ์ทางคณิตศาสตร์ของค่าเอกซ์โปเนนเชียล (exponential) จะใช้

$$\exp \left[- \sum_{1>j}^M \sum_{j=1}^{N-1} \beta V(r_{1j}) \right] = \prod_{N \geq 1 > j \geq 1} \exp \left[- \beta V(r_{1j}) \right] \dots (7)$$

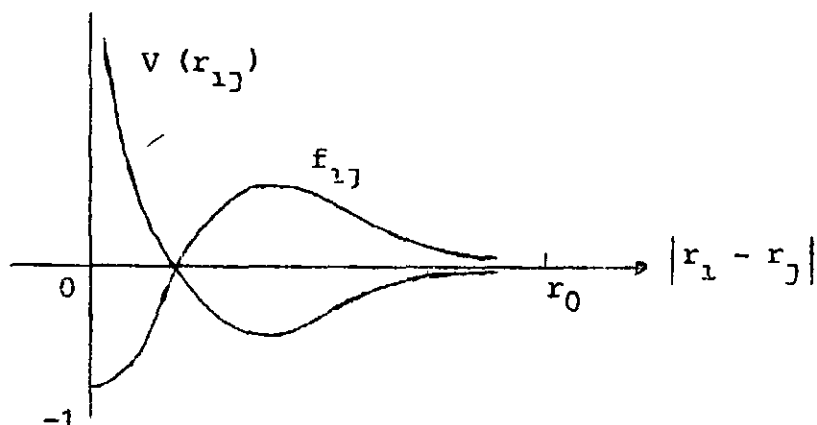
เราสามารถกำหนดความสัมพันธ์ระหว่างค่าเอกซ์โปเนนเชียลของ $-\beta V(r_{1j})$ กับค่าฟังก์ชันความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล (Mayer and Mayer, 1940 : 264)

ได้เป็น

$$\exp \left[- \beta V(r_{1j}) \right] = 1 + f_{1j} \dots (8)$$

ซึ่ง f_{1j} คือฟังก์ชันของความแรงของอันตรกิริยาระหว่างคู่มอเลกุล 1 และ j จากสมการ

(8) ฮวง (Huang, 1963 : 298) ได้แสดงความสัมพันธ์ในรูปของกราฟ ดังภาพประกอบ 11




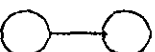
ภาพประกอบ 11 แสดงความสัมพันธ์ของเส้นกราฟระหว่าง $v(r_{1j})$; f_{1j} และระยะห่างระหว่างคู่มอเลกุลที่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกัน $|r_1 - r_j|$

โดยใช้ผลของสมการ (8) และ (7) บนอนัลลพาร์ติชันฟังก์ชันสามารถเขียนในเทอมของ f_{1j} ได้เป็น

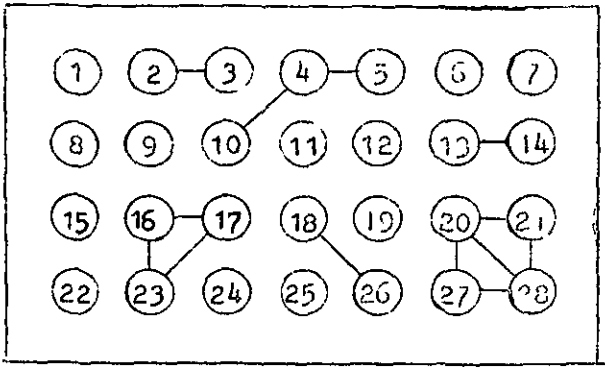
$$Q(N, \epsilon) = \frac{1}{N!} \iint \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_N \prod_{1 \leq i < j \leq N} (1 + \epsilon_{ij}) \dots \quad (9)$$

ผลคูณ $\prod_{1 \leq i < j \leq N} (1 + \epsilon_{ij})$ สามารถกระจายได้เป็น

$$\prod_{1 \leq i < j \leq N} (1 + \epsilon_{ij}) = 1 + \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_{ij} + \sum_{\langle ij \rangle, \langle i'j' \rangle} \epsilon_{ij} \epsilon_{i'j'} + \dots \quad (10)$$

จะเห็นได้ว่าสมการ (10) ด้านขวามือแต่ละเทอมเป็นผลรวมฟังก์ชันของความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลภายในกลุ่มทรอคลีสเตอร์ เมเยอร์และเฮเยอร์ (Mayer and Mayer, 1940 : 278) ได้แสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในภาคีเตอร์โดยใช้แบบจำลองแผนภาพซึ่งกำหนดวงกลมแทนโมเลกุลและเส้นเชื่อมหรือระวางวงกลมแทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล ดังนั้นทุก ๆ เทอมของผลรวมในสมการ (10) จะสามารถแสดงแทนได้ด้วยแบบจำลองแผนภาพที่สอดคล้องกับแต่ละเทอม เช่น เทอมแรกทางขวามือเป็น 1 หมายถึงไม่มีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล และแบบจำลองแผนภาพที่ใช่ทีละจะเป็นเพียงวงกลม  ส่วนเทอมที่สองสามารถใช้แบบจำลองแผนภาพ  แสดงแทนได้

โดยการศึกษาระบบโมเลกุลที่ประกอบด้วยกัณธเตอร์ต่าง ๆ จากแบบจำลองแผนภาพดังกล่าวประกอบ 12



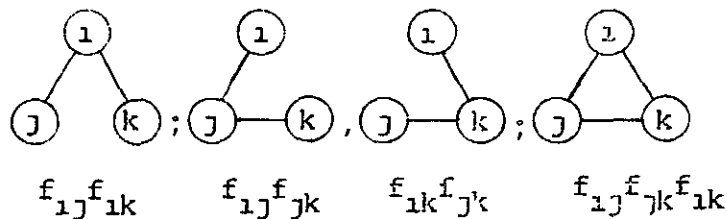
ภาพประกอบ 12 แบบจำลองแผนภาพของระบบโมเลกุลที่ประกอบด้วยกัณธเตอร์ต่าง ๆ

โมเลกุลใด ๆ ที่ไม่ได้ถูกยึดด้วยเส้นเชื่อมระหว่างวงกลมจะไม่ใช่สมาชิกของกัณธเตอร์นั้นหรืออาจกล่าวได้ว่าแต่ละโมเลกุลจะเป็นส่วนหนึ่งของกัณธเตอร์หนึ่ง ๆ ดังนั้นกัณธเตอร์แบบ

ที่ง่ายที่สุดเป็นคลัสเตอร์ของโงเลกุลเดี่ยวจะมีทั้งสิ้น 12 กัวเอนอร์ ประกอบด้วยวงกลม
ที่ 1, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 15, 19, 22, 24, และ 25

คลัสเตอร์ที่ประกอบด้วย 2 โงเลกุลจะมีอันตรกิริยาซึ่งกันและกันเป็นคู่โงเลกุล
จะไม่เชื่อมต่อกับโงเลกุลอื่นโดยที่อันตรกิริยาระหว่างโงเลกุลกำหนดไว้จะว่า f_{ij} สำหรับ
โงเลกุลตัวที่ i และ j จากภาพประกอบ 12 จะมีคลัสเตอร์ของโงเลกุลอยู่ 3 คลัสเตอร์
คือ (2,3) , (13,14) , และ (18,26)

คลัสเตอร์ของสามโงเลกุลที่ประกอบด้วยโงเลกุล i , j และ k สามารถจัดรูป
แผนภาพคลัสเตอร์ที่แตกต่างกันได้ 4 วิธี ดังแสดงในภาพประกอบ 13



ภาพประกอบ 13 แสดงแผนภาพของคลัสเตอร์ 3 โงเลกุลที่สามารถจัดรูปแบบได้แตกต่างกัน
4 วิธี

สาขาวิธีแรกเป็นแผนภาพที่สามารถลดทอนได้ และวิธีสี่เป็นแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ จากภาพ -
ประกอบ 12 จะมีคลัสเตอร์ของสามโงเลกุลอยู่ 2 คลัสเตอร์ คือ (4,5,10) และ
(16,17,23)

สำหรับคลัสเตอร์ที่ประกอบด้วยโงเลกุลจำนวนมากขึ้นแบบจำลองแผนภาพของคลัสเตอร์
สำหรับกรณีนี้จะเป็นผลมาจากการรวมลักษณะแบบจำลองของแผนภาพของกัวเอนอร์สองและสาม
โงเลกุลเข้าด้วยกันหลายลักษณะ

การอินทิเกรตซึ่งให้ผลเป็นค่าอินทิกรัล (integral) และทุก ๆ ค่าอินทิกรัลทั่ว
บริเวณโงเลกุลซึ่งอยู่ในคลัสเตอร์ที่ต่างกันของลักษณะกัวเอนอร์แบบหนึ่งจะเป็นอิสระจากกัน
โดยเหตุที่ทุก ๆ คลัสเตอร์เหล่านี้จะขึ้นอยู่กับส่วนของอินทิกรานด์ (Integrand) ที่ประกอบ

ด้วยฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นกับโคออร์ดิเนตของสองโมเลกุลในคลัสเตอร์ที่ต่างกัน ค่าอินทิกรัลของคลัสเตอร์หนึ่ง ๆ ที่ได้จะเป็นผลลัพธ์ของทุกค่าอินทิกรัลทั่วบริเวณโมเลกุลในคลัสเตอร์เดียวกัน ซึ่งเราจะรวมทุก ๆ อินทิกรัลของผลลัพธ์ทั้งหมดที่เกิดขึ้นเมื่อโมเลกุลที่เหมือนกัน ℓ โมเลกุลอยู่ในหนึ่งคลัสเตอร์ และได้กำหนดเป็นคลัสเตอร์อินทิกรัล (cluster integral) b_ℓ หลังจากคูณด้วยองค์ประกอบเงื่อนไขภาวะปกติ (normalization factor) $1/\ell!V$ ทำให้ค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัล b_ℓ มีรูปสมการเป็น

$$b_\ell = \frac{1}{\ell!V} \iiint \dots \int \sum_{\ell \geq 1} \prod_{j \geq 1} f_{1j} d^3r_1 \dots d^3r_\ell \quad \dots (11)$$

หน่วยของ b_ℓ เป็นปริมาตรยกกำลัง $\ell - 1$ และในแต่ละเทอมของผลรวมของ b_ℓ ที่ประกอบด้วยผลคูณของ f_{1j} จะมีจำนวนของ f_{1j} อย่างน้อยที่สุดเป็น $\ell - 1$ บอนด์ และมากที่สุดเป็น $\frac{\ell}{2} (\ell - 1)$ บอนด์ โดยพิจารณาว่าสามส่วนแรกของคลัสเตอร์อินทิกรัลตามสมการ (11) จะได้

$$b_1 = \frac{1}{V} \int d^3r_1 = 1 \quad \dots (12)$$

$$b_2 = \frac{1}{2!V} \iint f_{21} d^3r_2 d^3r_1 \quad \dots (13)$$

$$b_3 = \frac{1}{3!V} \iiint \left(f_{31}f_{21} + f_{32}f_{31} + f_{32}f_{21} + f_{32}f_{31}f_{21} \right) d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 (14)$$

ค่าของ b_1 เป็นหน่วยเอกลักษณ์ (identical unit) ส่วน b_2 เป็นค่าที่เกิดจากคลัสเตอร์ของสองโมเลกุลที่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกัน และ b_3 เป็นค่าที่เกิดจากคลัสเตอร์ของสามโมเลกุล

สมการสำหรับคลัสเตอร์อินทิกรัลในเทอมของอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ β_k

(The Equation for the Cluster Integrals in Terms of Irreducible Integrals β_k)

เมเยอร์และเมเยอร์ (Mayer and Mayer, 1940, 285) ได้พิจารณาผล

ของสมการถัณฑ์อินทิกรัลในเทอมแรกของค่า b_3 จากสมการ (14) คือ

$$\iiint f_{31}f_{21} d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 \quad \dots (15)$$

สมการ (15) เป็นการอินทิเกรตที่เกี่ยวข้องกับโคออร์ดิเนตของอนุภาคทั้งสามซึ่งโคออร์ดิเนตของอนุภาคตัวที่สามจะเกี่ยวข้องกับอินทิกรานต์ในสมการ (15) เพียงเท่า f_{31} เท่านั้น ลักษณะเช่นนี้แสดงว่าอนุภาคตัวที่สามอยู่ห่างจากอนุภาคตัวที่หนึ่งถึงผิวเบี่ยงอย่างองในการพิจารณาเป็นระยะ r_{31} ดังนั้นการอินทิเกรตชั้นหัวสเปซของ d^3r_3 สามารถกำหนดผลลัพธ์ให้คือ อินทิกรัลเป็นหลักเตอร์ใหม่ที่เราเรียกว่า อินทิกรัลลดทอนไม่ได้ (irreducible integral) และกำหนดค่าให้เป็น β_1 ซึ่งถือเป็นที่ว่าตัวแปรของอนุกรมอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ β_k มีค่าของสมการเป็น

$$\beta_1 = \int f_{31} d^3r_1 = \int_0^\infty 4\pi r^2 f(r) dr \quad \dots (16)$$

ในทำนองเดียวกันในสมการ (15) การอินทิเกรตชั้นหัวสเปซของ d^3r_2 ก็จะทำให้ผลลัพธ์เป็น β_1 และผลสุดท้ายของการอินทิเกรตชั้นหัวสเปซของ d^3r_1 จะให้ผลลัพธ์เป็นปริมาตร V ดังนั้นสมการ (15) จะมีค่าเป็น

$$\iiint f_{31}f_{21} d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 = V \beta_1^2 \quad \dots (17)$$

จากสมการ (13) และ (16) จะได้ว่า

$$b_2 = \frac{1}{2} \beta_1 \quad \dots (18)$$

จากผลที่ได้พิจารณาสำหรับสามเทอมแรกของ b_3 ในสมการ (14) อาจจะถูกปฏิบัติในแบบอย่างเดียวกันและให้ค่าที่เหมือนกันภายใต้การอินทิเกรต อย่างไรก็ตามผลสุดท้ายของสมการ (14) จะมีค่าที่แตกต่างออกไปและจะถูกใช้ไปโดยสิ่งที่กำหนดค่า β_2 ซึ่งเป็นค่าอันดับสองของอินทิกรัลลดทอนไม่ได้ นั่นคือ

$$\iiint f_{32}f_{31}f_{21} d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 = 2V\beta_2 \quad \dots (19)$$

จากการกำหนดค่าของ β_1 และ β_2 จะได้

$$\beta_3 = \frac{1}{2} \beta_1^2 + \frac{1}{3} \beta_2 \quad \dots (20)$$

อินทิกรัลลทอนไม่ได้ β_k เป็นการกำหนดค่าอินทิกรัลทั่วคอนทิวเร้นส์เปซของอนุภาค $k + 1$ ตัว และโดยใช้ข้อสรุปประกอบเงื่อนไขภาวะปกติ $1/k!V$ คูณในสมการของ β_k โดยที่อินทิกรานต์เป็นผลรวมของผลคูณทั้งหมดของ f_{1j} ของอนุภาค $k + 1$ ตัว ซึ่งไม่สามารถลทอนต่อไปได้ในผลลัพธ์ของอินทิกรัล ความหมายนี้จะต้องสอดคล้องกับรูปที่วงกลมทั้งหมดมีการเชื่อมต่อกันมากกว่าหนึ่งเส้นสำหรับภาคีสเตอร์ที่มีโมเลกุลมากกว่าสองโมเลกุลขึ้นไป จากข้อกำหนดนี้สามารถเขียนสมการทั่วไปของอินทิกรัลลทอนไม่ได้เป็น

$$\beta_k = \frac{1}{k!V} \iint \dots \int \left[\prod_{k+1 \geq i > j \geq 1} f_{1j} \right] d^3r_1 \dots d^3r_{k+1} \quad \dots (21)$$

