

538.36
6 7610
3.0

จุดทฤษฎีเกี่ยวกับความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยา อันตบหนึ่ง และอันตบล่อง
ของระบบแม่เหล็กเฟอร์โรแบบพอดส์บนคิวบิกแลตทิซ

ปริญญาโท

ของ

วิศาล ฉัตรวาริน

11 พ.ค. 2535

โรงเรียนเตรียมวิศวกรรมศาสตร์
มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประธานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาดำเนินการ

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

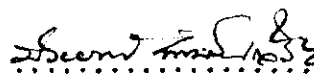
กันยายน 2529

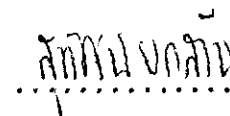
ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

178670

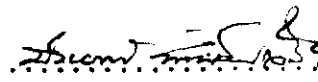
คณะกรรมการที่ปรึกษาประจำตัวนิสิตและคณะกรรมการสอบ ได้พิจารณาพิจารณาอนุมัติ
ฉบับนี้แล้ว เห็นควรรับ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต ของ
มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒได้

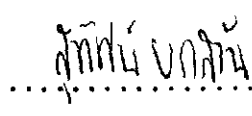
คณะกรรมการที่ปรึกษา

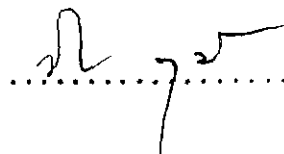
 ประธาน

 กรรมการ

คณะกรรมการสอบ

 ประธาน

 กรรมการ

 กรรมการ

ประกาศคุณูปการ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความช่วยเหลือในการถ่ายทอดความรู้ คำแนะนำ และตรวจแก้ไขจาก รองศาสตราจารย์ ดร. ประยงค์ พงษ์ทองเจริญ ประธานที่ปรึกษา ศาสตราจารย์ ดร. สุทัศน์ ยกส้าน กรรมการที่ปรึกษา และ รองศาสตราจารย์ ดร. ยัยวัฒน์ คูประตกุล กรรมการสอบ ผู้วิเศษรู้สึกซาบซึ้งและขอกราบขอบพระคุณในความเมตตาของท่าน อาจารย์ทั้งสามที่มีต่อผู้วิจัยเป็นอย่างสูง

ขอขอบพระคุณ อาจารย์ศิรินุ้ย เกียนรุ่งโรจน์ อาจารย์นันทา รัตนกมฺท คุณสุรพล ธรรมสุวรรณ์ คุณปริญญญา กระจ่างมล คุณเกรียงโกกร ฉิตยสุทธิ์ และคนอื่นในแผนกเทอร์มินัล และแผนกบริการ สำนักงานสถิติแห่งชาติ ที่กรุณาให้ความช่วยเหลือ ตลอดจนคำแนะนำทาง ด้านคอมพิวเตอร์เป็นอย่างดี

ท้ายนี้ ขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อ คุณแม่ ครูบาอาจารย์ที่เคยอบรมสั่งสอนแก่ผู้วิจัย

วิศาล ฉิตต์วาริน

สารบัญ

บทที่		หน้า
1	บทนำ	1
	ความมุ่งหมายของการวิจัย	7
	ความสำคัญของการวิจัย	7
	ขอบเขตของการวิจัย	7
	นิยามศัพท์เฉพาะ	7
2	ทฤษฎีและเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	10
	ทฤษฎีสถานามเอฟเฟกต์ไฟแบบใหม่	10
	แอมพลิจูดเฟรมของพอดตล์สำหรับอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง	
	อันดับหนึ่งและอันดับสอง	12
	เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	13
3	วิธีการคำนวณการ	17
	แอมพลิจูดเฟรมของพอดตล์สำหรับอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง	
	อันดับหนึ่งและอันดับสอง	17
	นิยามพารามิเตอร์เชิงระเบียบ	17
	ค่าเฉลี่ยของสปินแบบพอดตล์สถานะศูนย์บนแลตทิซ k ($\delta\sigma_k > 0$)	
	ในรูปของตัวปฏิบัติการดีเฟเฟอร์เรนเชียล	22
	สมการสถานะสำหรับกรณีสถานะแม่เหล็กภายนอกเป็นศูนย์	28
	สมการสำหรับคำนวณแอมพลิจูดวิกฤต	32

บทที่	หน้า
4 ผลการวิจัย	33
ค่าอุณหภูมิวิกฤตในรูป $k_B T_C / J$ สำหรับอิมเบิลคิวบิกแลตทิซเมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	34
ค่าอุณหภูมิวิกฤตในรูป $k_B T_C / J$ สำหรับบอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	35
ค่าอุณหภูมิวิกฤตในรูป $k_B T_C / J$ สำหรับเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	36
สมการความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิวิกฤตกับความแรงสัมพัทธ์ของ อันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง	39
ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับอิมเบิลคิวบิกแลตทิซ	39
ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับบอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ	40
ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ	40
5 บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ	43
บทย่อ	43
ความมุ่งหมายของการวิจัย	43
เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย	43
วิธีการดำเนินการ	43
การวิเคราะห์ผล	43
สรุปผลการวิจัย	44
อภิปรายผลการวิจัย	44
ข้อเสนอแนะ	45
บรรณานุกรม	46
ภาคผนวก	49

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ	หน้า
1. แผนภาพแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับอุณหภูมิ T และ ความดัน P กับปริมาตร V	1
2. แสดงการกลายเป็นแม่เหล็กด้วยตนเองซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ ...	4
3. แบบจำลองพอดส์สี่สปินหนึ่ง ๆ มี 2, 3 และ 4 สถานะ	5
4. แสดงแบบจำลองของแลตทิซก๊าสและความแรงของอันตรกิริยาระหว่าง สปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (J) และอันดับสอง (J')	8
5. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนของอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/$ $T_c(0)]$ กับค่าความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง อันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) สำหรับซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (s.c.) เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	37
6. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนของอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/$ $T_c(0)]$ กับค่าความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง อันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) สำหรับ $q = 2$ ในระบบ ซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (s.c.) บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (b.c.c.) และเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (f.c.c.)	38
7. แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $a(q)$ กับค่า q สำหรับซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (s.c.) บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (b.c.c.) และเฟซ เซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (f.c.c.)	41
8. แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $b(q)$ กับค่า q สำหรับซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (s.c.) บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (b.c.c.) และเฟซ เซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (f.c.c.)	42

บัญชีตาราง

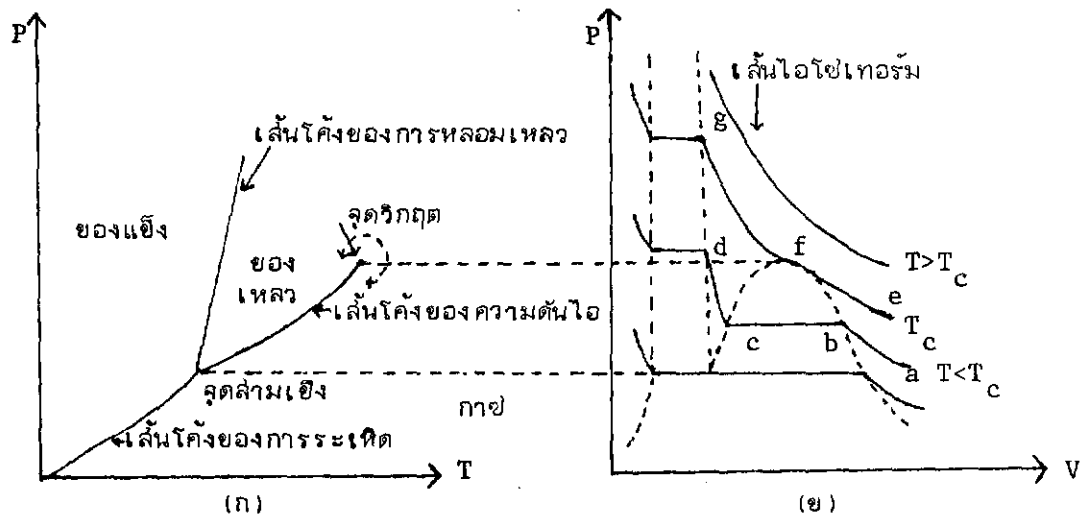
ตาราง

หน้า

1.	ค่าอุณหภูมิวิกฤตสำหรับฮีโมเปิดคิวบิกแลตทิซในรูป $k_B T_c / J$ เมื่อ $q =$ 2, 3, 4 และ 5	34
2.	ค่าอุณหภูมิวิกฤตสำหรับบอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซในรูป $k_B T_c / J$ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	35
3.	ค่าอุณหภูมิวิกฤตสำหรับเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซในรูป $k_B T_c / J$ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5	36
4.	ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับฮีโมเปิดคิวบิกแลตทิซ	39
5.	ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับบอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ	40
6.	ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ	40
7.	ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b	44

นับตั้งแต่การค้นพบของแวน เดอร์ วาลส์ (Van der Waals) เกี่ยวกับการเปลี่ยนแปลงเฟส (phase transition) ของคาร์บอนไดออกไซด์ในปี ค.ศ. 1872 เป็นต้นมา ได้มีการศึกษาพฤติกรรมไม่ต่อเนื่องของระบบภายใต้การเปลี่ยนแปลงเฟสสืบต่อกันเรื่อยมา โดยเฉพาะพฤติกรรมบริเวณจุดวิกฤติ (critical point) เช่น ความสมดุลของเหลว-ไอ (liquid-vapour equilibrium) หรือสภาวะแม่เหล็กเฟอร์โร (ferromagnetism) และอื่น ๆ

แนวคิดการเปลี่ยนแปลงสถานะของของเหลว-ไอในปัจจุบันไม่แตกต่างไปจากแนวคิดของ แวน เดอร์ วาลส์ ซึ่งสามารถอธิบายได้โดยแผนภาพ PT และ PV ดังภาพประกอบ 1 (Huang. 1963 : 34)



ภาพประกอบ 1 แผนภาพแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดัน P กับอุณหภูมิ T (ก) และ ความดัน P กับปริมาตร V (ข)

ตามภาพประกอบ 1 (ก) โปรเจกชันของพื้นผิว PpT ลงบนระนาบ PT มีผลทำให้แบ่งพื้นที่ที่พิจารณาออกเป็นสามบริเวณตามสถานะของสสารคือ สถานะของแข็ง ของเหลว และก๊าซ สถานะของของแข็งและก๊าซจะอยู่ในสถานะสัมดุลตามเส้นโค้งของการระเหิด (sublimation curve) สถานะของของเหลวและก๊าซจะอยู่ในสถานะสัมดุลตามเส้นโค้งของความดันไอ (vapour pressure curve) และสถานะของของแข็งและของเหลวจะอยู่ในสถานะสัมดุลตามเส้นของการหลอมเหลว (fusion curve) เส้นโค้งทั้งสามจะพบกันที่จุด ๆ หนึ่งซึ่งเรียกว่า จุดสามเชิง (triple point) เส้นโค้งของความดันไอจะสิ้นสุดที่จุด ๆ หนึ่ง จุดนี้คือ จุดวิกฤต (critical point) ณ จุดวิกฤตนี้ของเหลวและก๊าซสามารถเปลี่ยนกลับไปกลับมาได้อย่างต่อเนื่องโดยไม่ตัดผ่านเส้นโค้งของความดันไอ ทำให้ไม่สามารถบอกความแตกต่างระหว่างสถานะของของเหลวและก๊าซได้ (Stanley. 1971 : 2)

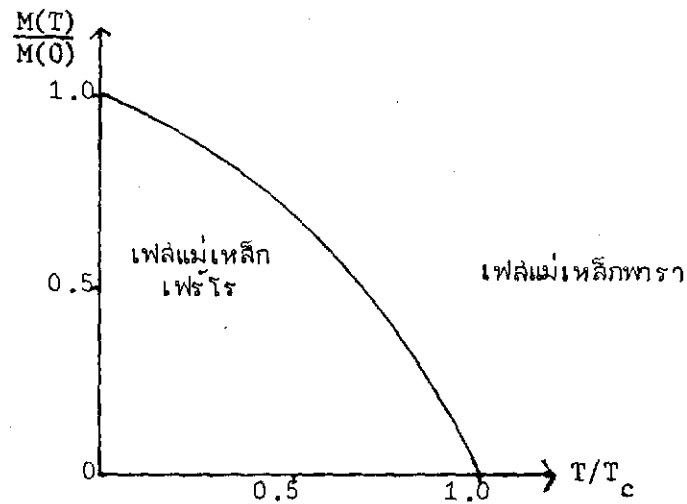
ตามภาพประกอบ 1 (ข) เส้นไอโซเทอร์ม (isotherm) abcd ($T < T_c$) เริ่มจากจุด a ในขณะที่สารอยู่ในสถานะก๊าซหรือไอ เมื่อเพิ่มความดันทีละน้อย ปริมาตรจะเริ่มลดลง มีลักษณะใกล้เคียงกับก๊าซอุดมคติ มีงานกระทำให้แก่ระบบ และมีการคายความร้อนออก โดยปริมาณทั้งสองไม่เท่ากัน ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงพลังงานภายในอย่างชัดเจน เมื่อถึงจุด b มีการควบแน่นเกิดหยดของเหลวกลายเป็นสองสถานะที่อุณหภูมิและความดันเท่ากัน แต่ความหนาแน่นหรือการแบ่งส่วนตามสถานะไม่เท่ากัน ในระหว่างขบวนการบนเส้น bc อุณหภูมิและความดันคงที่แต่ปริมาตรลดลงอย่างเห็นได้ชัด ปริมาณงานและความร้อนที่คายออกแตกต่างกันมากทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงภายในมาก ส่วนของสารในสถานะไอลดลงเรื่อย ๆ ส่วนที่อยู่ในสถานะของเหลวเพิ่มขึ้นเรื่อย ๆ ในตอนนี่ของขบวนการมีทั้งของเหลวและไอพร้อมกันอย่างสัมดุล ไอและของเหลวในตอนนี้เป็นไออิ่มตัว (saturated vapour) และของเหลวอิ่มตัว (saturated liquid) ความดันที่ทำให้เกิดไออิ่มตัวและของเหลวอิ่มตัวเรียกว่า ความดันไอ (vapour pressure, $P(T)$) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ ที่จุด c สถานะของไอจะกลายเป็นสถานะของของเหลวอิ่มตัวหมด ถ้าต้องการลดปริมาตรจากจุด c ไปยังจุด d จะต้องเพิ่มความดันมาก ตามขบวนการที่กล่าวมาแล้ว ที่เส้นไอโซเทอร์มอุณหภูมิสูงขึ้นไปจะต้องเพิ่มความดัน