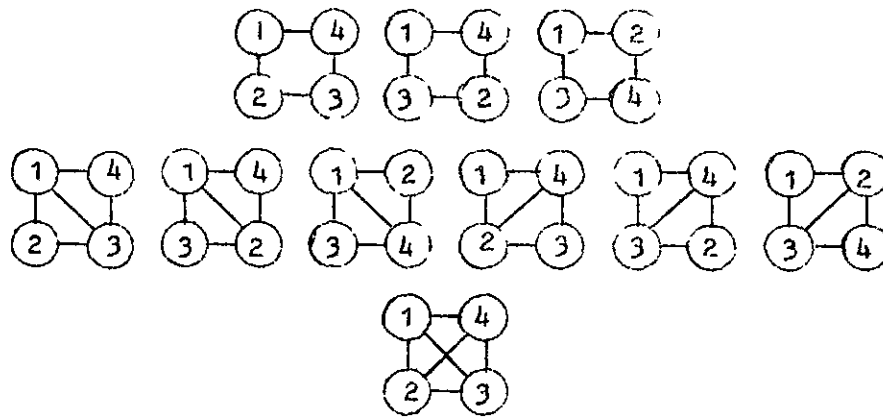
โดยการแสดงสามด้านแรกของอินทิกรัลลทอนไม่ได้

$$\beta_1 = \frac{1}{V} \iint f_{21} d^3r_1 d^3r_2 = \int_0^\infty 4\pi r^2 f(r) dr \quad \dots (22)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{2!V} \iiint f_{32} f_{31} f_{21} d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 \quad \dots (23)$$

$$\beta_3 = \frac{1}{3!V} \iiint \left(3f_{43} f_{32} f_{21} f_{41} + 6f_{43} f_{32} f_{21} f_{41} f_{31} + f_{43} f_{32} f_{21} f_{41} f_{31} f_{42} \right) d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 d^3r_4 \quad \dots (24)$$

ค่าสัมประสิทธิ์ที่เป็นตัวคูณ 3 และ 6 ในสมการ (24) ของ β_3 เกิดจากอนุภาคในภาคีสเตอร์ที่ถูกจำกัดด้วยจำนวนของ f_{1j} มีการสับเปลี่ยนตำแหน่งทำให้สามารถจัดแผนภาพของภาคีสเตอร์ที่พิจารณาได้ 3 และ 6 แบบสำหรับแผนภาพที่ประกอบด้วย f_{1j} จำนวน 4 และ 5 บอนด์ตามลำดับ แต่ละแผนภาพในลักษณะอย่างเดียวกันจะให้ผลลัพธ์ค่าจำนวนเหมือนกันภายใต้การอินทิเกรต ดังภาพประกอบ 14 ซึ่งแสดงแผนภาพ 10 แบบที่ลทอนไม่ได้ของ β_3



ภาพประกอบ 14 แผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้ทั้งหมด 10 แบบที่เป็นอับปรประกอบของ β_3

ทุก ๆ ค่าของลำดับเตอร์อินตีกรัล b_ℓ อาจจะได้แสดงแทนได้ด้วยผลรวมของเทอมที่เป็นอินตีกรัลลัดทอนไม่ได้ ซึ่งแต่ละเทอมเป็นการยกด้วยจำนวนสัมประสิทธิ์กับผลลัพธ์ของกำลังของอินตีกรัล β_k ที่ถูกรวมกัน เช่น

$$b_1 = 1$$

$$b_2 = \frac{1}{2} \beta_1$$

$$b_3 = \frac{1}{2} \beta_1^2 + \frac{1}{3} \beta_2 \tag{25}$$

$$b_4 = \frac{2}{3} \beta_1^3 + \beta_1 \beta_2 + \frac{1}{4} \beta_3$$

จากสมการ (25) กำลังของแต่ละค่าของอินตีกรัลลัดทอนไม่ได้ที่เกิดขึ้นจะถูกกำหนดโดยค่าของ n_k ที่เป็นเลขจำนวนเต็มและ n_k ที่ขึ้นกำหนดโดยสมการ

$$\sum_{k=1}^{\ell-1} kn_k = \ell-1 \tag{26}$$

และระบบจำนวนสัมประสิทธิ์ของเทอม $\prod_k \beta_k^{n_k}$ ใน b_ℓ สามารถที่จะหาได้จาก การตรวจสอบแผนภาพที่เป็นไปได้และสอดคล้องกับเทอมต่าง ๆ ในอินตีกรัลค่าของลำดับเตอร์อินตีกรัล

สำหรับค่า n_k ของ ℓ ค่าสัมประสิทธิ์นี้จะถูกกำหนดตามว่า

$$\frac{1}{\ell^2} \prod_k \frac{\ell^{n_k}}{n_k!}$$

ดังนั้นสมการสำหรับ b_ℓ ในเทอมของ ℓ_k จะมีสมการเป็น

$$b_\ell = \frac{1}{\ell^2} \sum_{n_k} \prod_k \frac{(\ell \ell_k)^{n_k}}{n_k!} \quad \dots (27)$$

$$\sum_k n_k = \ell - 1$$

รายละเอียดของการกระจายสมการ (27) ตามค่าของ ℓ จาก 1 ถึง 4 สามารถให้ผลเป็นไปตามสมการ (25) จะแสดงไว้ในภาคผนวก ๖

จากการพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลของเมเยอร์และเมเยอร์ทำให้เราสามารถที่จะกำหนดแผนภาพแทนอันตรกิริยาในกลศาสตร์โมเลกุลได้ แผนภาพเหล่านี้สามารถแยกออกได้ 2 ชนิดคือ แผนภาพที่ลดทอนได้ (reducible diagram) และแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ (irreducible diagram) โดยแผนภาพที่ลดทอนได้เป็นผลมาจากการแยกส่วนของแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้

ดอมบ์และกรีน (Domb and Green. 1972 . 16) ได้สรุปความสัมพันธ์ระหว่างกลศาสตร์อินทิกรัลกับแบบจำลองแผนภาพ เมื่อ ℓ มีค่าเป็น n ดังนี้

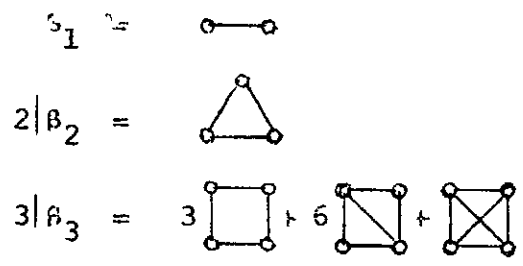
$$b_1(T) = \circ$$

$$2! b_2(T) = \circ - \circ$$

$$3! b_3(T) = 3 \begin{array}{c} \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} \quad \dots (28)$$

$$4! b_4(T) = 12 \begin{array}{c} \circ - \circ \\ | \quad | \\ \circ \quad \circ \end{array} + 4 \begin{array}{c} \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} + 12 \begin{array}{c} \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} - 3 \begin{array}{c} \circ - \circ \\ | \quad | \\ \circ - \circ \end{array} - 6 \begin{array}{c} \circ - \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ - \circ \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array}$$

รายละเอียดของการกระจายแบบจำลองแผนภาพทั้งหมดของ b_2 จะแสดงไว้ในภาคผนวก ก. และจากค่าของ b_2 ที่แสดงโดยแบบจำลองแผนภาพนี้ถ้าพิจารณาเฉพาะในส่วนของแบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ จะวัดความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรลดลงทอนไม่ได้กับแบบจำลองแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ เมื่อพิจารณาเฉพาะค่าของตัวแปรลดลงทอนไม่ได้สามอันกับแรก คือ



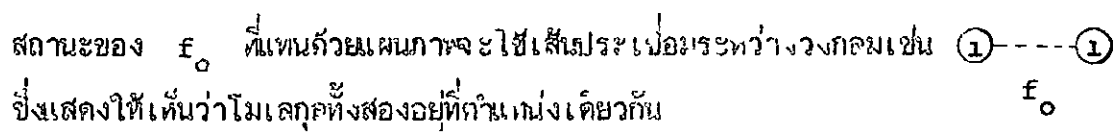
ฟังก์ชันความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลดั้งเดิมการ (8) ของ f_{1j} นี้ ในแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซ-กาซสามารถพิจารณาในลักษณะของส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิและส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ แฟร์เรล มอริตาและเมเจอร์ (Farrell, Morita and Meijer, 1966 . 353) ได้กำหนดไว้

$$V(r_{1j}, s_1 s_j) = -J_{1j} s_1 s_j$$

$$\begin{aligned}
 \text{หรือ} \quad V(r_{1j}) &= \begin{cases} \epsilon & \text{ถ้า } r_1 = r_j \\ 0 & \text{ถ้า } r_1 \neq r_j \end{cases} \dots (30)
 \end{aligned}$$

เมื่อสปีนของระบบที่พิจารณามีทิศทางไปทางเดียวกัน ทั้งในสมการ (30) กรณีของโมเลกุลสองโมเลกุลในแลตทิซ-กาซอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกัน ($r_1 = r_j$) อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งสองจะไม่ขึ้นกับอุณหภูมิและทำให้ f_{1j} ตามสมการ (8) มีค่าเป็น

$$f_{11} = f_0 = -1$$



จากสมการ (8) และ (30) จะได้ว่า

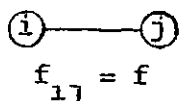
$$\begin{aligned} f_{1j} &= \exp \left[\beta J_{1j} \right] - 1 \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\beta J_{1j})^m}{m!} - 1 \end{aligned}$$

$$\text{หรือ } f_{1j} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta J_{1j})^m}{m!} \quad \dots (31)$$

จากสมการ (31) ฟังก์ชันความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดจะเป็นส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิของระบบเท่านั้น เมื่อ $r_1 \neq r_j$ ถ้าค่าของ f_{1j} ที่พิจารณาจากจุดศูนย์กลางของระยะห่างระหว่างโมเลกุลรวมกันแล้วค่าความแรงของอันตรกิริยาเท่ากัน นั่นคือ $f_{1j} = f$ จะได้ $J_{1j} = J$ ดังนั้น

$$f = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta J)^m}{m!} \quad \dots (32)$$

ค่าของ f สามารถแสดงสถานะในแผนภาพได้ด้วยเส้นเชื่อมระหว่างวงกลม เช่น





แผนภาพลักษณะหนึ่ง ๆ อาจประกอบไปด้วยอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิและส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ หรือขึ้นกับอย่างใดอย่างหนึ่งโดยเฉพาะซึ่งเป็นไปได้ทั้ง 3 แบบ ในแต่ละแบบแผนภาพเหล่านี้สามารถที่จะยุบ (collapse) และให้ผลในการเกิด "แผนภาพลักษณะอื่นตามมา แฟร์เรลและคนอื่นๆ (Farrell and others, 1979 : 4703) ได้แสดงการยุบแผนภาพโดยใช้กรอนเนคเคอร์เดลตาฟังก์ชัน (Kronecker delta function) กำหนดความเป็นไปได้ของแผนภาพที่เกิดจากการยุบ ดังแสดงในภาพประกอบ 15 และ 16

$$\begin{aligned}
 \rho \begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} &= \rho \begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} + \begin{array}{c} k \\ \diagdown \diagup \\ \rho \quad 1 \end{array} + \begin{array}{c} \rho \quad k \\ \diagup \diagdown \\ 1 \quad j \end{array} - \begin{array}{c} j \quad k \quad \rho \\ \diagdown \diagup \\ 1 \end{array} \\
 A \left(\begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} \right) &= u \left(\begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} \right) + \left[u \left(\begin{array}{c} k \\ \diagdown \diagup \\ 2 \end{array} \right) + u \left(\begin{array}{c} k \\ \diagup \diagdown \\ 1 \end{array} \right) - u \left(\begin{array}{c} \rho, k \\ \diagdown \diagup \\ 1, j \end{array} \right) \right] \\
 &+ \left[u \left(\begin{array}{c} \rho \\ \diagdown \diagup \\ k \end{array} \right) + u \left(\begin{array}{c} k \\ \diagup \diagdown \\ j \end{array} \right) - u \left(\begin{array}{c} \rho, k \\ \diagdown \diagup \\ 1, j \end{array} \right) \right] - u \left(\begin{array}{c} \rho, k \\ \diagdown \diagup \\ 1, j \end{array} \right) \\
 &= u \left(\begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} \right) - u \left(\begin{array}{c} \rho, k \\ \diagdown \diagup \\ 1, j \end{array} \right) \delta_{1j} \varepsilon_{1k} \delta_{1\rho}
 \end{aligned}$$

ภาพประกอบ 15 การยุบแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ของกลังเตอร์ 4 โมเมนต์ที่ประกอบด้วย 4 บอนด์

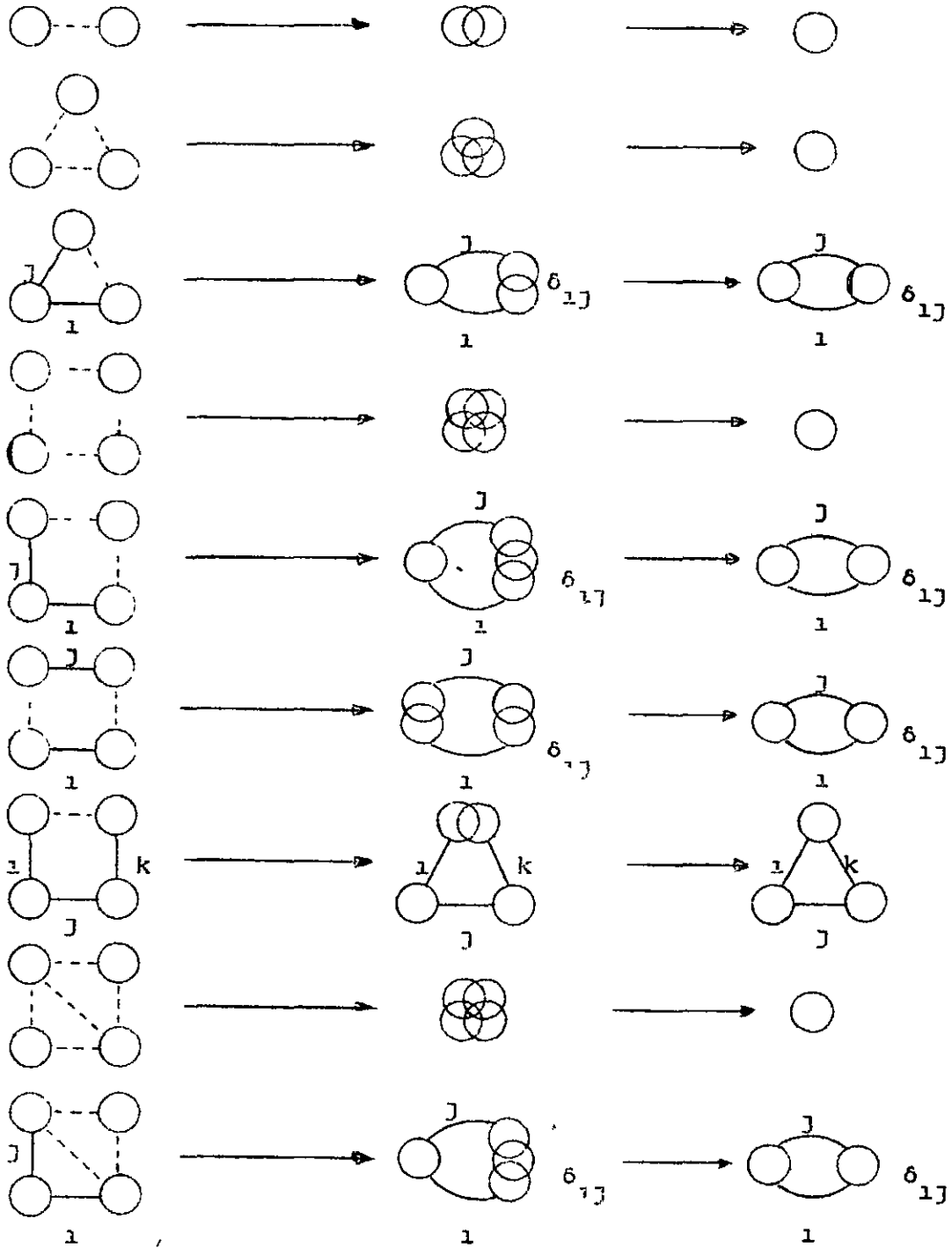
$$\begin{aligned}
 \rho \begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} &= \rho \begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} + \rho, k \begin{array}{c} \triangle \\ 1, j \end{array} \\
 A \left(\begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} \right) &= u \left(\begin{array}{c} k \\ \square \\ 1 \end{array} \right) + u \left(\begin{array}{c} \rho, k \\ \triangle \\ 1, j \end{array} \right) \delta_{1j} \delta_{k\rho}
 \end{aligned}$$