มากยิ่งขึ้นเพื่อลดปริมาณลงจนถึงเส้นไอโซเทอร์ม efg ที่จุด f ลักษณะของของเหลวอิมิตัว และไออิมิตัวจะเหมือนกัน ณ จุดนี้ความลาดชันของเส้นไอโซเทอร์มเป็นศูนย์ จุด f นี้เรียกว่า จุดวิกฤต และอุณหภูมิของเส้นไอโซเทอร์มนี้เรียกว่า อุณหภูมิวิกฤต (critical temperature)¹

ใน ค.ศ. 1907 เพียร์ไวส์ (Pierre Weiss) ได้เสนอทฤษฎีเกี่ยวกับสภาวะแม่เหล็กเฟอร์โร โดยกำหนดว่าโมเมนต์แม่เหล็ก (magnetic moment) วางตัวอยู่ในตำแหน่งที่แน่นอนบนแลตทิซไซต์ (lattice site) มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกันในสนามโมเลกุล และเป็นสัดส่วนกับค่าเฉลี่ยค่าความเป็นแม่เหล็ก (magnetization, M) (Stanley. 1971 : 8) สารแม่เหล็กอาจกลายเป็นแม่เหล็กได้โดยการใช้สนามแม่เหล็ก ทำให้สปิน (spins) ชี้นอกทิศทางเดียวกัน แสดงอำนาจแม่เหล็กออกมาภายนอกได้ หรือโดยการลดอุณหภูมิซึ่งมีผลให้สปิน (spins) ปรับตัวเองชี้นอกทิศทางเดียวกัน กูรี (Curie) พบว่าสารที่แสดงสภาวะแม่เหล็กพารา (paramagnetism) มีสมบัติสำคัญอย่างหนึ่งคือ ค่าความเป็นแม่เหล็กของสารเป็นสัดส่วนโดยตรงกับค่าเหนี่ยวนำแม่เหล็ก (magnetic induction, B) และเป็นสัดส่วนกลับกับอุณหภูมิ (T) ดังสมการ $M = CB/T$ เมื่อ C เป็นค่าคงที่ ความสัมพันธ์นี้เรียกว่า กฎกูรี (Curie's law) เมื่ออุณหภูมิของสารลดลงจนถึงอุณหภูมิกำหนดหนึ่งซึ่งเรียกว่า อุณหภูมิคูรี (Curie temperature) สารที่แสดงสภาวะแม่เหล็กพาราจะเปลี่ยนเป็นสารที่แสดงสภาวะแม่เหล็กเฟอร์โร ดังภาพประกอบ 2²

¹F.W. Sears and M.W. Zemansky. University Physics. pp. 394-407.

²Alexander O.E. Animulu. Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids. pp. 356-365.



ภาพประกอบ 2 แสดงการกลายเป็นแม่เหล็กด้วยตนเอง ซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ

การเปลี่ยนแปลงของระบบของเหลว-ไอ ของ แวน เดอร์ วาลส์ ที่จุดวิกฤต หรือ การเปลี่ยนแปลงของระบบแม่เหล็กของออร์ที่จุดครุท ทั้งสองระบบมีลักษณะการเปลี่ยนแปลงแบบ เดียวกัน พฤติกรรมนี้เรียกว่า การเปลี่ยนแปลงเฟลล์ เออเรนเฟลด์ (Ehrenfest) ได้ จำแนกชนิดของการเปลี่ยนแปลงเฟลล์³ เช่น การเปลี่ยนแปลงของแข็ง-ของเหลว-ไอ (solid-liquid-vapour transitions) ว่าเป็นการเปลี่ยนแปลงอันดับที่หนึ่ง (first-order transitions) หรือการเปลี่ยนแปลงตัวนำยิ่งยวด (superconducting transition) ว่าเป็นการเปลี่ยนแปลงอันดับที่สอง (second-order transitions) เป็นต้น

ในบรรดาแบบจำลองต่าง ๆ เพื่ออธิบายลัการแม่เหล็กเฟอร์โร แบบจำลองไอซิง

³A.B. Pippard. The Element of Classical Thermodynamics. pp. 136-159.

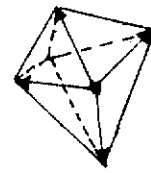
(Ising model) เสนอโดย ไอซิง (Ising. 1925 : 613) เป็นแบบจำลองของสารแม่เหล็กเฟอร์โรที่มีการศึกษากันแพร่หลาย แบบจำลองนี้กำหนดว่าโมเลกุลแต่ละโมเลกุลมีสปิน 2 สถานะคือ สถานะสปินชี้ขึ้น (\uparrow) หรือสถานะสปินชี้ลง (\downarrow) อันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลเกิดขึ้นได้สามลักษณะคือ $|\uparrow\uparrow|$, $|\uparrow\downarrow|$ และ $|\downarrow\downarrow|$ หรือ $|\downarrow\uparrow|$ ถ้าอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลมีทิศทางขนานกัน (parallel) จะเกิดสถานะแม่เหล็กเฟอร์โรและมีค่าพลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาเท่ากับ $-J$ และถ้าอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลมีทิศตรงข้าม (antiparallel) จะเกิดสถานะแม่เหล็กแอนติเฟอร์โร (antiferromagnetism) และมีค่าพลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาเท่ากับ $+J$ ต่อมาได้มีการขยายสถานะของสปินมากกว่า 2 สถานะ เช่น แบบจำลองเอชกิน-เทลเลอร์ (Ashkin-Teller model) ซึ่งให้สปินหนึ่ง ๆ มี 4 สถานะ (Ashkin and Teller. 1943 : 178) ในปี ค.ศ. 1952 พอตส์ (Potts) เสนอแบบจำลองใหม่เรียกว่า แบบจำลองพอตส์ (Potts model) อีก 2 ปีต่อมา กิฮารา (Kihara. 1954 : 681) เสนอแบบจำลองซึ่งมีลักษณะสำคัญเช่นเดียวกับแบบจำลองพอตส์ แบบจำลองพอตส์และแบบจำลองกิฮาราถือว่าสปินหนึ่ง ๆ มีสถานะภายในทั้งหมด q สถานะดังตัวอย่างที่แสดงในภาพประกอบ 3 สปินหนึ่ง ๆ อาจอยู่ในสถานะใดสถานะหนึ่งได้ แบบจำลองไอซิงและแบบจำลองเอชกิน-เทลเลอร์ ซึ่งเป็นกรณีเฉพาะของแบบจำลองพอตส์ ซึ่งมี $q = 2$ และ $q = 4$ ตามลำดับ (Wu. 1982 : 236)