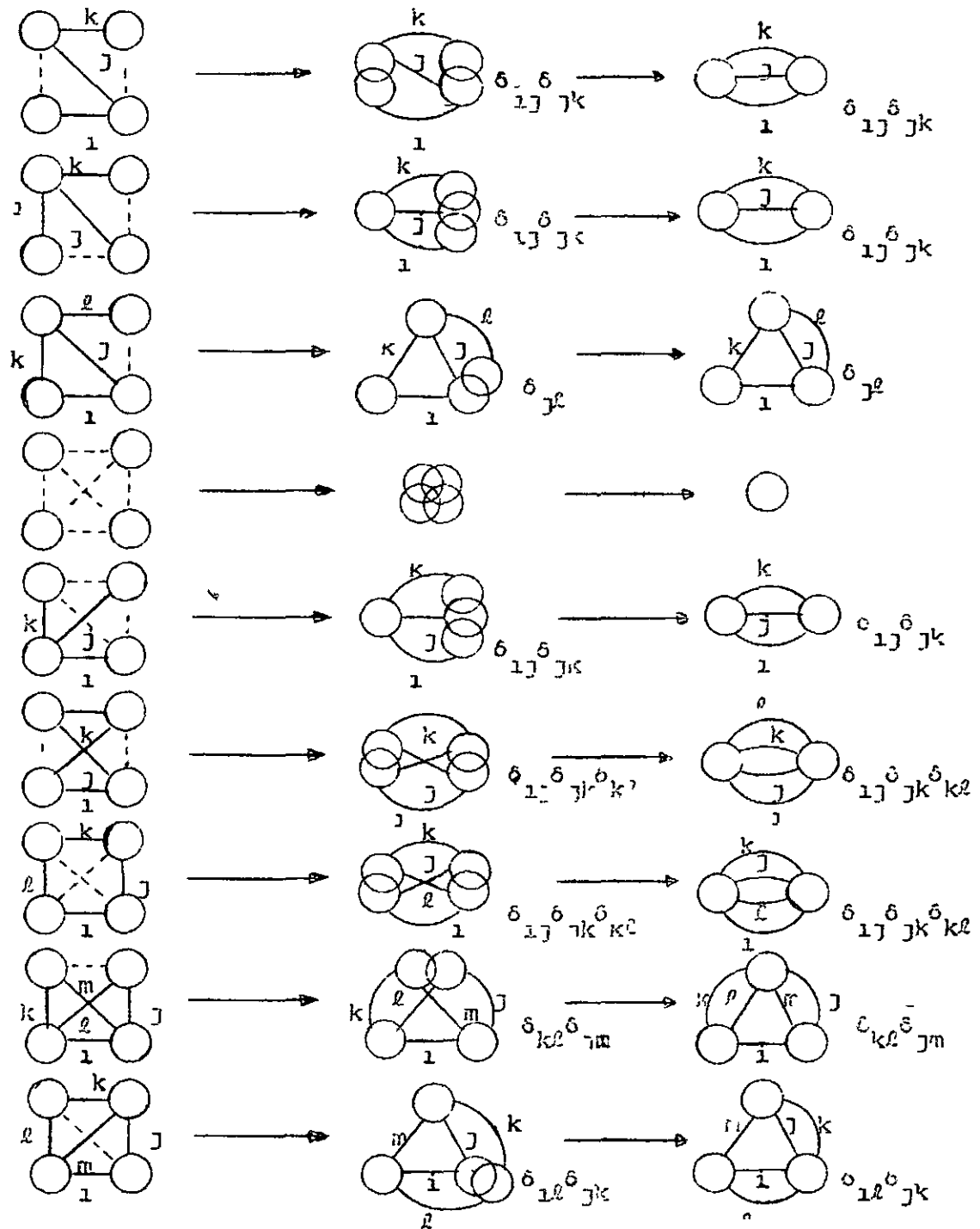
ภาพประกอบ 16 การยุบแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ของกลังเตอร์ 4 โมเมนต์ที่ประกอบด้วย 5 บอนด์

จากภาพประกอบ 15 และ 16 ค่าของ A เป็นผลรวมจำนวนวิธีทั้งหมดของแผนภาพที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในสี่เหลี่ยม และ u เป็นจำนวนวิธีเฉพาะของแต่ละแผนภาพ ส่วนผลจากแผนภาพที่ลดทอนได้จะไม่พิจารณา สำหรับ u แผนภาพโวลิตกยะของแบบจำลองแผนภาพ  กับ  ถ้าไม่มีองค์ประกอบของ ε_0 ในแผนภาพจะไม่สามารถยุบแผนภาพได้

แฟร์เร็ด มอริตา และเมเจอร์ (Farrell Morita and Meijer, 1956 : 356) ได้แสดงการยุบแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ ε_0 รวมอยู่ในแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้ ซึ่งเป็นวิธีการง่าย ๆ และตรงไปตรงมา ดังภาพประกอบ 17 ซึ่งแสดงในส่วน

ทั้งหมดที่เป็นไปได้เพื่อนำมาใช้ในการวิจัยในขั้นดำเนินการต่อไป





ภาพประกอบ 17 แสดงการยุบแผนภาพที่ลดทอนไปได้ออกถึงระดับ 2-4 โมเมนตัม ที่มองที่ ประกอบของ ϵ_0 (สี่ประจุ) รวมอยู่ในแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้

จำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟส เช่น เติร์ท วิคตเรีย

สิ่งสำคัญในการพิจารณาแต่ละแผนภาพคือ การคำนวณหาจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟส เช่น เติร์ท วิคตเรีย โดยจะเริ่มพิจารณาจากโคออร์ดิเนตของแต่ละโมเลกุลที่วางตัวตามตำแหน่งต่าง ๆ ของแลตทิซ และจะยึดถือตำแหน่งใดตำแหน่งหนึ่งเป็นจุดศูนย์กลาง จะได้ว่าสำหรับโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับแรกจะมีจำนวนทั้งหมด 12 ตำแหน่ง และมีโคออร์ดิเนตเป็น

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right), \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right)$$

$$\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right)$$

$$\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

โคออร์ดิเนตเหล่านี้สามารถเขียนรวมได้เป็น

$$\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, 0\right), \left(\pm\frac{1}{2}, 0, \pm\frac{1}{2}\right) \text{ และ } \left(0, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right)$$

ทำนองเดียวกันโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับสอง จะมีจำนวนทั้งหมด 6 ตำแหน่ง และสามารถแสดงโคออร์ดิเนตได้เป็น


$$\left(\pm 1, 0, 0\right), \left(0, \pm 1, 0\right) \text{ และ } \left(0, 0, \pm 1\right)$$



สำหรับโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับสาม มี 2³ ตำแหน่งแสดงได้ด้วยโคออร์ดิเนต ดังนี้

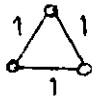
$$\left(\pm 1, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right), \left(\pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{1}{2}\right) \text{ และ } \left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm 1\right)$$

และโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับสี่ มี 12 ตำแหน่ง คือ

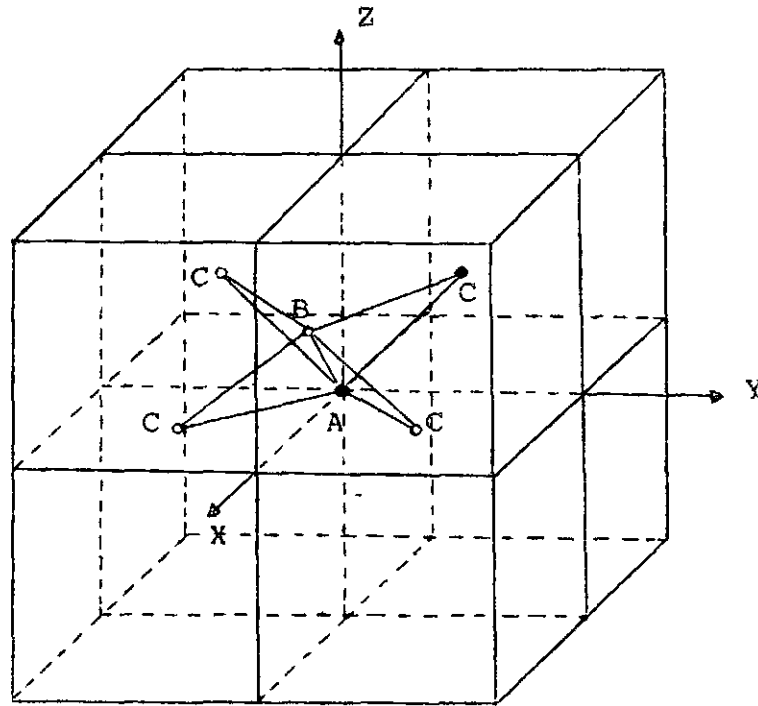
$$\left(\pm 1, \pm 1, 0\right), \left(0, \pm 1, \pm 1\right) \text{ และ } \left(\pm 1, 0, \pm 1\right)$$

แบบจำลองแผนภาพที่ง่ายที่สุดในการหาจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุลงในเสตติชชัมค
เฟซเช่นเตอร์คิวบิก ก็คือ  ซึ่งจะได้จำนวนวิธีเท่ากับ 12, 6, 24 และ
12 วิธีสำหรับอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับหนึ่ง, สอง, สาม และสี่
ตามลำดับ

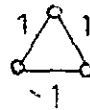
กรณีแบบจำลองแผนภาพ  เมื่อกำหนดขนาดความแรงของอันตรกิริยา
แต่ละด้านเป็น  จะทำให้แผนภาพที่ได้เป็นรูปสามเหลี่ยมด้านเท่าที่มีขนาดของ
แต่ละด้านยาว $1/\sqrt{2}$ หน่วย การบรรจุแผนภาพที่เสถียรภาพประกอบ 18 ช่วยเพื่อการ
พิจารณาถ้าโมเลกุลที่จุด A เป็นจุดศูนย์กลางลากเส้นตรงจากจุด A ไปยังโมเลกุลที่จุด B
ใด ๆ ให้เส้นตรง AB มีขนาดเป็น $1/\sqrt{2}$ หน่วย จะพบว่าสามารถกระทำได้ 12 เส้น
และใช้โมเลกุลที่จุด B เป็นจุดเริ่มต้นอีกครั้งลากเส้นตรงไปยังโมเลกุลที่จุด C ใด ๆ ให้
เส้นตรง BC มีขนาดเป็น $1/\sqrt{2}$ หน่วยจะกระทำได้เพียง 4 เส้น สุดท้ายลากเส้นตรง
จากจุด C กลับไปยังจุดศูนย์กลาง A โดยให้เส้นตรง CA มีขนาด $1/\sqrt{2}$ หน่วยเช่นกัน
จะสามารถกระทำได้เพียงเส้นเดียวเท่านั้นในแต่ละจุด C ที่พิจารณา

จากวิธีการดังกล่าวข้างต้นจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพ  ลง
ในเฟซเช่นเตอร์คิวบิกเสตติชจะถือว่าเป็น $12 \cdot 4 \cdot 1 = 48$ วิธี

โดยการใช้วิธีการเช่นนี้สามารถหาจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพต่าง ๆ ลงใน
เสตติชได้








ภาพประกอบ 18 แสดงวิธีคำนวณพหุนามวิธีที่ 1 บนภาพ
ในเฟสเซนเทอร์อิกคิวบิกแลตซ



สามารถบรรจุลง

วิธีดำเนินการและการวิเคราะห์ผล

คลัสเตอร์อินติกรัลและอินติกรัลทอนไม่ได้จะถูกแสดงค่าในรูปแบบของผลรวมของเทอมต่าง ๆ ที่เป็นผลคูณของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล ผลลัพธ์ที่ได้จะมาจาก การกระจายคลัสเตอร์ (cluster expansion) ที่อาศัยแบบจำลองแผนภาพ โดยมีวิธีการและลำดับขั้นตอนดังนี้

1. กระจายแบบจำลองแผนภาพที่ลตทอนไม่ได้ซึ่งประกอบด้วยแบบจำลองแผนภาพ  ,  ,  ,  และ  ในเฟสเช่น-เตอร์คิวบิกแลตทิซ

2. แสดงค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพแต่ละรูปด้วยค่าของผลรวมเทอมต่าง ๆ ที่เป็นผลคูณของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ กับค่าสัมประสิทธิ์ที่เป็นผลมาจากจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟสเช่นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

3. แสดงค่าของอินติกรัลทอนไม่ได้สามอันดับแรก คือ β_1 , β_2 และ β_3 จากผลที่ได้ในข้อ 2

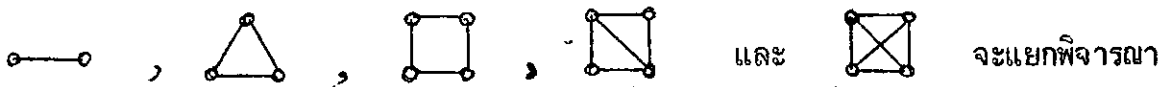
4. แสดงค่าของคลัสเตอร์อินติกรัลอันดับที่สอง , สาม และสี่ คือ b_2 , b_3 และ b_4 จากความสัมพันธ์ในสมการของ b_2 กับ β_k

5. วิเคราะห์ค่าของคลัสเตอร์อินติกรัล และอินติกรัลทอนไม่ได้เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีความแรงเท่ากัน โดยแยกพิจารณาดังต่อไปนี้

- 5.1. F.C.C. (1,0,0)
- 5.2 F.C.C. (1,1,0)
- 5.3 F.C.C. (1,1,1)

การกระจายแบบจำลองแผนภาพที่ลตทอนไม่ได้

การกระจายแบบจำลองแผนภาพที่ลตทอนไม่ได้ ซึ่งประกอบด้วยแบบจำลองแผนภาพ



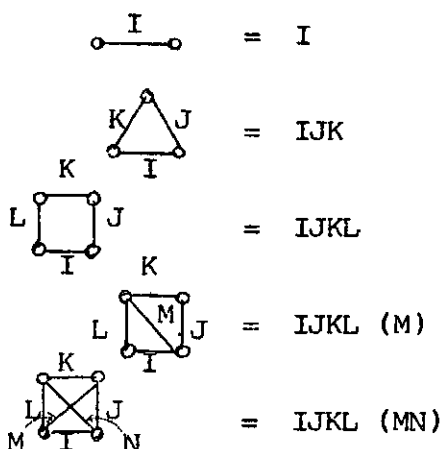
แต่ละแบบจำลองแผนภาพเพื่อหาจำนวนของแผนภาพที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล ที่ปรากฏบนเส้นเชื่อมต่อระหว่างวงกลมในแบบจำลองแผนภาพ โดยแผนภาพที่ได้นี้สามารถบรรจุลงในเฟสเช่นเตอร์คิวบิคแลตทิซ และเราเรียกแผนภาพเหล่านี้ว่าแผนภาพที่เป็นไปได้

เพื่อความสะดวกในการกำหนดลักษณะของแผนภาพจะใช้เลขรหัส 0, 1, 2 และ 3 แทนขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดในลำดับต่าง ๆ ที่พิจารณา คือ

- เลขรหัส 0 แทนขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลภายในตัวเองคือ f_0
- เลขรหัส 1 แทนขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับแรก คือ f_1
- เลขรหัส 2 แทนขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับสอง คือ f_2
- เลขรหัส 3 แทนขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับที่สาม คือ f_3

และจากการรวมเลขรหัสเหล่านี้เป็น กลุ่มเลขรหัสที่มีจำนวนของเลขรหัสเท่ากับจำนวนของเส้นเชื่อมต่อระหว่างวงกลมที่เกิดขึ้นในแบบจำลองแผนภาพ เราสามารถใช้กลุ่มเลขรหัสที่ได้นี้แทนแผนภาพที่ต้องการได้

ทุก ๆ เส้นเชื่อมต่อระหว่างวงกลมของแบบจำลองแผนภาพจะแทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่สามารถแปรเปลี่ยนค่าได้จาก 0 ถึง 3 ดังนั้นการบ่งบอกขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลบนแบบจำลองแผนภาพสามารถใช้สัญลักษณ์ I, J, K, L, M และ N แทนอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นบนแต่ละเส้นของแบบจำลองแผนภาพ ซึ่งมีลำดับและตำแหน่งที่แน่นอนตามกลุ่มเลขรหัสที่แทนแผนภาพลักษณะต่าง ๆ คือ





เมื่อ I, J, K, L, M และ $N = 0, 1, 2,$ และ 3

ลำดับของสัญลักษณ์ในกลุ่มเลขรหัสที่แทนแผนภาพมีความสำคัญทั้งในการกำหนดด้านของแผนภาพและผลในการอ่านโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่แสดงในภาคผนวก ข.