$q = 2$



$q = 3$



$q = 4$

ภาพประกอบ 3 แบบจำลองพอตส์สปินหนึ่ง ๆ มี 2, 3 และ 4 สถานะ

ในกรณี 1 มิติ และ 2 มิติ การหาค่าอุณหภูมิวิกฤตที่คิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่าง
 สปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (first nearest neighbor interactions) มีผู้หาคำตอบได้
 แน่นนอน (exact solution) โดยเฉพาะกรณีแบบจำลองไอซิง (Onsager, 1944 :
 177, Yang, 1952 : 805) ส่วนกรณี 3 มิติหรือมากกว่า ยังไม่สามารถหาคำตอบได้
 แน่นนอน จึงต้องอาศัยการประมาณค่าโดยวิธีต่าง ๆ ได้แก่ การประมาณค่าเฉลี่ย (mean-
 field approximation) หรือการประมาณค่าสนามเอฟเฟกตีฟ (effective-field
 approximation) การประมาณค่าของเบเท (Bethe approximation) วิธีการ
 กระจายอนุกรม (series expansion method) วิธีรีนอร์มัลไลเซชันกรุป (re-
 normalization-group approach) และอื่น ๆ

วิธีการประมาณค่าต่าง ๆ ได้รับการปรับปรุงเพื่อทำให้ผลการคำนวณดีขึ้นเรื่อยมา
 ใน ค.ศ. 1978 ฮอนมุระ และ คาเนโยชิ (Honnura and Kaneyoshi) เสนอทฤษฎี
 สนามเอฟเฟกตีฟแบบใหม่ (new effective-field theory) และได้ประยุกต์กับแบบ
 จำลองไอซิง (1978) และกับแบบจำลองพอดล์ (1984) เพื่อหาค่าอุณหภูมิวิกฤต โดยคิด
 เฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับที่หนึ่ง สำหรับกรณีแบบจำลองไอซิงค่าที่คำนวณ
 ได้ดีกว่าการประมาณค่าแบบ เบเท-เพียร์ล (Bethe-Peierls approximation)

การวิจัยครั้งนี้ใช้ทฤษฎีสถานะเอฟเฟกตีฟแบบใหม่เพื่อหาค่าอุณหภูมิวิกฤต โดยคิด
 อันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (first and second nearest
 neighbor interactions) กับแบบจำลองพอดล์บนขีมีเปิดคิวบิกแลตทิซ (simple cubic
 lattice, s.c.) บอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ (body-centered cubic lattice,
 b.c.c.) และเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ (face-centered cubic lattice,
 f.c.c.)

ความมุ่งหมายของการวิจัย

เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ของค่าอุณหภูมิวิกฤตกับความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินของแบบจำลองพอตส์บนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

ความสำคัญของการวิจัย

วิธีและผลการวิจัยเป็นแนวทางสำหรับศึกษาให้เข้าใจธรรมชาติของอันตรกิริยาระหว่างสปิน

ขอบเขตของการวิจัย

การวิจัยครั้งนี้ใช้ทฤษฎีสถานามเอฟเฟกต์ไฟแบบใหม่และเอกลักษณ์ที่หนึ่งของคอลเลน (first Callen identity) กับแบบจำลองพอตส์บน ซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ โดยคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง ความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยากำหนดเป็นอัตราส่วน $\rho = J'/J$ และคิดค่า ρ ระหว่าง 0 ถึง 1 โดยเพิ่มค่าครั้งละ 0.1 และไม่คิดส่วนแม่เหล็กภายนอก

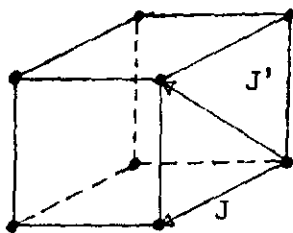
นิยามศัพท์เฉพาะ

1. อุณหภูมิวิกฤตหรืออุณหภูมิคูรี (critical or Curie temperature) คือ อุณหภูมิที่ทำให้ค่าความเป็นแม่เหล็กเริ่มมีค่า ($M \geq 0$)
2. แบบจำลองพอตส์ (Potts model) เป็นแบบจำลองที่ใช้อธิบายการเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร สปินจะมีการวางตัวในตำแหน่งและสถานะที่แน่นอนบนแลตทิซไซต์ โดยสปินหนึ่ง ๆ มีสถานะภายในทั้งหมด q สถานะ และสปินบนแลตทิซไซต์อันตรกิริยาซึ่งกันและกัน

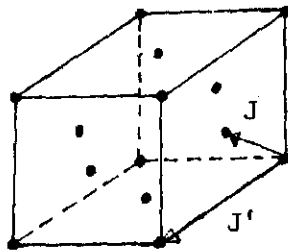
3. ซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (simple cubic lattice) มีลักษณะโครงสร้างเป็นรูปลูกบาศก์แต่ละด้านยาวเท่ากัน และมีโมเลกุลอยู่เฉพาะตามมุมต่าง ๆ ของลูกบาศก์เท่านั้น ดังภาพประกอบ 4 ก

4. บอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ (body-centered cubic lattice) มีลักษณะโครงสร้างเหมือนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ แต่มีโมเลกุลหนึ่งอยู่ตรงกลางของลูกบาศก์ ดังภาพประกอบ 4 ข

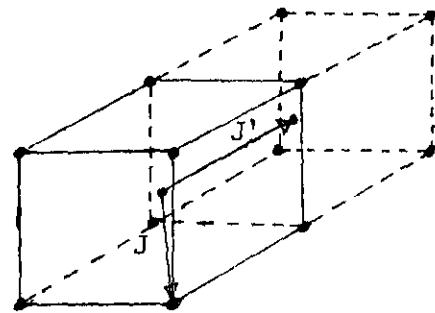
5. เฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ (face-centered cubic lattice) มีลักษณะโครงสร้างเหมือนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ แต่มีโมเลกุลอยู่ตามจุดกึ่งกลางของผิวแต่ละด้านของลูกบาศก์เพิ่มขึ้นอีก ดังภาพประกอบ 4 ค



ก. ซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ



ค. เฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ



ข. บอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ

ภาพประกอบ 4 แสดงแบบจำลองของแลตทิซกายซ์ และความแรงของอันตรกิริยาระหว่างสปีนใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (J) และอันดับสอง (J')

6. อันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (first nearest neighbor interaction) เป็นอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลที่ระยะห่างเป็น $1, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}$ เท่าของความยาวแต่ละด้านของคิวบิกชนิดซีมเปิล บอดี้เซนเตอร์ และเฟซเซนเตอร์ตามลำดับ ดังภาพประกอบ 4

7. อันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับสอง (second nearest neighbor interaction) เป็นอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลที่ระยะห่างเป็น $\sqrt{2}, 1, 1$ เท่าของความยาวแต่ละด้านของคิวบิกชนิดซีมเปิล บอดี้เซนเตอร์ และเฟซเซนเตอร์ ตามลำดับ ดังภาพประกอบ 4