การใช้กลุ่มเลขรหัสแทนแผนภาพ จะต้องทราบลักษณะของอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นในแผนภาพสำหรับแผนภาพลักษณะหนึ่ง ๆ ดังนั้นเพื่อความสะดวกจะอาศัยชุดกลุ่มเลขรหัสหลักที่แสดงในภาคผนวก ก. เป็นเครื่องมือช่วยในการกำหนดลักษณะแผนภาพเพื่อทำให้การกระจายแผนภาพมีความสะดวกและเป็นระบบมากขึ้น


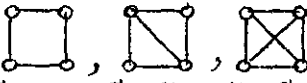

ชุดกลุ่มเลขรหัสหลักไม่ได้เป็นตัวแทนของแผนภาพ แต่เป็นชุดเลขรหัสที่แทนลักษณะอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งหมดที่เกิดขึ้นภายในแผนภาพ แต่ละกลุ่มจะแทนลักษณะแผนภาพแบบหนึ่ง ๆ ที่ยังสามารถกระจายหาแผนภาพลักษณะเดียวกันโดยการสับเปลี่ยนตำแหน่งของอันตรกิริยาอย่างมีระบบ อย่างไรก็ตามชุดกลุ่มเลขรหัสเหล่านี้ก็พอที่จะบ่งบอกลักษณะของแผนภาพได้

การใช้ชุดกลุ่มเลขรหัสแทนอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นภายในแผนภาพจะต้องพิจารณาผลทางโปรแกรมคอมพิวเตอร์ในภาคผนวก ข. เป็นเครื่องกำหนดความเป็นไปได้ของแผนภาพที่จะสามารถบรรจุแผนภาพนั้นลงในเฟซเช่นเตอร์คิวบิคสเตดิซได้ ซึ่งแผนภาพจะประกอบไปด้วยแบบจำลองแผนภาพกับกลุ่มเลขรหัสที่แทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล ดังนั้นการกระจายหาแผนภาพทั้งหมดที่มีลักษณะแบบเดียวกันจะขึ้นกับกลุ่มเลขรหัส จะเห็นได้จากตัวอย่างต่อไปนี้ เมื่อพิจารณาชุดกลุ่มเลขรหัสหลักตรงกลุ่มที่ 000112 นำมาใช้กับแบบจำลองแผนภาพ  จะ

เหลือกลุ่มเลขรหัสที่ใช้แทนแผนภาพเป็น 112 และจากการตรวจสอบกับผลทางโปรแกรมคอมพิวเตอร์ จะได้ว่า  เป็นแผนภาพที่เป็นไปได้ ดังนั้นการกระจายเพื่อหาจำนวนแผนภาพทั้งหมด ในลักษณะแบบเดียวกันจะได้

211 121 112

มีได้เพียง 3 ภาพ สำหรับแผนภาพลักษณะนี้ แต่ละภาพจะแตกต่างกันทางด้านรูปร่างแต่ให้ผล ในการหาจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซเช่นเตอร์คิวบิกเลขรหัสได้เหมือนกัน

รายละเอียดของวิธีการกระจายหาแผนภาพลักษณะแบบเดียวกัน คือ การพลิกแผนภาพ แบบทวนเข็มนาฬิกาที่ละด้านจนครบรอบ ซึ่งกรณีของแบบจำลองแผนภาพ  จะเทียบ ได้กับการพลิกด้านเป็นมุม 120° และสำหรับ  จะเป็นการ พลิกด้านเป็นมุม 90° ถ้าผลที่ได้เป็นกลุ่มเลขรหัสเรียงแบบเดียวกันจะนับเพียงครั้งเดียว เช่นที่ กลุ่มเลขรหัสหลัก 001122 สำหรับ  จะเหลือกลุ่มเลขรหัสที่ใช้แทนแผนภาพเป็น 1122 และจากผลทางโปรแกรมคอมพิวเตอร์ในภาคผนวก ข. ได้ลักษณะแผนภาพ สองลักษณะ ก็คือ 2211 กับ 2121 ซึ่งให้ผลเกี่ยวกับจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพแตกต่างกัน คือ แผนภาพ 2211 บรรจุได้ 24 วิธี และแผนภาพ 2121 บรรจุได้ 96 วิธี ดังนั้นการกระจาย เพื่อหาแผนภาพลักษณะแบบเดียวกันจากแผนภาพ สองลักษณะ มีไว้ทั้งหมดเป็น

2211 1221 1122 2112

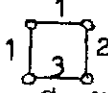
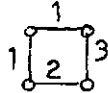
และ 2121 1212 2121 1212

แต่การเกิดแผนภาพซ้ำกันจะนับเพียงครั้งเดียวทำให้ผลสุดท้ายได้เป็น

2211 1221 1122 2112

2121 1212

บางครั้งแผนภาพที่พิจารณาสามารถสับเปลี่ยนอันตรกิริยาระหว่างด้านของแผนภาพโดย ไม่ทำให้ลักษณะแผนภาพผิดไปจากเดิม แต่มีผลกับการกระจายแผนภาพ เช่น แผนภาพ

 สามารถสับเปลี่ยน 2 กับ 3 ได้เป็น  ทั้งสองแผนภาพมีลักษณะ แบบเดียวกัน แต่ไม่ใช่แผนภาพที่ซ้ำกันเพราะการเรียงตัวเลขรหัสภายในกลุ่มที่ใช้แทนแผนภาพ จะแตกต่างกัน และสามารถนำไปใช้ในการกระจายแผนภาพได้อีก คือ

แผนภาพ กระจายได้ 4 แผนภาพคือ 3211 1321 1132 2113
 แผนภาพ กระจายได้ 4 แผนภาพคือ 2311 1231 1123 3112
 จำนวน 8 แผนภาพที่ไว้จะไว้ค่าจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพได้เท่ากันในผลสุดท้ายที่แสดง
 จะเขียนรวมให้อยู่แถวเดียวกันทั้งหมดแบบต่อเนื่องเพื่อสะดวกต่อการพิจารณาในภายหลัง เป็น
 3211 1321 1132 2113 2311 1231 1123 3112

ปัจจัยสำคัญอีกสิ่งหนึ่งของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ คือ การยูนแผนภาพดังกล่าว
 ประกอบ 15, 16 และ 17 และสำหรับแบบจำลองแผนภาพ กับ จะมีลักษณะต่างออกไป เพราะมีผลให้เกิดแผนภาพลักษณะอื่นติดตามมาแต่จะต้องอยู่ในหลักเกณฑ์
 ที่ได้กำหนดไว้ จะ เป็นแผนภาพที่เป็นไปได้

ความเป็นไปได้หรือเป็นไปไม่ได้ของแผนภาพสำหรับเฟส เช่น เฟอร์มิออนเลทติซ อยู่
 ที่การยูนแผนภาพและการบรรจุแผนภาพในเลทติซกระทำได้หรือไม่ สำหรับแผนภาพที่เป็นไปไม่ได้
 ได้มีสาเหตุของการเกิดพอสรูปได้ 3 ประการ คือ

1. เป็นแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ E_0 แต่ไม่สามารถทำการยูนแผนภาพได้
2. เป็นแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ E_0 และสามารถยูนแผนภาพได้ แต่ผลจากการ
 ยูนแผนภาพไม่สามารถบรรจุแผนภาพที่ได้ลงในเฟส เช่น เฟอร์มิออนเลทติซ
3. เป็นแผนภาพที่ไม่สามารถบรรจุลงในเฟส เช่น เฟอร์มิออนเลทติซ ส่วนแผนภาพ
 ที่เป็นไปได้ จะถูกนำไปใช้ในการคำนวณค่าของจลนศาสตร์อินทิกรัล และอินทิกรัลลทอนไม่ได้

การกระจายแบบจำลองแผนภาพ

เป็นแบบจำลองแผนภาพที่ประกอบด้วย 2 โมเลกุล มีจำนวน
 อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ 1 บอนด์ และชุดกลุ่มเลขรหัสหลักที่ใช้พิจารณาเริ่ม
 จาก 000000 ถึง 000003 โดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ = I
 คือ 0 ถึง 3 จำนวนแผนภาพทั้งหมดที่เป็นไปได้และแทนด้วยกลุ่มเลขรหัส มีแผนภาพ

0
1
2
3

การกระจายแบบจำลองแผนภาพ



เป็นแบบจำลองแผนภาพที่ประกอบด้วย 3 โมเลกุล มีจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ 3 บอนต์ และชุดกลุ่มเลขรหัสหกหลักที่ใช้พิจารณาเริ่มจาก 000000 ถึง 000123 โดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ $\begin{matrix} K & & J \\ & \triangle & \\ & I & \end{matrix}$ คือ 000 ถึง 123 .

แผนภาพที่เป็นไปไม่ได้ (ถูกแสดงโดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ) แยกตามลักษณะและสาเหตุการเกิดดังนี้

1. ไม่สามารถยูนแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ ϵ_0 ได้ มี 001 ถึง 003 และ 012 ถึง 023
2. ไม่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซเซมโทเรียลได้ มี 222 221 และ 223

แผนภาพที่เป็นไปได้และถูกกระจายหาลำดับแผนภาพลักษณะเดียวกันทั้งหมดมีแผนภาพดังต่อไปนี้

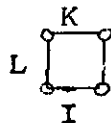
000
011 101 110
022 202 220
033 303 330

111
 333
 112 211 121
 113 311 131
 331 133 313
 332 233 323
 123 312 231 132 213 321

การกระจายแบบจำลองแผนภาพ



เป็นแบบจำลองแผนภาพที่ประกอบด้วย 4 โมเลกุล มีจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ 4 บอนต์ และชุดกลุ่มเลขรหัสหกหลักที่ใช้พิจารณาเริ่มจาก 000000 ถึง 003312 โดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ $IJKL = IJKL$ ก่อ 0000 ถึง 3312




แผนภาพที่เป็นไปไม่ได้ (ถูกแสดงโดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ) แยกตามลักษณะและสาเหตุการเกิดดังนี้




1. ไม่สามารถยูนแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ ε_0 ได้ มี 0001 ถึง 0003 และ 0012 ถึง 0023
2. ยูนแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ ε_0 ได้ แต่ไม่สามารถบรรจุแผนภาพของผลที่ได้ลงในเฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ มี 0222 0221 และ 0223

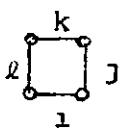
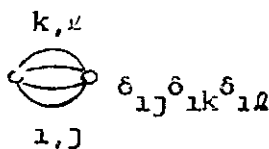
แผนภาพที่เป็นไปได้ และถูกกระจัดหายหาจำนวนแผนภาพลักษณะเดียวกันทั้งหมดมีแผนภาพ
ดังต่อไปนี้

0000							
0011	1001	1100	0110				
0101	1010						
0022	2002	2200	0220				
0202	2020						
0033	3003	3300	0330				
0303	3030						
0111	1011	1101	1110				
0333	3033	3303	3330				
0112	2011	1201	1120	0121	1012	2101	1210
0211	1021	1102	2110				
0113	3011	1301	1130	0131	1013	3101	1310
0311	1031	1103	3110				
0331	1033	3103	3310	0313	3031	1303	3130
0133	3013	3301	1330				
0332	2033	3203	3320	0323	3032	2303	3230
0233	3023	3302	2330				
0123	3012	2301	1230	0132	2013	3201	1320
0312	2031	1203	3120	0321	1032	2103	3210
0231	1023	3102	2310	0213	3021	1302	2130
1111							
2222							
3333							
2111	1211	1121	1112				

3111	1311	1131	1113				
3313	3331	1333	3133				
3332	2333	3233	3323				
2211	1221	1122	2112				
2121	1212						
3311	1331	1133	3113				
3131	1313						
3322	2332	2233	3223				
3232	2323						
3211	1321	1132	2113	2311	1231	1123	3112
3121	1312	2131	1213				
3221	1322	2132	2213	1223	3122	2312	2231
3212	2321	1232	2123				
3312	2331	1233	3123	3321	1332	2133	3213
3231	1323	3132	2313				

แบบจำลองแผนภาพ  มีลักษณะพิเศษที่สามารถยุบตัวเองตามภาพประกอบ

15 ทำให้เกิดแบบจำลองแผนภาพ  ติดตามมา และเป็นส่วนที่มาหักล้างกันแผนภาพ
 เกม ดังนั้นความเป็นไปได้ของการเกิดแบบจำลองแผนภาพ  จาก 
 ไม่ได้ทั้งสิ้นดังนี้

	
1111	1^4
2222	2^4
3333	3^4

การกระจายแบบจำลองแผนภาพ



เป็นแบบจำลองแผนภาพที่ประกอบด้วย 4 โหนด มีจำนวนอันตร-
กิริยาระหว่างโหนดในแผนภาพ 5 บอนด์ และชุดกลุ่มเลขรหัสหกหลักที่ใช้พิจารณาเริ่มจาก
000000 ถึง 022331 โดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ L ; J
= IJKL(M) คือ 00000 ถึง 22331

แผนภาพที่เป็นไปไม่ได้ (ถูกแสดงโดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ) แยกตามลักษณะ
และสาเหตุการเกิดดังนี้

1. ไม่สามารถขุดแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ f_0 ได้มี 00001 ถึง 00003 ;
00012 ถึง 00023 ; 00112 ถึง 00123
2. ขุดแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ f_0 ได้ แต่ไม่สามารถบรรจุแผนภาพของผลที่ได้
ลงในเฟซเช่นเตอร์คิวบิตแลตทิซ มี 02221 และ 02223
3. ไม่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซเช่นเตอร์คิวบิตแลตทิซได้ มี 22222 22221
22223 22211 22233 และ 22213





แผนภาพที่เป็นไปได้ และถูกกระจายหาจำนวนแผนภาพลักษณะเดียวกันทั้งหมดมีแผนภาพ
ดังต่อไปนี้

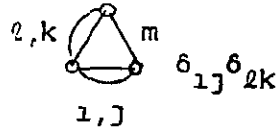
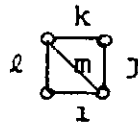
0000 (0)	
1001 (0)	0110 (0)
2002 (0)	0220 (0)
3003 (0)	0330 (0)
0011 (1)	1100 (1)
0101 (1)	1010 (1)
0022 (2)	2200 (2)
0202 (2)	2020 (2)
0033 (3)	3300 (3)

0303 (3)	3030 (3)		
0111 (1)	1110 (1)	1101 (1)	1011 (1)
0333 (3)	3330 (3)	3303 (3)	3033 (3)
0121 (1)	1210 (1)	2101 (1)	1012 (1)
0211 (1)	1120 (1)	1102 (1)	2011 (1)
0131 (1)	1310 (1)	3101 (1)	1013 (1)
0311 (1)	1130 (1)	1103 (1)	3011 (1)
0313 (3)	3130 (3)	1303 (3)	3031 (3)
0133 (3)	3310 (3)	3301 (3)	1033 (3)
0323 (3)	3230 (3)	2303 (3)	3032 (3)
0233 (3)	3320 (3)	3302 (3)	2033 (3)
0112 (2)	2110 (2)	1201 (2)	1021 (2)
0113 (3)	3110 (3)	1301 (3)	1031 (3)
0331 (1)	1330 (1)	3103 (1)	3013 (1)
0332 (2)	2330 (2)	3203 (2)	3023 (2)
0231 (1)	1320 (1)	3102 (1)	2013 (1)
0321 (1)	1230 (1)	2103 (1)	3012 (1)
0132 (2)	2310 (2)	3201 (2)	1023 (2)
0312 (2)	2130 (2)	1203 (2)	3021 (2)
0123 (3)	3210 (3)	2301 (3)	1032 (3)
0213 (3)	3120 (3)	1302 (3)	2031 (3)
1111 (1)			
3333 (3)			
2111 (1)	1112 (1)	1121 (1)	1211 (1)
1111 (2)			
3111 (1)	1113 (1)	1131 (1)	1311 (1)

1111 (3)
 3331 (3) 1333 (3) 3133 (3) 3313 (3)
 3333 (1)
 3332 (3) 2333 (3) 3233 (3) 3323 (3)
 3333 (2)
 2211 (1) 1122 (1)
 2121 (1) 1212 (1)
 3113 (1) 1331 (1)
 3311 (1) 1133 (1)
 3131 (1) 1313 (1)
 3111 (3) 1113 (3) 1131 (3) 1311 (3)
 3331 (1) 1333 (1) 3133 (1) 3313 (1)
 3113 (3) 1331 (3)
 3311 (3) 1133 (3)
 3131 (3) 1313 (3)
 3322 (3) 2233 (3)
 3232 (3) 2323 (3)
 3211 (1) 1123 (1) 1132 (1) 2311 (1)
 3112 (1) 2113 (1) 1231 (1) 1321 (1)
 3121 (1) 1213 (1) 2131 (1) 1312 (1)
 3111 (2) 1113 (2) 1131 (2) 1311 (2)
 2111 (3) 1112 (3) 1121 (3) 1211 (3)
 3332 (1) 2333 (1) 3233 (1) 3323 (1)
 3331 (2) 1333 (2) 3133 (2) 3313 (2)
 3213 (3) 3123 (3) 1332 (3) 2331 (3)
 3321 (3) 1233 (3) 2133 (3) 3312 (3)

3231 (3)	1323 (3)	3132 (3)	2313 (3)
3122 (1)	2213 (1)	2231 (1)	1322 (1)
3212 (1)	2123 (1)	1232 (1)	2321 (1)
2121 (3)	1212 (3)		
3213 (1)	3123 (1)	1332 (1)	2331 (1)
3321 (1)	1233 (1)	2133 (1)	3312 (1)
3113 (2)	1331 (2)		
3311 (2)	1133 (2)		
3231 (1)	1323 (1)	3132 (1)	2313 (1)
3211 (3)	1123 (3)	1132 (3)	2311 (3)
3112 (3)	2113 (3)	1231 (3)	1321 (3)
3131 (2)	1313 (2)		
3121 (3)	1213 (3)	2131 (3)	1312 (3)
3322 (1)	2233 (1)		
3232 (1)	2323 (1)		
3122 (3)	2213 (3)	2231 (3)	1322 (3)
3212 (3)	2123 (3)	1232 (3)	2321 (3)

แบบจำลองแผนภาพ  สามารถยุบตัวเองได้ตามภาพประกอบ 16 ทำให้
เกิดแบบจำลองแผนภาพ  ซึ่งเป็นส่วนที่เพิ่มขึ้นให้แก่แผนภาพเดิม และแผนภาพของ
 ที่เป็นไปได้จะพิจารณาจากการเกิดแผนภาพของ  ดังนี้

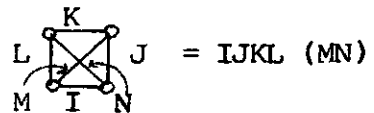


	1111 (1)		$1^2 11^2$
	3333 (3)		$3^2 33^2$
	1111 (2)		$1^2 21^2$
	1111 (3)		$1^2 31^2$
	3333 (1)		$3^2 13^2$
	3333 (2)		$3^2 23^2$
2211 (1)	1122 (1)	$2^2 11^2$	$1^2 12^2$
3311 (1)	1133 (1)	$3^2 11^2$	$1^2 13^2$
3311 (3)	1133 (3)	$3^2 31^2$	$1^2 33^2$
3322 (3)	2233 (3)	$3^2 32^2$	$2^2 33^2$
3311 (2)	1133 (2)	$3^2 21^2$	$1^2 23^2$
3322 (1)	2233 (1)	$3^2 12^2$	$2^2 13^2$

การกระจายแบบจำลองแผนภาพ



เป็นแบบจำลองแผนภาพที่ประกอบด้วย 4 โมเลกุล มีจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ 6 บอนด์ และชุดกลุ่มเลขรหัสหลักที่ใช้พิจารณาเริ่มจาก 000000 ถึง 112233 โดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ คือ 000000 ถึง 112233



แผนภาพที่เป็นไปไม่ได้ (ถูกแสดงโดยกลุ่มเลขรหัสที่สอดคล้องกับแผนภาพ) แยกตามลักษณะ และสาเหตุการเกิดดังนี้

1. ไม่สามารถยูนแผนภาพที่มีองค์ประกอบ ϵ_0 ได้มี 000001 ถึง 000023 ;

000112 ถึง 000123 ; 001112 ถึง 003312 และ 011123 ถึง 033312

2. ขุนแผนภาพที่มีองค์ประกอบของ ϵ_0 ได้ แต่ไม่สามารถบรรจุแผนภาพของผลที่ได้ลงในเฟสเช่นเตอร์คิวบิคเลทติซ มี 022222 022221 022223 022211 และ 022233

3. ไม่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟสเช่นเตอร์คิวบิคเลทติซได้ มี 222222 333333 222221 222223 333331 333332 222211 222233 333311 222213 111222 222333 111223 222113 222331 และ 333221





แผนภาพที่เป็นไปได้และถูกกระจายหาจำนวนแผนภาพลักษณะเดียวกันทั้งหมดมีแผนภาพดังต่อไปนี้


0000 (00)			
0011 (01)	1001 (10)	1100 (01)	0110 (10)
0022 (02)	2002 (20)	2200 (02)	0220 (20)
0033 (03)	3003 (30)	3300 (03)	0330 (30)
0101 (11)	1010 (11)		
1111 (00)			
0202 (22)	2020 (22)		
2222 (00)			
0303 (33)	3030 (33)		
3333 (00)			
0111 (11)	1011 (11)	1101 (11)	1110 (11)
1111 (01)	1111 (10)		
0333 (33)	3033 (33)	3303 (33)	3330 (33)
3333 (03)	3333 (30)		
0121 (11)	1012 (11)	2101 (11)	1210 (11)
1111 (02)	1111 (20)		
0131 (11)	1013 (11)	3101 (11)	1310 (11)

	1111 (03)	1111 (30)		
	0313 (33)	3031 (33)	1303 (33)	3130 (33)
	3333 (01)	3333 (10)		
	0323 (33)	3032 (33)	2303 (33)	3230 (33)
	3333 (02)	3333 (20)		
*	0112 (12)	2011 (21)	1201 (12)	1120 (21)
	0211 (21)	1021 (12)	1102 (21)	2110 (12)
	1122 (01)	2112 (10)	2211 (01)	1221 (10)
	0113 (13)	3011 (31)	1301 (13)	1130 (31)
	0311 (31)	1031 (13)	1103 (31)	3110 (13)
	1133 (01)	3113 (10)	3311 (01)	1331 (10)
	0331 (31)	1033 (13)	3103 (31)	3310 (13)
	0133 (13)	3013 (31)	3301 (13)	1330 (31)
	3311 (03)	1331 (30)	1133 (03)	3113 (30)
	0332 (32)	2033 (23)	3203 (32)	3320 (23)
	0233 (23)	3023 (32)	3302 (23)	2330 (32)
	3322 (03)	2332 (30)	2233 (03)	3223 (30)
	0132 (12)	2013 (21)	3201 (12)	1320 (21)
	0231 (21)	1023 (12)	3102 (21)	2310 (12)
	1221 (30)	1122 (03)	2112 (30)	2211 (03)
	0123 (13)	3012 (31)	2301 (13)	1230 (31)
	0321 (31)	1032 (13)	2103 (31)	3210 (13)
	1133 (02)	3113 (20)	3311 (02)	1331 (20)
	0213 (23)	3021 (32)	1302 (23)	3120 (23)
	0312 (32)	2031 (23)	1203 (32)	3120 (23)
	2233 (01)	3223 (10)	3322 (01)	2332 (10)

1111 (11)				
2111 (11)	1211 (11)	1121 (11)	1112 (11)	
3111 (11)	1311 (11)	1131 (11)	1113 (11)	
1111 (22)				
3311 (11)	1331 (11)	1133 (11)	3113 (11)	
3333 (22)				
3211 (11)	1321 (11)	1132 (11)	2113 (11)	3112 (11)
		2311 (11)	1231 (11)	1123 (11)
3333 (21)	3333 (12)			
3312 (33)	2331 (33)	1233 (33)	3123 (33)	3321 (33)
		1332 (33)	2133 (33)	3213 (33)
3311 (31)	1331 (13)	1133 (31)	3113 (13)	
3321 (11)	1332 (11)	2133 (11)	3213 (11)	3312 (11)
		2331 (11)	1233 (11)	3123 (11)
3311 (21)	1331 (12)	1133 (21)	3113 (12)	
3331 (21)	1333 (12)	3133 (12)	3313 (12)	3313 (21)
		3331 (12)	1333 (21)	3133 (21)
3311 (22)	1331 (22)	1133 (22)	3113 (22)	
3232 (11)	2323 (11)			

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพที่ลัดทอนไม่ได้

การแสดงค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ  ,  ,  , 

และ  จะแยกพิจารณาแต่ละรูปออกหากัน นอกจากแผนภาพที่เป็นผลมาจากการยุบแผนภาพจะต้องรวมในแผนภาพเดิม จากการอาศัยผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพที่หาได้จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพต่าง ๆ ตามรูปสมการแผนภาพที่แสดงดังนี้

$$\text{Diagram I} = nu \left(\text{Diagram 1} \right) \quad \dots(33)$$

$$\text{Diagram K} = nu \left(\text{Diagram k} \right) \quad \dots(34)$$

$$\text{Diagram L} = nu \left(\text{Diagram l} \right) - nu \left(\text{Diagram k,l} \right) \delta_{1J} \delta_{1k} \delta_{1l} \quad \dots(35)$$


$$\text{Diagram L} = nu \left(\text{Diagram l} \right) - nu \left(\text{Diagram k,l} \right) \delta_{1J} \delta_{kl} \quad \dots(36)$$



$$\text{Diagram M} = nu \left(\text{Diagram m} \right) \quad \dots(37)$$

เมื่อ N = จำนวนแผนภาพแบบเดียวกัน


u = จำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟรมเช่นเตอร์กิวบิคเลททิซ



ค่าของเลขรหัสจะถูกแทนกลับเป็นค่าของขนาดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ ซึ่งแต่ละแผนภาพที่ถูกแทนด้วยกลุ่มเลขรหัสจะได้เป็นผลคูณของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพ

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ 

จากผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ  และการกำหนดค่าของสมการแผนภาพตามสมการ (33) จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ  มีค่าเป็น

$$\text{Diagram 1} = -1 + 12f_1 + 6f_2 + 24f_3 \quad \dots(38)$$

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ 

จากผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ  และการกำหนดค่าของสมการแผนภาพตามสมการ (34) จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ  มีค่าเป็น

$$\begin{aligned}
 \triangle &= -1 - 36f_1^2 - 18f_2^2 - 72f_3^2 \\
 &+ 48 \left[f_1^3 + f_3^3 \right] + 72f_1^2 \left[f_2 + 2f_3 \right] \\
 &+ 144f_3^2 \left[f_1 + f_2 \right] + 144f_1f_2f_3 \quad \dots (39)
 \end{aligned}$$

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



จากผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ



และการกำหนดค่าของสมการ

แผนภาพตามสมการ (35) จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



มีค่าเป็น

$$\begin{aligned}
 \square &= 1 + 72f_1^2 + 36f_2^2 + 144f_3^2 \\
 &- 192 \left[f_1^3 + f_3^3 \right] - 288 \left[f_1^2f_2 + 2f_1^2f_3 + 2f_1f_3^2 + 2f_2f_3^2 \right] \\
 &- 576f_1f_2f_3 \\
 &+ 252f_1^4 + 18f_2^4 + 1224f_3^4 \\
 &+ 576 \left[f_1^3f_2 + 3f_1^3f_3 + 6f_1f_3^3 + 2f_2f_3^3 \right] \\
 &+ 144 \left[2f_1^2f_2^2 + 25f_1^2f_3^2 + 5f_2^2f_3^2 \right] \\
 &+ 1152f_1f_2f_3 \left[2f_1 + f_2 \right] \quad \dots (40)
 \end{aligned}$$

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



จากผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ



และการกำหนดค่าของ

สมการแผนภาพตามสมการ (36) จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



มี

ค่าเป็น

$$\begin{aligned}
 \square &= -1 - 24f_1^2 - 12f_2^2 - 48f_3^2 \\
 &+ 48f_1^3 + 24f_2^3 + 96f_3^3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 192 \left[f_1^3 f_2 + 2f_1^3 f_3 + 2f_1 f_3^3 + 2f_2 f_3^3 \right] \\
& - 192f_1^4 - 192f_3^4 \\
& - 96 \left[f_1^2 f_2^2 + 4f_1^2 f_3^2 + 2f_2^2 f_3^2 \right] \\
& - 192f_1 f_2 f_3 \left[f_1 + f_2 + f_3 \right] \\
& + 192f_1^5 + 96f_3^5 + 192f_4^5 \\
& + 96 \left[5f_1^4 f_2 + 9f_1^4 f_3 + 6f_1 f_3^4 + 8f_2 f_3^4 \right] \\
& + 192 \left[f_1^3 f_2^2 + 8f_1^3 f_3^2 + 7f_1^2 f_3^3 + 2f_2^2 f_3^3 \right] \\
& + 192f_1 f_2 f_3 \left[9f_1^2 + 11f_3^2 \right] \\
& + 48f_1 f_2 f_3 \left[9f_1 f_2 + 56f_1 f_3 + 12f_2 f_3 \right] \quad \dots (41)
\end{aligned}$$

ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



จากผลของการกระจายแบบจำลองแผนภาพ



และการกำหนดค่าของ

สมการแผนภาพตามสมการ (37) จะได้ค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพ



มี

ค่าดังนี้

$$\begin{aligned}
\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \bullet & & \bullet & \\ \hline \bullet & & \bullet & \\ \hline \bullet & & \bullet & \\ \hline \end{array} & = & 1 - 48f_1^3 - 24f_2^3 - 96f_3^3 \\
& + 36f_1^4 + 18f_2^4 + 72f_3^4 \\
& - 288f_1^5 - 288f_3^5 \\
& - 144 \left[f_1^4 f_2 + 2f_1^4 f_3 + 2f_1 f_3^4 + 2f_2 f_3^4 \right] \\
& - 288 \left[f_1^3 f_2^2 + 2f_1^3 f_3^2 + 2f_1^2 f_3^3 + 2f_2^2 f_3^3 \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 288f_1f_2f_3 \left[\begin{array}{cc} f_1f_2 + f_1f_3 & f_2f_3 \end{array} \right] \\
& + 48f_1^6 \\
& + 192f_1^5 \left[f_2 + f_3 \right] + 24 \left[f_1^4f_2^2 + 8f_1^4f_3^2 + 2f_2^2f_3^4 \right] \\
& + 96f_1f_2f_3 \left[4f_1^3 + 5f_3^3 \right] + 192f_1^3f_3^3 \\
& + 192f_1f_2f_3 \left[3f_1^2f_3 + 2f_1f_3^2 \right] + 240f_1^2f_2^2f_3^2 \quad \dots (42)
\end{aligned}$$

การคำนวณพหุคูณของอินทิกรัลลทอนไม่ได้และค่าลัสเตอร์อิมทิกรัล

สมการที่ได้จากการกระจายแบบค่าลงของพหุคูณลทอนไม่ได้ คือ สมการ (38) ถึง (42) เป็นผลให้สามารถแสดงค่าของ β_1 , β_2 และ β_3 ได้ด้วยการแทนค่าในสมการ (29) และหากอินทิกรัลลทอนไม่ได้สามอันกับแรกนี้เมื่อนำไปแทนค่าตามสมการ (25) จะได้ค่า b_2 , b_3 และ b_4 ซึ่งเป็นค่าลัสเตอร์อิมทิกรัลตามต้องการ

บทที่ 4

ผลการวิจัย

อินติกรัลลทอนไม่ได้สามอันดับแรก

การแสดงค่าของอินติกรัลลทอนไม่ได้ จะอาศัยค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพที่ ลทอนไม่ได้เพื่อแสดงค่าของ β_1 , β_2 และ β_3 ตามลำดับ โดยใช้ความสัมพันธ์จากสมการ (29) เป็นสิ่งกำหนดค่าของอินติกรัลลทอนไม่ได้

ค่าของ β_1 จะพิจารณาจากสมการ $\beta_1 = \text{---}$ และสมการ (38) จะได้อินติกรัลลทอนไม่ได้อันดับแรกมีค่าเป็น

$$\beta_1 = -1 + 12f_1 + 6f_2 + 24f_3 \quad \dots (43)$$

ค่าของ β_2 พิจารณาจากสมการ $\beta_2 = \frac{1}{2!} \triangle$ และสมการ (39) ได้อินติกรัลลทอนไม่ได้อันดับที่สองมีค่าเป็น

$$\begin{aligned} \beta_2 = & \frac{-1}{2} - 18f_1^2 - 9f_2^2 - 36f_3^2 \\ & + 24f_1^3 + 24f_3^3 \\ & + 36f_1^2 [f_2 + 2f_3] \\ & + 72f_3^2 [f_1 + f_2] + 72f_1f_2f_3 \quad \dots (44) \end{aligned}$$

ค่าของ β_3 ให้พิจารณาจากสมการ $\beta_3 = \frac{1}{3!} \left(3 \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \end{array} + 6 \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} + \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} \right)$ และสมการ (40) ถึง (42) ได้อินติกรัลลทอนไม่ได้อันดับที่สามมีค่าเป็น

$$\begin{aligned} \beta_3 = & -\frac{1}{3} + 12f_1^2 + 6f_2^2 + 24f_3^2 \\ & - 56f_1^3 + 20f_2^3 - 16f_3^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 144 \left[f_1^2 f_2 + 2f_1^2 f_3 + 2f_1 f_2^2 + 2f_2 f_3^2 \right] - 288 f_1 f_2 f_3 \\
& - 60 f_1^4 + 12 f_2^4 + 432 f_3^4 \\
& + 96 \left[f_1^3 f_2 + 5f_1^3 f_3 + 14f_1 f_2^3 + f_2 f_3^3 \right] \\
& + 24 \left[2f_1^2 f_2^2 + 59f_1^2 f_3^2 + 7f_2^2 f_3^2 \right] \\
& + 96 f_1 f_2 f_3 \left[10f_1 + 4f_2 + 13f_3 \right] \\
& + 144 f_1^5 + 48 f_3^5 \\
& + 8 \left[57f_1^4 f_2 + 102f_1^4 f_3 + 65f_1 f_2^4 + 90f_2 f_3^4 \right] \\
& + 48 \left[3f_1^3 f_2^2 + 30f_1^3 f_3^2 + 26f_1^2 f_2^3 + 6f_2^2 f_3^3 \right] \\
& + 192 f_1 f_2 f_3 \left[9f_1^2 + 11f_3^2 \right] + 48 f_1 f_2 f_3 \left[8f_1 f_2 + 55f_1 f_3 + 12f_2 f_3 \right] \\
& + 8 f_1^6 \\
& + 32 f_1^5 \left[f_2 + f_3 \right] + 4 \left[f_1^4 f_2^2 + 8f_1^4 f_3^2 \right] \\
& + 16 f_1 f_2 f_3 \left[4f_1^3 + 5f_3^3 \right] + 32 f_1^3 f_3^3 \\
& + 32 f_1 f_2 f_3 \left[3f_1^2 f_3 + 2f_1 f_2^2 \right] + 10 f_1^2 f_2^2 f_3^2 \quad . (45)
\end{aligned}$$

คลัสเตอร์อินทิกรัลอันดับที่สอง สาม และสี่

จากความสัมพันธ์ที่ได้จากสมการ (25) สามารถแสดงค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัล คือ b_2 , b_3 และ b_4 จากค่าของอินทิกรัลต่อนไม่ได้ในสมการ (43) ถึง (45) ดังต่อไปนี้

ค่าของ b_2 จะถูกกำหนดจากสมการ $b_2 = \frac{1}{2} b_1$ และสมการ (43) ทำให้ได้ค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัลอันดับที่สองมีค่าเป็น

$$b_2 = -\frac{1}{2} + 6f_1 + 3f_2 + 12f_3 \quad \dots (46)$$

ค่าของ b_3 ถูกกำหนดจากสมการ $b_3 = \frac{1}{2}\beta_1^2 + \frac{1}{3}\beta_2$ และสมการ (43) กับ (44) จะได้ว่าค่าของกัลสเทอริอันตริกัลอันดับที่สามมีค่าเป็น

$$\begin{aligned} b_3 &= \frac{1}{3} - 12f_1 - 6f_2 - 24f_3 \\ &+ 66f_1^2 + 15f_2^2 + 276f_3^2 \\ &+ 72 \left[f_1f_2 + 4f_1f_3 + 2f_2f_3 \right] \\ &+ 8f_1^3 + 8f_3^3 \\ &+ 12f_1^2 \left[f_2 + 2f_3 \right] + 24f_3^2 \left[f_1 + f_2 \right] + 24f_1f_2f_3 \quad \dots (47) \end{aligned}$$

และค่าของ b_4 ถูกกำหนดจากสมการ $b_4 = \frac{2}{3}\beta_1^3 + \frac{1}{4}\beta_2^2 + \frac{1}{4}\beta_3$ และสมการ (43) ถึง (45) จะได้ว่าค่าของกัลสเทอริอันตริกัลอันดับที่สี่มีค่าเป็น

$$\begin{aligned} b_4 &= -\frac{1}{4} + 18f_1 + 9f_2 + 36f_3 \\ &- 267f_1^2 - 61.5f_2^2 - 1110f_3^2 \\ &- 288 \left[f_1f_2 + 4f_1f_3 + 2f_2f_3 \right] \\ &+ 898f_1^3 + 95f_2^3 + 8324f_3^3 \\ &+ 36 \left[21f_1^2f_2 + 368f_1^2f_3 + 43f_1^2f_2 + 176f_1^2f_3 + 182f_2^2f_3 + 42f_2^2f_3 \right] \\ &+ 6768f_1f_2f_3 \\ &+ 273f_1^4 + 3f_2^4 + 684f_3^4 \\ &+ 24 \left[25f_1^3f_2 + 65f_1^3f_3 + 98f_1^2f_3^2 + 80f_2^2f_3^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 6 \left[48f_1^2f_2^2 + 491f_1^2f_3^2 + 79f_2^2f_3^2 \right] \\
& + 24f_1f_2f_3 \left[100f_1 + 22f_2 + 139f_3 \right] \\
& + 36f_1^5 + 12f_3^5 \\
& + 114f_1^4f_2 + 204f_1^4f_3 + 130f_1f_3^4 + 180f_2f_3^4 \\
& + 12 \left[3f_1^3f_2^2 + 30f_1^3f_3^2 + 26f_1^2f_3^3 + 6f_2^2f_3^3 \right] \\
& + f_1f_2f_3 \left[9f_1^2 + 11f_3^2 \right] + 12f_1f_2f_3 \left[8f_1f_2 + 55f_1f_3 + 11f_2f_3 \right] \\
& + 2f_1^6 \\
& + 8f_1^5 \left[f_2 + f_3 \right] + \left[f_1^4f_2^2 + 8f_1^4f_3^2 + 2f_2^2f_3^4 \right] \\
& + 4f_1f_2f_3 \left[4f_1^3 + 5f_3^3 \right] + 8f_1^3f_3^3 \\
& + 8f_1f_2f_3 \left[3f_1^2f_3 + 2f_1f_3^2 \right] + 10f_1^2f_2^2f_3^2 \quad \dots (48)
\end{aligned}$$

การวิเคราะห์ค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัลและอินทิกรัลลทอนไม่ได้

ค่าของคลัสเตอร์อินทิกรัลและอินทิกรัลลทอนไม่ได้ ในเทอมของผลรวมเทอมต่าง ๆ ที่เป็นผลคูณของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลในแผนภาพกับค่าสัมประสิทธิ์ที่เป็นผลมาจากจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงในเฟซ เช่น เตอร์คิวบิคเลททิซ จากสมการ (43) ถึง (48) เมื่อพิจารณาค่าความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดทั้งสามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน คือ $f_1 = f_2 = f_3 = f$ และจะได้ว่า $J_1 = J_2 = J_3 = J$ เราสามารถวิเคราะห์ผลตามลักษณะของลำดับอันตรกิริยา ดังนี้

1. F.C.C (1,0,0)
2. F.C.C (1,1,0)
3. F.C.C. (1,1,1)

จะได้ผลสรุปเป็นค่าตารางของอินทิกรัลลทอนไม่ได้ไว้ล่วงหน้ากับ รก. จะคลัสเตอร์อินทิกรัลอันดับที่

สอง, สาม, และสี่ ตามลำดับดังนี้

ตาราง 2 อินทิกรัลลทอนไม่ได้สามอันดับแรก เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล
ที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน

β_k	F.C.C. (J_1, J_2, J_3)	f^0	f	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6
β_1	(1,0,0)	-1	12					
	(1,1,0)	-1	18					
	(1,1,1)	-1	42					
β_2	(1,0,0)	$-\frac{1}{2}$		-18	24			
	(1,1,0)	$-\frac{1}{2}$		-27	60			
	(1,1,1)	$-\frac{1}{2}$		-63	372			
β_3	(1,0,0)	$-\frac{1}{3}$		12	-56	-60	144	8
	(1,1,0)	$-\frac{1}{3}$		13	-180	96	744	44
	(1,1,1)	$-\frac{1}{3}$		42	-1348	5472	13264	484

ตาราง 3 คลัสเตอร์อินทิกรัลอันดับที่สอง สาม และสี่ เมื่อความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน

b_l	F C.C. (J_1, J_2, J_3)	f^0	f	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6
b_2	(1,0,0)	$-\frac{1}{2}$	6					
	(1,1,0)	$-\frac{1}{2}$	9					
	(1,1,1)	$-\frac{1}{2}$	21					
b_3	(1,0,0)	$\frac{1}{3}$	-12	66	8			
	(1,1,0)	$\frac{1}{3}$	-18	153	20			
	(1,1,1)	$\frac{1}{3}$	-42	861	124			
b_4	(1,0,0)	$-\frac{1}{4}$	18	-267	898	273	36	2
	(1,1,0)	$-\frac{1}{4}$	27	-616.5	3297	1164	186	11
	(1,1,1)	$-\frac{1}{4}$	63	-1438.5	44021	17340	3304	123

บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ

บทย่อ

ความมุ่งหมายของการวิจัย

วัตถุประสงค์ของการวิจัยเพื่อคำนวณหาค่าคลัสเตอร์วินติกวีต และอินตกรัลลตทอนไม่ได้ของแบบจำลองไอซิงเสทติซ-กาซซนิคเฟซเช่นเตอร์กั วมคิในสามมิติ เมื่อพิจารณาในกรณีซึ่งความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีค่าเท่ากัน

เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย

เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัยมี 2 ชนิดคือ

1. ชุดกลุ่มเลขรหัสหลักที่ไม่ซ้ำกันของเลขรหัส 0, 1, 2 และ 3
2. โปรแกรมคอมพิวเตอร์ของ ทรงศรี วัฒนวิชัย

วิธีดำเนินการ

จากการใช้แบบจำลองแผนภาพที่ลตทอนไม่ได้ของคลัสเตอร์โมเลกุลที่มีจำนวนตั้งแต่ 2 - 4 โมเลกุล สามารถกระจายแบบจำลองแผนภาพแต่ละแบบด้วยหาความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรก และให้ผลเป็นแผนภาพต่าง ๆ ที่สามารถบรรจุแผนภาพที่ได้ลงในเฟซเช่นเตอร์กั วมคิเสทติซได้ โดยผลของแผนภาพต่าง ๆ ที่ได้นี้จะถูกนำไปใช้เพื่อการหาค่าผลลัพธ์ของแบบจำลองแผนภาพที่ลตทอนไม่ได้ับ ละอาศัยผลลัพธ์ที่ได้คำนวณหาอินตกรัลลตทอนไม่ได้

ค่าของอินตกรัลลตทอนไม่ได้ที่ได้นี้สามารถใช้คำนวณหาของคลัสเตอร์อินตกรัลลตทอนไม่ได้

การวิเคราะห์ผล

โดยการกำหนดฟังก์ชันความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุด สามอันดับแรกมีค่าความแรงเท่ากัน คือ $J_1 = J_2 = J_3 = 1$ จะทำให้ค่าของอินทิกรัลค- ทอนไม่ได้และกลศาสตร์อันตรกิริยาคำนวณในลำดับขอ รจัดมกิริยาได้ดังต่อไปนี้

1. F.C.C. (1,0,0)
2. F.C.C (1,1,0)
3. F.C.C. (1,1,1)

สรุปผลการวิจัย

จากค่าของอินทิกรัลค-ทอนไม่ได้และกลศาสตร์อันตรกิริยาคำนวณ 2 และ 3 สามารถ แบ่งแยกได้เป็น 2 ส่วนในแต่ละค่าที่พิจารณา คือ

1. ส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ หรือไม่มีองค์ประกอบของ ϵ
2. ส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิ หรือมีองค์ประกอบของ ϵ

ผลการวิเคราะห์ตามจำกัดของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล พบว่าค่าของ ρ_k และ b_2 แต่ละค่าจะขึ้นกับการพิจารณาอันดับของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุด คือจะมีค่าแตกต่างกันในส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิ แต่ละมีค่าเท่ากันในส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ

อภิปรายผลการวิจัย

ค่าของกลศาสตร์อันตรกิริยาคำนวณและอินทิกรัลค-ทอนไม่ได้ตามตาราง 2 และ 3 จะนำไป เปรียบเทียบกับงานวิจัยของคนอื่น ๆ โดยตรงกระทำไม่ได้ จะต้องอาศัยการเปลี่ยนค่าให้อยู่ ในรูปสมการของพลังงานอิสระเฮลล์โฮลตซ์ซึ่งกระทำไปโดยเร็วจากสมการ (32) และ กำหนดให้ $\beta U = K$

$$\text{จะได้} \quad f = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{K^m}{m!} \quad (49)$$