ทฤษฎีและ เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในการศึกษาค่าอุณหภูมิกฎในในงานวิจัยนี้ ผู้วิจัยใช้ทฤษฎีสันนาม เอฟเฟคตีฟแบบใหม่ ของฮอนมูระและคาเนโยชิ (HK-MFA) เพื่อแก้ปัญหาแบบจำลองพอดล์ บินแลตทิซแบบซิมเพิลคิวบิก บอติเชนเตอร์คิวบิก และเพย์เชนเตอร์คิวบิก โดยคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง อันดับหนึ่งและอันดับสอง

ทฤษฎีที่ใช้ในงานวิจัย

1. ทฤษฎีสันนามเอฟเฟคตีฟแบบใหม่ (The New Effective-Field Theory)

ทฤษฎีสันนามเอฟเฟคตีฟแบบใหม่ โดยสาระสำคัญยังเป็นทฤษฎีสันนามเอฟเฟคตีฟแบบเดิม (effective-field theory) ซึ่งสรุปได้ว่า สปิน (spin) หนึ่ง ๆ ได้รับอันตรกิริยาจากสปินอื่น ๆ ที่อยู่บริเวณใกล้เคียงด้วยค่าเฉลี่ยค่าหนึ่ง ค่าเฉลี่ยนี้เป็นค่าที่ได้จากอันตรกิริยาของสปิน (spins) อื่น ๆ ที่ไม่ใช่สปินบนอะตอมศูนย์กลาง (central atom, σ_j) ผลของอันตรกิริยาทั้งหมดแทนด้วยสันนามแม่เหล็กเอฟเฟคตีฟ (effective magnetic field, H_j)¹ สามารถเขียนในรูปของแฮมิลโตเนียนดังนี้

$$H = \sum_j H_j \sigma_j$$

เมื่อ

$$H_j = - \sum_l \frac{1}{2} J_{jl} \langle \sigma_l \rangle$$

¹Federick Rief. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics. p. 430.

วิธีการประมาณแบบนี้เรียกว่า การประมาณค่าเฉลี่ย (mean-field approximation) การประมาณค่าสนามโมเลกุล (molecular-field approximation) หรือการประมาณค่าสนามเอฟเฟกต์ (effective-field approximation) ต่อมาในปี ค.ศ. 1978 ออนูระและคาเนโยชิ ได้พัฒนาทฤษฎีสถานะเอฟเฟกต์โดยใช้ตัวปฏิบัติการดิฟเฟอเรนเชียล (differential operator, $D_n = \partial/\partial X_n$) ซึ่งมีคุณสมบัติเมื่อกระทำกับฟังก์ชันที่หาค่าได้ (analytic function) ดังนี้

ให้ตัวปฏิบัติการ (operator) $e^{\alpha D_n}$ กระทำกับฟังก์ชันหาค่าได้ $f(X_0, X_1, \dots, X_n, \dots, X_{q-1})$

$$e^{\alpha D_n} f = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\alpha D_n)^s}{s!} f$$

กระจาย $f(X_0, X_1, \dots, X_n + \alpha, \dots, X_{q-1})$ เป็นอนุกรมเทเลอร์ (Taylor's series) จะได้

$$\begin{aligned} f(X_0, X_1, \dots, X_n + \alpha, \dots, X_{q-1}) &= f(X_0, X_1, \dots, X_n, \dots, X_{q-1}) \\ &+ \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\alpha^s}{s!} \frac{\partial^s f}{\partial X_n^s} \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\alpha D_n)^s}{s!} f \end{aligned}$$

จะเห็นได้ว่า

$$e^{\alpha D_n} f(X_0, X_1, \dots, X_n, \dots, X_{q-1}) = f(X_0, X_1, \dots, X_n + \alpha, \dots, X_{q-1})$$

ซึ่งได้ว่าเมื่อนำ $e^{\alpha D_n}$ ไปกระทำกับ $f(X_0, \dots, X_n, \dots, X_{q-1})$ ผลที่ได้จะเป็นฟังก์ชันเดิมซึ่งมีตัวแปร X_n เปลี่ยนเป็น $X_n + \alpha$ ทฤษฎีใหม่ของอนูระและคาเนโยชินี้เมื่อ

นำไปประยุกต์กับการหาค่าเฉลี่ยของปริมาณที่เกี่ยวข้องกับอันตรกิริยาระหว่างสปิน คือทฤษฎี
สนามเอฟเฟกตีฟแบบใหม่

2. แอมิลโตเนียนของพอตส์สำหรับอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง อันดับหนึ่งและ
อันดับสอง (Potts Hamiltonian for first and second nearest neighbor
interactions)

$$H = -q \sum_{i,j} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - q \sum_{i,l} J'_{il} \delta_{\sigma_i, \sigma_l} - q \sum_i h_i \delta_{\sigma_i, 0}$$

q คือจำนวนสถานะของสปินแบบพอตส์ (Potts spin)

σ_i คือสปินพอตส์ มี q สถานะ มีค่าตั้งแต่ $0, 1, 2, \dots, q-1$

J_{ij} คืออันตรกิริยาระหว่างสปิน σ_i และ σ_j ของสปินใกล้เคียง อันดับหนึ่ง

J'_{il} คืออันตรกิริยาระหว่างสปิน σ_i และ σ_l ของสปินใกล้เคียง อันดับสอง

$\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ คือฟังก์ชันครอนเนกเกอร์ (Kronecker function)

มีค่าเป็นหนึ่ง (1) ถ้า σ_i และ σ_j อยู่ในสถานะเดียวกันคือขึ้นในทิศทางเดียวกัน

มีค่าเป็นศูนย์ (0) ถ้า σ_i และ σ_j มีสถานะต่างกัน

h_i คือสนามแม่เหล็กภายนอกที่ตำแหน่งแลตทิซ i เราใช้สนามภายนอกเพื่อเป็น
ทิศทางอ้างอิง (reference direction) ตามข้างบนสนามแม่เหล็กภายนอก
อยู่ในทิศทางเดียวกับสถานะศูนย์ของ σ_i

การกลายเป็นแม่เหล็กวัดด้วยพารามิเตอร์เชิงระเบียบ (order parameter) ซึ่ง
แทนด้วย m_k สำหรับแบบจำลองพอตส์ พารามิเตอร์เชิงระเบียบ เป็น

$$m_k = \frac{q \delta_{\sigma_k, 0} - 1}{q - 1}$$

จะเห็นว่าถ้าสปินที่แลตทิซ k (σ_k) อยู่ในสถานะศูนย์ (0) $\delta_{\sigma_k,0} = 1$ ทำให้ค่า $m_k = 1$ ถ้าสปินที่แลตทิซ k (σ_k) อยู่ในสถานะใด ๆ ก็ได้ใน q สถานะ โอกาสที่ σ_k อยู่ในสถานะ ศูนย์ (0) ก็จะเป็นเพียง $\frac{1}{q}$ เท่านั้น $q \delta_{\sigma_k,0} - 1 = 0$ ทำให้ค่า $m_k = 0$

m_k จะมีค่าอยู่ระหว่าง 0 และ 1 คือในเฟสแม่เหล็กพารา (paramagnetic phase) $m_k = 0$ เมื่ออุณหภูมิลดลงจนถึงอุณหภูมิวิกฤต (T_c) m_k เริ่มมีค่าและเพิ่มขึ้นเรื่อย ๆ จนถึง 1 ที่ $T = 0$ ดังภาพประกอบ 2 (Wu. 1982 : 237)