เมื่อ $K = K(T)$

ค่าของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์กำหนดได้จากสมการที่มีความสัมพันธ์กับ β_k
(สมมาตร ชีคญาตี 2525 13)

$$-\frac{\beta F}{L} = \rho (1 - \ln \rho) + \sum_{k \geq 1} \frac{\beta_k}{k+1} \rho^{k+1} \quad \dots (50)$$

เมื่อ $F =$ พลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์
 $\rho =$ ความหนาแน่นของระบบ $= \frac{1}{\Omega} = \frac{N}{L}$

จากค่าของอินทิกรัลลดทอนไม่ได้สามอันดับแรกทำให้สมการ (50) ปรากฏเป็น

$$-\frac{\beta F}{L} = \rho (1 - \ln \rho) + \sum_{k \geq 1} \frac{\beta_k}{k+1} \rho^{k+1} \quad \dots (51)$$

สมการ (51) เมื่อพิจารณาเฉพาะส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิโดยอาศัยค่าของ β_k ในตาราง 2

และสมการ (49) ช่วยกระจายค่าของ ϵ จะได้แก่จะกรณีคือ

สำหรับ F.C.C. (1,0,0)

$$\begin{aligned} -\frac{\beta F}{L}(T) &= 6 \rho^2 K \\ &+ (3 \rho^2 - 6 \rho^3 + 3 \rho^4) K^2 \\ &+ (\rho^2 + 2 \rho^3 - 11 \rho^4) K^3 \\ &+ (0.25 \rho^2 + 8.5 \rho^3 - 34.25 \rho^4) K^4 \\ &+ (0.05 \rho^2 + 5.83 \rho^3 - 6.08 \rho^4) K^5 + \dots (52) \end{aligned}$$

F.C.C. (1,1,0)

$$\begin{aligned}
-\frac{\delta F}{L}(T) &= 9 \rho^2 K \\
&+ (4.5 \rho^2 - 9 \rho^3 + 4.5 \rho^4) K^2 \\
&+ (1.5 \rho^2 + 11 \rho^3 - 40.5 \rho^4) K^3 \\
&+ (0.375 \rho^2 + 24.75 \rho^3 - 145.125 \rho^4) K^4 \\
&+ (0.075 \rho^2 + 16.083 \rho^3 + 194.25 \rho^4) K^5 + \dots \quad (53)
\end{aligned}$$

F.C.C. (1,1,1)

$$\begin{aligned}
-\frac{\delta F}{L} &= 21 \rho^2 K \\
&+ (10.5 \rho^2 - 21 \rho^3 - 10.5 \rho^4) K^2 \\
&+ (3.5 \rho^2 + 103 \rho^3 - 526.5 \rho^4) K^3 \\
&+ (0.875 \rho^2 + 173.75 \rho^3 + 868.625 \rho^4) K^4 \\
&+ (0.175 \rho^2 + 108.417 \rho^3 - 5745.708 \rho^4) K^5 + \dots \quad (54)
\end{aligned}$$

สมการ (52) ถึง (54) สามารถนำไปเปรียบเทียบเคียงกับงานวิจัยของ บุญเรือง ศรีเทัญญ์ (บุญเรือง ศรีเทัญญ์ 2527 : 120) ซึ่งแสดงค่าพลังงานอิสระเชิงขั้วต่อหน่วยปริมาตรเมื่ออันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันดับแรกมีค่าเท่ากับ $\frac{1}{2}$ ถึง $\frac{1}{4}$ ของค่าพลังงานรวม ϵ พบว่า

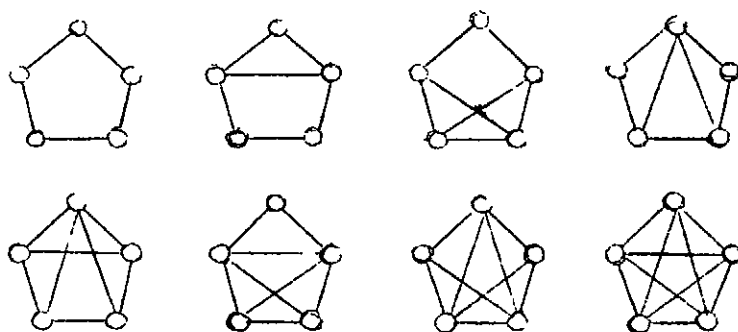
1 จากการวิจัยของข้าพเจ้า กำลังสูงสุดของอนุกรมความหนาแน่นที่ ρ เป็นส่วนประกอบในเทอมของ K กำลังต่าง ๆ จะมีค่าเพียง ρ^4 เท่านั้น แตกต่างจากค่าของ บุญเรือง ศรีเทัญญ์ ที่มีกำลังสูงสุดเป็นสองเท่าของกำลังของ K ในเทอมเดียวกัน ความแตกต่างดังกล่าวเป็นผลมาจากการที่บุญเรือง ศรีเทัญญ์ ใช้สมการ

$$-\frac{\delta F}{L} = - \left[\rho \ln \rho + (1-\rho) \ln (1-\rho) \right] \cdot \sum_{n=1}^N \sum_{m=2}^{2N} C(n,m) \rho^m K^n. \quad (55)$$

ซึ่งให้ผล $m = 2N$ และข้าพเจ้ากำหนดจากสมการ (50)

วิธีการแก้ไขคือเพิ่มกำลังของ p ให้มีค่ามากขึ้นในอนุกรมสำหรับงานวิจัยของ ข้าพเจ้า สามารถกระทำได้โดยอาศัยผลจากสมการ (50) พบว่าค่าของ k ที่แสดงอันดับ ของอินทรีย์ลดทอนไม่ได้มีค่าไม่สิ้นสุด นั่นคือสามารถกำหนด β_4, β_5, \dots และเมื่อ $k = 4$ จะทำให้เกิด p^5 ; $k = 5$ ทำให้เกิด p^6 เป็นต้น

ในทางปฏิบัติการคำนวณหาค่าของ β_4, β_5, \dots เป็นสิ่งลำบากและเกิดปัญหา มากเนื่องจากระบบค่าลดลง เหนือภาพที่ลดทอนไม่ได้ซึ่งจะก่อเงาเข้ามาใกล้ าวฉายจะมีลักษณะแปลกและ มีจำนวนมากขึ้นตามลำดับ เช่นค่า β_4 จะประกอบด้วยระบบค่าลดลงเหนือภาพที่ลดทอนไม่ได้ ได้แสดงในภาพประกอบ 19 (Mayer and Mayer, 1940 : 456)



ภาพประกอบ 19 แสดงลักษณะระบบค่าลดลงเหนือภาพที่ลดทอนไม่ได้ 8 แบบของค่า β_4

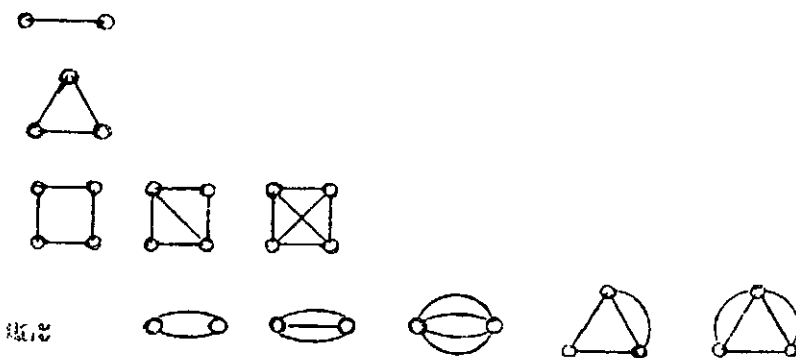
2. จำนวนโมเลกุลในคลัสเตอร์ บุญเรือง ศรีเสริมได้พิจารณาถึง 6 โมเลกุล ซึ่งแตกต่างจากงานวิจัยของข้าพเจ้าที่กำหนดขอบเขตสูงสุดเพียง 4 โมเลกุลในคลัสเตอร์
3. ค่าสัมประสิทธิ์ของอนุกรมความหนาแน่นบางค่ามีค่าแตกต่างกันดังแสดงใน ตาราง 4

ตาราง 4 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของอนุกรม ความหนาแน่นที่แตกต่างกันจากการเปรียบเทียบ ผลการวิจัยของข้าพเจ้า กับ บุญเรือง กวีเจริญ

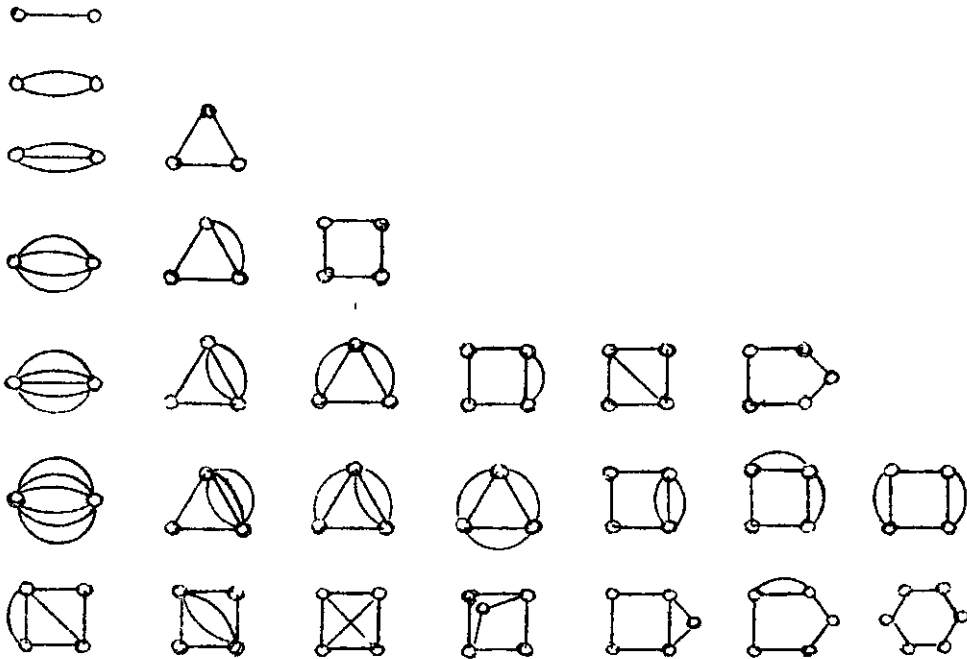
ค่าสัมประสิทธิ์ของ F.C.C. (J_1, J_2, J_3)	ผลการวิจัยของข้าพเจ้า			ผลการวิจัยของบุญเรือง		
	K^4	K^5		K^4	K^5	
	ρ^4	ρ^3	ω^3	ρ^4	ρ^3	ρ^4
(1,0,0)	-	5.83	๐.03	-	6.5	- 10.75
(1,1,0)	145.125	16.083	194.25	- 40.875	22.75	178.875
(1,1,1)	868.625	108.417	574๖.708	1180.625	161.75	6096.375

สาเหตุของความแตกต่างสำหรับกรณีนี้ เนื่องจากงานวิจัยของข้าพเจ้าและ บุญเรือง กวีเจริญ มีการมาแบบจำลองแผนภาพที่เฉพาะไม่ได้ไป เช่น เติร์ท วิตามินเค หีส ไนจำนวนและรูปแบบแตกต่างกัน ก้อ

3.1 งานวิจัยของข้าพเจ้าที่พิจารณาจาก



3.2 งานวิจัยของบุญเรือง เกร็ดเพ็ด ใจารดา ค



ข้อเสนอแนะในการวิจัย

จากผลการวิจัยครั้งนี้จะมีข้อเสนอแนะได้ 2 ลักษณะ คือ

1. ค่าของ β_k และ α_k ที่ได้จากการวิจัยครั้งนี้มีข้อจำกัดสำหรับแบบจำลองไอซิงแลตทิซ-กาสซันด์เฟส เช่น เตอร์คิวบิกเท่านั้น การขยายงานวิจัยให้กว้างขวางมากยิ่งขึ้นสามารถทำได้ โดยพิจารณาค่าของ β_k และ α_k ในบอดีเช่น เตอร์คิวบิกแลตทิซ และซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ

2. การนำไปใช้เพื่อศึกษาพฤติกรรมของระบบของไหลว ก๊าซ เมื่ออุณหภูมิของระบบเข้าใกล้จุดหลอมวิกฤต เช่น

2.1 ศึกษาความหนาแน่นของระบบจากสมการ

$$\rho = \sum_{k=1}^N \alpha_k \eta^{\alpha_k}$$

$$\text{เมื่อ } \eta^{-2} = 1 + f$$

2.2 ศึกษาสภาพอัดตัวได้ (compressibility) ของแบบจำลอง
ไอซิงจากสมการ

$$K_T^{-1} = \rho^2 \frac{\partial^2 (F/L)}{\partial \rho^2}$$

2.3 ศึกษาสมการสถานะของระบบจากสมการ

$$BP = \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\beta F/L}{\rho} \right)_T = \sum_{\ell \geq 1} b_\ell Z^\ell$$

$$\text{เมื่อ } Z = \rho \exp \left[- \sum b_k \rho^k \right]$$

2.4 ศึกษาความจุความร้อนที่ปริมาตรคงที่จากสมการ

$$\frac{C_V}{Lk_B} = K^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial K^2} \left(- \frac{\beta F}{L} \right) \right]$$

$$\text{หรือ } C_V = R \left[\frac{3}{2} + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k+1} \left(\frac{\partial}{\partial T} T^2 \frac{\partial}{\partial T} b_k \right) \rho^k \right]$$

2.5 ศึกษาเอนโทรปี (entropy) ของระบบต่อโมลจากสมการ

$$S = R \left[\ln \left(\frac{2\sqrt{\pi} m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\rho}{p} + \frac{3}{2} \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k+1} \frac{\partial}{\partial T} \left(T b_k \right) \rho^k \right]$$

เป็นต้น

•
-

บรรณานุกรม

บรรณานุกรม

- สมมาตร ชีตญาตี ความร่อนน้ำเพาะของไอซึ่งแลตทิซ ภายในสามมิติ ชนิดเฟซเซนเตอร์
คิวบิก เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาที่ใกล้ที่สุดสามอันดับแรก ปรินซิพาลีเพนธ์ กทม.
มหาวิทยาลัยเกรินครันทรวิโรฒ ประสานมิตร 2525, 70 หน้า อัดสำเนา
- บุญเรือง ตรีเทรัญ สภาพอัสโตยวงแบบจำลองไอซิง เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่าง
โมเลกุลข้างเดียว อันดับทีหนึ่ง สอง สาม และสี่ ปรินซิพาลีเพนธ์ กทม.
มหาวิทยาลัยเกรินครันทรวิโรฒ ประสานมิตร 2527, 120 หน้า
- Dalton, N.W. and D.W. Wood. "Critical Point Behaviour of the Ising Model with Higher - Neighbour interactions Present," Journal of Mathematical Physics. 10(7) : 1271 - 1302, July, 1969.
- Domb, C. and N W. Dalton. "Critical Statistics with Long-range Forces I. The Equivalent Neighbour Model," Proceeding of the Physical Society. 89 . 859 - 873, 1966.
- Domb, C and M S. Green Phase Transitions and Critical Phenomena III. 1st. ed , London, Academic Press, Inc., 1976. 694 p.
- Farrell, R.A ,T. Morita and P.H.E. Meijer, "cluster Expansion for the Ising Model," The Journal of Chemical Physics 45(1) : 349 - 363, July, 1966.
- Farrell, R.A and others. "Coexistence Curves for Fourth - Neighbor Ising Model on the Face Centered - Cubic Lattice," Physical Review B, 19(9) . 4703 - 4710, May, 1979
- Farrell, Richard A. and Paul H.E Meijer. "Compressibility Exponent from Ising to Mean - Field Theories," Physical Review B. 5(9) : 3747 - 3750, May, 1972.
- Huang, Kerson. Statistical Mechanics. 1st. ed., London, John Wiley and Sons, Inc., 1963. 470 p.
- Mayer, J.E. and M.G Mayer. Statistical Mechanics. 1st. ed., John Wiley and Sons, Inc., 1940. 495 p.
- Meijer, P.H.E., R.A. Farrell and L.E. Sommerfeldt. "Cluster Expansion of the Lattice - Gas Determination of the First Ten High - Temperature Coefficients," Physica. 113 . 114 - 127, 1972.
- Morita, T. and K. Hiroike. Progress of Theoretical Physics. Kyoto 25 . 537, 1961.

Onsager, L. Physical Review. 65 : 117, 1944.

Stanley, H.E. Introduction of Phase Transition and Critical Phenomena. 1st. ed., Oxford, Clarendon Press, 1971. 308 p.

Sullivan, J.T Physical Review. 67 94, 1970.

Vimolvarich, S. Influence of Long - Range Potentials on the Critical Behaviour of a Face - centered Cubic Lattice Gas Doctor's Thesis, Catholic University, 1973. 66 p. Photocopied.




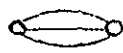

Yang, C.N. and T.D. Lee Physical Review. 87 404 - 410, 1952.

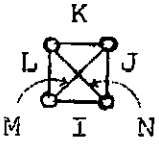
ภาคผนวก

ภาคผนวก ก. ชุดกลุ่มเลขรหัสหกหลักที่ไม่ซ้ำกันของเลขรหัส 0,1,2 และ 3

000000	000001	000002	000003	000011
000022	000033	000012	000013	000023
000111	000222	000333	000112	000113
000221	000223	000331	000332	000123
001111	002222	003333	001112	001113
002221	002223	003331	003332	001122
001133	002233	001123	002213	003312
011111	022222	033333	011112	011113
022221	022223	033331	033332	011122
011133	022211	022233	033311	033322
011123	022213	033312	011223	011332
022331	111111	222222	333333	111112
111113	222221	222223	333331	333332
111122	111133	222211	222233	333311
333322	111123	222213	333312	111222
111333	222333	111223	111332	222113
222331	333112	333221	112233	

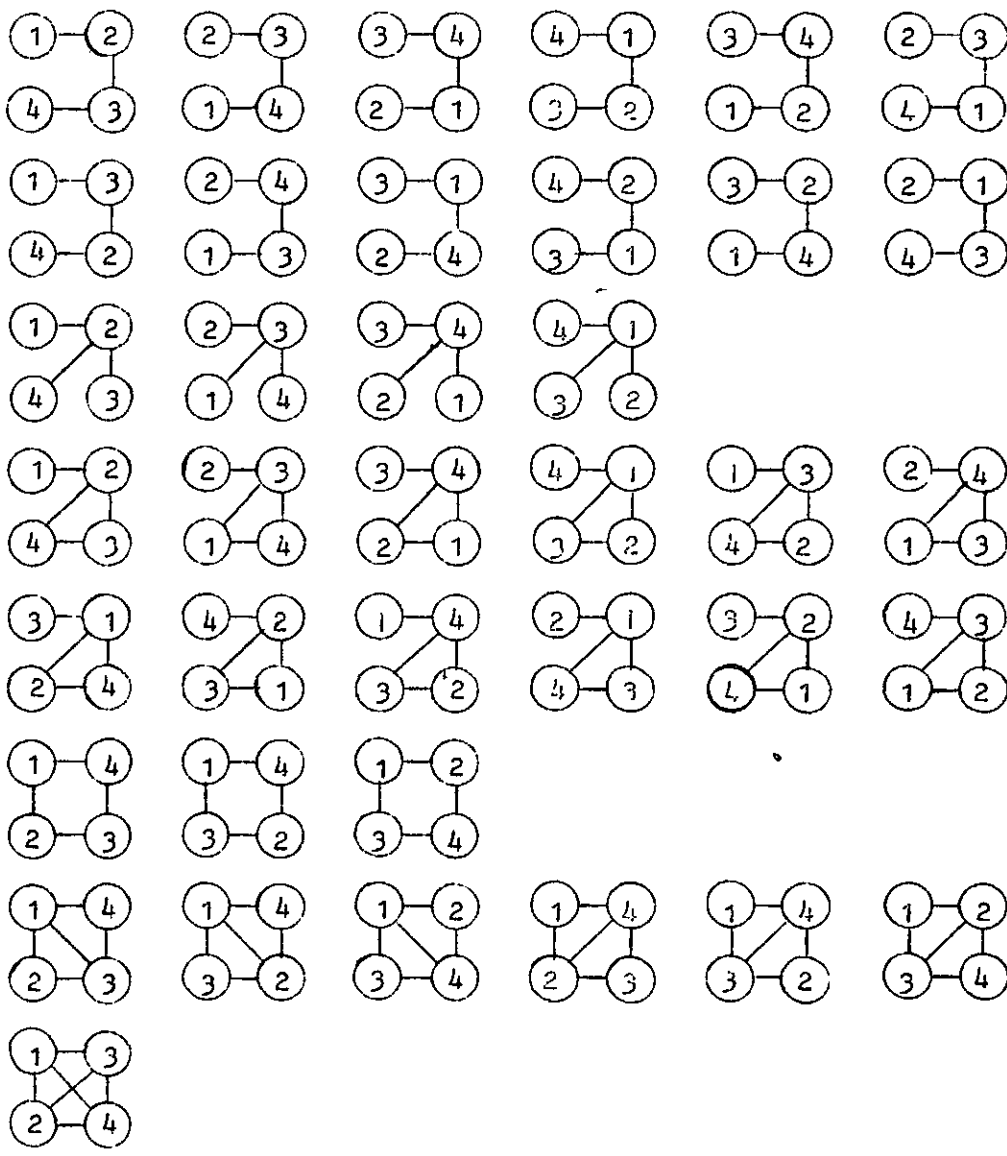
ภาพแนว ก ข. ผลของโปรแกรมทอมพิวเตอร์แสดงจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุภาพลงใน
 เฟซบนเตอริควัสดุสี่เหลี่ยม

Designation	xyz	v	A	Designation	xyz	v	A
							
1	100	12		1 ⁴	400	12	
2	010	6		2 ⁴	040	6	
3	001	24		3 ⁴	004	24	
							
333	003	48		3 ² 33	004	48	
111	300	48		1 ² 11	400	48	
332	012	48		3 ² 32	013	48	
331	102	48		332 ²	022	48	
311	201	48		3 ² 31	103	48	
211	210	24		331 ²	202	48	
321	111	24		3 ² 11	202	48	
							
1 ²	200	12		311 ²	301	48	
2 ²	020	6		2 ² 11	220	24	
3 ³	002	24		211 ²	310	24	
							
1 ³	300	12		3 ² 21	112	24	
2 ³	030	6		321 ²	211	24	
3 ³	003	24		32 ² 1	121	24	
							
				3 ² 3 ² 3	005	48	
				1 ² 1 ² 1	500	48	

Designation	xyz	v	A	Designation	xyz	v	A	
3113(2)	212	192		2211(1)	320	24	48	
3113(3)	203	96		2121(1)	320	48		
3311(1)	302	144	192	2121(3)	221	24		
3311(2)	212	72	96	2111(1)	410	96		
3311(3)	203	48	96	2111(3)	311	48		
3232(1)	122	48		1111(1)	500	144	192	
3232(3)	023	96		1111(2)	410	72	96	
3231(1)	212	96		1111(3)	401	48	96	
3231(3)	113	96						
3122(1)	221	48			=	IJKL(MN)		
3122(3)	122	48		1111(11)	000	48		
3212(1)	221	48		3111(11)	501	48		
3212(3)	122	48		2111(11)	510	48		
3211(1)	311	96		3211(11)	411	48		
3211(3)	212	48		3311(31)	303	48		
3112(1)	311	96		3333(21)	114	48		
3112(3)	212	96		3312(33)	114	48		
3131(1)	302	192		3333(22)	024	48		
3131(2)	212	96	-	3311(11)	402	48		
3131(3)	203	96		1111(22)	420	24		
3121(1)	311	96		3311(22)	222	48		
3121(3)	212	48		3232(11)	222	24		
3111(1)	401	192		3331(21)	213	48		
3111(2)	311	96		3321(11)	312	48		
3111(3)	302	96		3311(21)	312	48		

ภาพผนวก ก แบบจำลองแผนภาพทั้งหมดของ \mathfrak{S}_4 ที่เกิดจากการสับเปลี่ยนตำแหน่ง

โมเลกุลในแผนภาพ ทั้งแผนภาพที่ลดทอนได้และลดทอนไม่ได้



ภาคผนวก ง สมการพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์เฉพาะส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิ จากการศึกษาของ บุญเรือง กวีเทระญู เมื่อพิจารณาจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดที่อันดับแรกมีค่าความแรงของอันตรกิริยาเท่ากัน

F.C.C (1,0,0,0)

$$\begin{aligned}
 -\frac{\beta F(T)}{L} &= 6\rho^2 K \\
 &+ (3\rho^2 - 6\rho^3 + 3\rho^4) K^2 \\
 &+ (\rho^2 + 2\rho^3 - 11\rho^4 + 12\rho^5 - 4\rho^6) K^3 \\
 &+ (0.25\rho^2 + 8.5\rho^3 - 34.25\rho^4 + 57\rho^5 - 54\rho^6 + 30\rho^7 - \\
 &\quad 7.5\rho^8) K^4 \\
 &+ (0.05\rho^2 + 8.5\rho^3 - 10.75\rho^4 - 75\rho^5 + 285.4\rho^6 - 486\rho^7 + \\
 &\quad 423\rho^8 - 204\rho^9 + 40.8\rho^{10}) K^5
 \end{aligned}$$

F.C.C. (1,1,0,0)

$$\begin{aligned}
 -\frac{\beta F(T)}{L} &= 9\rho^2 K \\
 &+ (4.5\rho^2 - 9\rho^3 + 4.5\rho^4) K^2 \\
 &+ (1.5\rho^2 + 11\rho^3 - 40.5\rho^4 + 42\rho^5 - 14\rho^6) K^3 \\
 &+ (0.375\rho^2 + 24.75\rho^3 - 40.875\rho^4 - 64.5\rho^5 + 186\rho^6 - \\
 &\quad 141\rho^7 + 35.25\rho^8) K^4 \\
 &+ (0.075\rho^2 + 22.75\rho^3 + 173.875\rho^4 - 1090.5\rho^5 + 2308.1\rho^6 - \\
 &\quad 2682\rho^7 + 1939.5\rho^8 - 846\rho^9 + 169.2\rho^{10}) K^5 \\
 &+ (0.0125\rho^2 + 14.225\rho^3 + 500.6475\rho^4 - 1378.822\rho^5 - \\
 &\quad 2069.38\rho^6 + 14680.792\rho^7 - 30313.415\rho^8 + \\
 &\quad 34876.4\rho^9 - 24088.837\rho^{10} + 9335.04\rho^{11} - \\
 &\quad 1554.2078\rho^{12}) K^6
 \end{aligned}$$

F.C.C. (1,1,1,0)

$$\begin{aligned}
-\frac{\beta F(T)}{L} = & 21\rho^2 K \\
& +(10.5\rho^2 - 21\rho^3 + 10.5\rho^4) K^2 \\
& +(3.5\rho^2 + 103\rho^3 - 326.5\rho^4 + 330\rho^5 - 110\rho^6) K^3 \\
& +(0.875\rho^2 + 173.75\rho^3 + 1180.625\rho^4 - 6298.5\rho^5 + \\
& \quad 10062\rho^6 - 6825\rho^7 + 2418.75\rho^8) K^4 \\
& +(0.175\rho^2 + 161.75\rho^3 + 6096.375\rho^4 - 338.5\rho^5 - \\
& \quad 88193.1\rho^6 + 228722\rho^7 - 248469.5\rho^8 + 127526\rho^9 - \\
& \quad 25505.2\rho^{10}) K^5 \\
& +(0.029166\rho^2 + 91.191667\rho^3 + 12400.144\rho^4 + \\
& \quad 148185.37\rho^5 - 255782.62\rho^6 - 2031757.7\rho^7 + \\
& \quad 7944021.7\rho^8 - 12229341\rho^9 + 9718021.5\rho^{10} - \\
& \quad 3966629\rho^{11} + 661104.84\rho^{12}) K^6
\end{aligned}$$

ภาคผนวก จ การกระจายความสัมพันธ์ในสมการของ b_ℓ กับ a_k โดยอาศัยการกำหนด
ค่าของ n_k จากสมการ

$$\sum_{k=1}^{\ell-1} kn_k = \ell-1$$

การกระจายความสัมพันธ์ในสมการของ b_ℓ กับ a_k จะพิจารณาสำหรับค่าของ ℓ ตั้งแต่ 1 ถึง 4
ดังต่อไปนี้

เมื่อ $\ell=1$ จะได้ค่าของ n_k คือ

$$\sum_{k=1}^0 kn_k = 0$$

$$n_1 = 0$$

$\ell=2$ จะได้

$$\sum_{k=1}^1 kn_k = 1$$

$$n_1 = 1$$

$\ell=3$ จะได้

$$\sum_{k=1}^2 kn_k = 2$$

$$n_1 + 2n_2 = 2$$

ค่าของ n_1 และ n_2 สามารถแปรเปลี่ยนตามสมการได้ 2 กรณีคือ

ก. $n_1 = 2$ และ $n_2 = 0$ หรือ $(2, 0)$

ข. $n_1 = 0$ และ $n_2 = 1$ หรือ $(0, 1)$

$$e=4 \text{ จะได้ } \sum_{k=1}^3 kn_k = 3$$

$$n_1 + 2n_2 + 3n_3 = 3$$

ค่าของ n_1 , n_2 และ n_3 สามารถแปรเปลี่ยนตามสมการได้ 3 กรณีคือ

ก. $n_1 = 3, n_2 = 0$ และ $n_3 = 0$ หรือ $(3, 0, 0)$

ข. $n_1 = 1, n_2 = 1$ และ $n_3 = 0$ หรือ $(1, 1, 0)$

ค. $n_1 = 0, n_2 = 0$ และ $n_3 = 1$ หรือ $(0, 0, 1)$

จากผลที่ได้ของการกำหนดค่า n_k ในแต่ละกรณีของค่า e ทำให้สามารถกระจายสมการ

$$b_e = \frac{1}{e^2} \sum_{n_k} \prod_k \frac{(e\beta_k)^{n_k}}{n_k!}$$

$$\sum kn_k = e-1$$

ตามค่าของ e ได้ดังนี้

เมื่อ $e=1$ จะได้

$$b_1 = \sum_{n_k} \left[\frac{\beta_1}{n_1!} \right]_{(n_1)} = 1$$

$e=2$ จะได้

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1}{2^2} \sum_{n_k} \left[\frac{(2\beta_1)^{n_1}}{n_1!} \right]_{(n_1)} \\ &= \frac{1}{2} \beta_1 \end{aligned}$$

$l=3$ จะได้ว่า

$$\begin{aligned}
 b_3 &= \frac{1}{3^2} \sum_{n_k} \left[\frac{(3\beta_1)^{n_1}}{n_1!} \frac{(3\beta_2)^{n_2}}{n_2!} \right]_{(n_1, n_2)} \\
 &= \frac{1}{3^2} \left[\frac{(3\beta_1)^2}{2} + 3\beta_2 \right] \\
 &= \frac{1}{2}\beta_1^2 + \frac{1}{3}\beta_2
 \end{aligned}$$

$l=4$ จะได้ว่า

$$\begin{aligned}
 b_4 &= \frac{1}{4^2} \sum_{n_k} \left[\frac{(4\beta_1)^{n_1}}{n_1!} \frac{(4\beta_2)^{n_2}}{n_2!} \frac{(4\beta_3)^{n_3}}{n_3!} \right]_{(n_1, n_2, n_3)} \\
 &= \frac{1}{4^2} \left[\frac{(4\beta_1)^3}{3!} + (4\beta_1)(4\beta_2) + 4\beta_3 \right] \\
 &= \frac{2}{3}\beta_1^3 + \beta_1\beta_2 + \frac{1}{4}\beta_3
 \end{aligned}$$