และฟังก์ชันการแบ่ง (partition function) ของระบบสปิน (spins) จะเป็น

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}$$

$$\text{ในเมื่อ} \quad \sum_{\{\sigma_i\}} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_n}$$

\sum_{σ_1} คือผลบวกทุกสถานะของสปิน σ_1

$\beta = 1/k_B T$ ซึ่ง k_B เป็นค่าคงโบลต์ซมันน์ (Boltzmann constant)

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

มิตเตกและสตีเฟน (Mittag and Stephen. 1974 : 109) ได้ใช้ทฤษฎีสันนามเฉลี่ยศึกษาการเปลี่ยนแปลง เฟสกับแบบจำลองพอดด์ ผลการวิจัยสรุปได้ว่ามีการเปลี่ยนแปลง เฟสอันดับที่หนึ่ง ในกรณี $q \geq 3$ ผลที่ได้จากทฤษฎีสันนามเฉลี่ยสอดคล้องและเหมาะสมสำหรับใช้ อธิบายการเปลี่ยนแปลง เฟสของแบบจำลองพอดด์ชนิด 2 มิติหรือมากกว่า ในกรณีค่า q มีค่า มาก ฮอนมูระและคาเนโยชิ (Honmura and Kaneyoshi. 1978 : 635) เสนอทฤษฎี สันนามเอฟเฟกต์ฟแบบใหม่ซึ่งพัฒนามาจากทฤษฎีสันนามเฉลี่ย โดยใช้ตัวปฏิบัติการดีเฟอเรนเชียล ใช้หาค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) ของแบบจำลองไอซิง โดยใช้เอกลักษณ์ที่หนึ่งของคัลเลน

ในการศึกษาของฮอนจูระและคาเนโยชิไม่ได้คิดสหสัมพันธ์ระหว่างสปิน และคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง ค่าอุณหภูมิวิกฤตที่ได้มีค่าต่ำกว่าการประมาณค่าของไวส์ (Weiss approximation) ซึ่งให้ค่าอุณหภูมิวิกฤตเป็น $k_B T_c / J = z$ เมื่อ z เป็นจำนวนสปินใกล้เคียง ค่าอุณหภูมิวิกฤตของฮอนจูระและคาเนโยชิเปรียบเทียบกับค่าอุณหภูมิวิกฤตของไวส์ (T_c / T_{cw}) สำหรับระบบที่มีจำนวนสปินใกล้เคียง (z) เป็น 2, 4 และ 6 ได้ผลเป็น 0.833, 0.904 และ 0.931 ตามลำดับ แต่ผลที่ได้มีค่าน้อยกว่าวิธีของโออูชิ (Oguchi, 1966 : 998) สำหรับ $z = 6$ ซึ่งได้ค่าเป็น 0.95 ในปี ค.ศ. 1979 ฮอนจูระและคาเนโยชิได้ปรับปรุงทฤษฎีสนามเอฟเฟกตีฟแบบใหม่ และหาค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) ของแบบจำลองไอซิง โดยใช้เอกสภพอันดับหนึ่งของสเกลอน ในคราวนี้ได้คำนึงถึงสหสัมพันธ์ระหว่างสปินด้วยและคิดอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งโดยพิจารณาในรูปของชุดสปินเล็ก ๆ (small cluster of spins) ในการศึกษาฮอนจูระและคาเนโยชิถือว่าอันตรกิริยาแลกเปลี่ยน (exchange interactions) ภายในชุดสปินมีค่าแน่นอน และชุดสปินมีอันตรกิริยากับส่วนที่เหลือด้วยสนามเอฟเฟกตีฟ จำนวนที่เหลือในผลึกที่ทำอันตรกิริยากับชุดสปินแทนด้วย "n" ค่าเปรียบเทียบของอุณหภูมิวิกฤตกับค่าอุณหภูมิวิกฤตของไวส์ (T_c / T_{cw}) ที่ได้ดีขึ้น ค่าที่ได้ใกล้เคียงกับค่าของฮอนซาเกอร์ (Onsager, 1944 : 117) ของไซค์ และคนอื่น ๆ (Sykes and others, 1972 : 640) ในกรณีว่า n มากขึ้น ดังแสดงในตาราง

ตารางค่าของ T_c / T_{cw} สำหรับแลตทิซเชิงเส้น (linear chain) ($z = 2$) แลตทิซชนิดจัตุรัส (square lattice) ($z = 4$) และซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (simple cubic lattice) ($z = 6$) โดยค่าของ $T_{cw} = zJ/4k$

z	2	4	4	4	6	6	6	6	6	6
n	2		0	4		0	6	1	2	3
T_c / T_{cw}	0	0.568*	0.772	0.727	0.752**	0.846	0.821	0.851	0.832	0.844

* Onsager (1944)

** Sykes and others (1972)

คาเนโยชิ, ฟิตติपालดี, ฮอนมุระ และมานาเบ (Kaneyoshi, Fittipaldi, Hommura and Manabe. 1981 : 481) ใช้ทฤษฎีสหสัมพันธ์สนามเอฟเฟกต์แบบใหม่ (new correlated-effective field theory) และเอกลักษณ์ที่สองของคลื่นเคลื่อนที่แบบจำลองไอซิง หาค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) และค่าพารามิเตอร์สหสัมพันธ์สนามเอฟเฟกต์ (correlated effective-field parameter, λ_c) บนแลตทิซชนิด s.c.c., b.c.c. และ f.c.c. โดยคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (J) ได้ความสัมพันธ์กับจำนวนสปินใกล้เคียง (z) ดังสมการ $k_B T_c / J = 2 / \ln[z(z-2)]$ และ $\lambda_c = 1/(z-1)$ ตามลำดับ ค่าอุณหภูมิวิกฤตที่ได้สอดคล้องกับค่าอุณหภูมิวิกฤตที่หาได้จากการประมาณค่าของเบเท-เพิร์ล (Bethe-Peierls approximation) : อุณหภูมิวิกฤตของเบเท-เพิร์ล ในรูป $k_B T_c / J$ สำหรับระบบที่มีจำนวนสปิน (z) เป็น 2, 3, 4, 6, 8 และ 12 มีค่าเป็น 0.0, 1.8205, 2.8854, 4.9326, 6.9521 และ 10.9696 ตามลำดับ ซึ่งเป็นค่าที่ดีกว่าค่าที่ได้จากวิธีของฮอนมุระและคาเนโยชิ ในปี 1979 หลังจากประสบความสำเร็จในการใช้ทฤษฎีสหสัมพันธ์สนามเอฟเฟกต์แบบใหม่กับแบบจำลองไอซิง ฮอนมุระ, ซาเมนโต, ซาลิส และ ฟิตติपालดี (Hommura, Sarmiento, Tsallis and Fittipaldi. 1984 : 2761) ได้ขยายทฤษฎีสหสัมพันธ์สนามเอฟเฟกต์แบบใหม่กับแบบจำลองพอดส์โดยอาศัยเอกลักษณ์หนึ่งของคลื่นการศึกษานี้ไม่ได้คิดสหสัมพันธ์ระหว่างสปินและคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง ผลการศึกษาสรุปได้ว่าค่าอุณหภูมิวิกฤตขึ้นกับค่าของจำนวนสถานะ (q) และค่าจำนวนสปินใกล้เคียง (z) สำหรับกรณีแบบจำลองไอซิง ดาลตันและวูด² (Dalton and Wood. 1967 : 464) ใช้วิธีการกระจายอนุกรม (series expansions) ที่ประกอบด้วยความแรงของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (J) และอันดับสอง (J') โดยกำหนดความสัมพันธ์ของความแรงสัมพันธ์ด้วยสมการ $\rho = J'/J$ ซึ่งมีค่าระหว่าง 0 ถึง

²Domb C. and M.S. Green. Phase Transitions and Critical Phenomena III. p. 464.

1 ได้พบว่า ผลหุ้มีรึกฤตเป็นฟังก์ชันของความแรงสัมพันธ์ (ρ) ดังสมการ $T_c(\rho) = T_c(0) [1 + c\rho]$ เมื่อ c มีค่า 1.45, 1.35, 2.47, 0.85 และ 0.61 สำหรับแลตทิซ อยนิตจัตุรัส (square lattice, s.q.) ระนาบลำมเหลี่ยม (plane triangular, p.t.), s.c., b.c.c. และ f.c.c. ตามลำดับ

วิธีการดำเนินการ

การศึกษาค่าอุดมภูมิวิฤตของแบบจำลองพอดล์บนแลตทิซชนิดซิมเปิลคิวบิก บอต์
เช่นเตอรัคิวบิก และเพชเชนเตอรัคิวบิก โดยคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียง
อันดับหนึ่ง (J) และอันดับสอง (J') ดำเนินตามขั้นตอนต่อไปนี้

พิจารณาแฮมิลโตเนียนของพอดล์สำหรับอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง
และอันดับสอง

$$H = -q \sum_{i,j} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - q \sum_{i,l} J'_{il} \delta_{\sigma_i, \sigma_l} - q \sum_i h_i \delta_{\sigma_i, 0} \quad (1)$$

พารามิเตอร์เชิงระเบียบ (order parameter) สำหรับแบบจำลองพอดล์ เป็น

$$m_k = \frac{q \delta_{\sigma_k, 0} - 1}{q - 1} \quad (2)$$

เมื่อแยกแฮมิลโตเนียนออกเป็นสองส่วน

$$H = H_0 + H' \quad (3)$$

ในเมื่อ

$$H_0 = -q \sum_j J_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} - q \sum_r J'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} - q h_k \delta_{\sigma_k, 0} \quad (4)$$

$$\text{และ } H' = -q \sum'_{i,j} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - q \sum'_{i,r} J'_{ir} \delta_{\sigma_i, \sigma_r} - q \sum'_i h_i \delta_{\sigma_i, 0} \quad (5)$$

ผลบวกสองเทอมในสมการ (4) เป็นผลบวกทั้งหมดทุกสปินที่อยู่ใกล้เคียง อันดับหนึ่ง
และอันดับสองตามลำดับกับสปินศูนย์กลาง k (σ_k) σ_r เป็นสปินพอดล์บริเวณใกล้เคียง
อันดับสอง J_{kj} และ J'_{kr} เป็นอันตรกิริยาระหว่างสปินอันดับหนึ่ง และอันดับสอง ตามลำดับ

ผลบวกสามเทอมในสมการ (5) แทนด้วยสัญลักษณ์โดย Σ' หมายถึงการหาผลบวกโดยไม่รวมในกรณี $i = k$

ฟังก์ชันการแบ่งของระบบสปิน (spins) นี้จะเป็น

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \\ &= \Sigma_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \end{aligned}$$

ในเมื่อ $\Sigma_{\{\sigma_i\}} = \Sigma_{\sigma_1} \Sigma_{\sigma_2} \dots \Sigma_{\sigma_n}$

และ Σ_{σ_1} คือผลบวกทุกสถานะของสปิน σ_1

$\beta = 1/k_B T$ ซึ่ง k_B เป็นค่าคงที่โบลต์ซมาน (Boltzmann constant)

พิจารณาค่าเฉลี่ยของฟังก์ชัน $f(\sigma_k)$

$$\langle f(\sigma_k) \rangle = \frac{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} [f(\sigma_k) e^{-\beta H}]}{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}} \quad (6)$$

$$= \frac{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} [f(\sigma_k) e^{-\beta(H_0 + H')}]}{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}}$$

$$= \frac{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} [\text{Tr}_{\sigma_k} [f(\sigma_k) e^{-\beta H_0}] e^{-\beta H'}]}{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}} \quad (7)$$

เมื่อ $\{\sigma_i\}'$ ไม่รวมในกรณี $i = k$ สมการ (7) เขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle f(\sigma_k) \rangle = \frac{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \left[\frac{\text{Tr}_{\sigma_k} [f(\sigma_k) e^{-\beta H_0}] / \text{Tr}_{\sigma_k} e^{-\beta H_0}}{\text{Tr}_{\sigma_k} e^{-\beta H_0}} e^{-\beta(H_0 + H')} \right]}{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}} \quad (8)$$

$$= \frac{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \left[\frac{\text{Tr}_{\sigma_k} [f(\sigma_k) e^{-\beta H_0}] / \text{Tr}_{\sigma_k} e^{-\beta H_0}}{\text{Tr}_{\sigma_k} e^{-\beta H_0}} e^{-\beta H} \right]}{\text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}}$$

$$= \left\langle \frac{\text{Tr}_{\sigma_k} [f(\sigma_k) e^{-\beta H_0}]}{\text{Tr}_{\sigma_k} e^{-\beta H_0}} \right\rangle$$

$$= \left\langle \frac{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} f(\sigma_k) e^{-\beta H_0}}{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} e^{-\beta H_0}} \right\rangle \quad (9)$$

แทนค่า H_0 ในสมการ (9) จะได้

$$\langle f(\sigma_k) \rangle = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} f(\sigma_k) \exp [\beta q \sum_j J_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \beta q \sum_r J'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + \beta q h_k \delta_{\sigma_k, 0}]}{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} \exp [\beta q \sum_j J_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \beta q \sum_r J'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + \beta q h_k \delta_{\sigma_k, 0}]} \right\rangle \quad (10)$$

$$= \left\langle \frac{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} f(\sigma_k) \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + L_k \delta_{\sigma_k, 0}]}{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + L_k \delta_{\sigma_k, 0}]} \right\rangle \quad (11)$$

$$\text{ในเมื่อ } K_{kj} = \beta q J_{kj}; \quad K'_{kr} = \beta q J'_{kr}; \quad L_k = \beta q h_k \quad (12)$$

ถ้าให้ $f(\sigma_k) = \delta_{\sigma_k, 0}$ แทนลงในสมการ (11) จะได้

$$\langle \delta_{\sigma_k, 0} \rangle = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} \delta_{\sigma_k, 0} \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + L_k \delta_{\sigma_k, 0}]}{\sum_{\sigma_k=0}^{q-1} \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{\sigma_k, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{\sigma_k, \sigma_r} + L_k \delta_{\sigma_k, 0}]} \right\rangle \quad (13)$$

ให้ n แทนสถานะต่าง ๆ ของ σ_k ดังนี้ $n = 0, 1, 2, \dots, q-1$ โดยหาผลบวกของทุกสถานะของ σ_k ตั้งแต่ 0 ถึง $q-1$ เมื่อ σ_k อยู่ในสถานะ 0 จะได้

$$\langle \delta_{\sigma_k, 0} \rangle = \left\langle \frac{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{0, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{0, \sigma_r} + L_k]}{\sum_{n=0}^{q-1} \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{n, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{n, \sigma_r} + L_k \delta_{n, 0}]} \right\rangle \quad (14)$$

$$= \left\langle \frac{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{0, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{0, \sigma_r} + L_k]}{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{0, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{0, \sigma_r} + L_k] + \sum_{n=1}^{q-1} \exp[\sum_j K_{kj} \delta_{n, \sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{n, \sigma_r}]} \right\rangle \quad (15)$$

สมการ (15) คือเอกลักษณ์หนึ่งของคลื่นสำหรับแบบจำลองพอดลี (Callen. 1963 : 161) ในทำนองเดียวกัน เมื่อ σ_k อยู่ในสถานะ 1 จะได้ว่า

$$\langle \delta_{\sigma_k,1} \rangle = \frac{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{1,\sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{1,\sigma_r}]}{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{0,\sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{0,\sigma_r} + L_k] + \sum_{n=1}^{q-1} \frac{\exp[\sum_j K_{kj} \delta_{n,\sigma_j} + \sum_r K'_{kr} \delta_{n,\sigma_r}]}{\dots}} \quad (16)$$

เมื่อพิจารณาการแบบเดียวกันกับสถานะอื่น ๆ ของ σ_k จนครบทุกสถานะ และนำผลที่ได้ทั้งหมดมารวมกัน จะได้

$$\langle \delta_{\sigma_k,0} \rangle + \langle \delta_{\sigma_k,1} \rangle + \dots + \langle \delta_{\sigma_k,q-1} \rangle = 1 \quad (17)$$

สมการ (17) เขียนให้อยู่ในรูปความสัมพันธ์ทั่วไปจะได้

$$\delta_{\sigma_k,0} + \sum_{n=1}^{q-1} \delta_{\sigma_k,n} = 1 \quad (18)$$

สมการ (18) เรียกว่า กฎการรวม (sum rule)

ค่าเฉลี่ย $\delta_{\sigma_k,0}$ เป็นค่าเฉลี่ยเมื่อสปินอยู่ในทิศของสนามแม่เหล็กภายนอก ส่วนค่าเฉลี่ยอื่น ๆ มีค่าเท่ากัน ซึ่งได้จากสมการ (17) ว่า

$$\langle \delta_{\sigma_k,0} \rangle + (q-1) \langle \delta_{\sigma_k,1} \rangle = 1 \quad (19)$$

เมื่อเปลี่ยนสมการ (15) ให้อยู่ในรูปของตัวปฏิบัติการดีฟเฟอร์เรนเชียล จะได้

$$\langle \delta_{\sigma_k, 0} \rangle = \left\langle \prod_{n=0}^{q-1} [\exp [D_n \sum_j K_{kj} \delta_{n, \sigma_j} + D_n \sum_r K'_{kr} \delta_{n, \sigma_r}]] \right\rangle \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k + \sum_{n=1}^{q-1} X_n}} \Big|_{\{X_n\}=0} \quad (20)$$

$$= \left\langle \prod_{n=0}^{q-1} \left[\prod_j e^{D_n K_{kj} \delta_{n, \sigma_j}} \prod_r e^{D_n K'_{kr} \delta_{n, \sigma_r}} \right] \right\rangle \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k + \sum_{n=1}^{q-1} X_n}} \Big|_{\{X_n\}=0} \quad (21)$$

$$\text{พิจารณา } e^{D_n K_{kj} \delta_{n, \sigma_j}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{[D_n K_{kj} \delta_{n, \sigma_j}]^{\ell}}{\ell!}$$

$$= 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{[D_n K_{kj}]^{\ell} [\delta_{n, \sigma_j}]^{\ell}}{\ell!}$$

แต่ $(\delta_{n, \sigma_j})^{\ell}$ มีค่าเป็น 0 หรือ 1 เท่านั้น ดังนั้นจะได้ $(\delta_{n, \sigma_j})^{\ell} = \delta_{n, \sigma_j}$ ซึ่งได้ว่า

$$e^{D_n K_{kj} \delta_{n, \sigma_j}} = 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{[D_n K_{kj}]^{\ell} \delta_{n, \sigma_j}}{\ell!}$$

$$= 1 + (e^{D_n K_{kj}} - 1) \delta_{n, \sigma_j} \quad (22)$$

เมื่อแทนสมการ (22) ลงในสมการ (21) จะได้

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_k, 0} \rangle &= \left\langle \prod_{n=0}^{q-1} \prod_j \left[\prod_r \left[1 + (e^{D_n K_{kj}} - 1) \delta_{n, \sigma_j} \right] \prod_r \left[1 + (e^{D_n K'_{kr}} - 1) \delta_{n, \sigma_r} \right] \right] \right\rangle \\ &\quad \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} \quad (23) \\ &= \left\langle \prod_j \prod_{n=0}^{q-1} \left[1 + \delta_{n, \sigma_j} e^{D_n K_{kj}} - \delta_{n, \sigma_j} \right] \prod_r \prod_{n=0}^{q-1} \left[1 + \delta_{n, \sigma_r} e^{D_n K'_{kr}} - \delta_{n, \sigma_r} \right] \right\rangle \\ &\quad \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} \quad (24) \end{aligned}$$

พิจารณาเทอม

$$\begin{aligned} \prod_{n=0}^{q-1} \left[1 + \delta_{n, \sigma_j} e^{D_n K_{kj}} - \delta_{n, \sigma_j} \right] &= \left[1 + \delta_{0, \sigma_j} e^{D_0 K_{kj}} - \delta_{0, \sigma_j} \right] \\ &\times \left[1 + \delta_{1, \sigma_j} e^{D_1 K_{kj}} - \delta_{1, \sigma_j} \right] \times \dots \times \left[1 + \delta_{q-1, \sigma_j} e^{D_{q-1} K_{kj}} - \delta_{q-1, \sigma_j} \right] \end{aligned}$$

เมื่อดูออกมาตรง ๆ จะมีเทอมประเภท $\delta_{0, \sigma_j} \delta_{1, \sigma_j}, \delta_{0, \sigma_j} \delta_{1, \sigma_j} \delta_{2, \sigma_j}, \dots$
 เทอมเหล่านี้จะมีค่าเป็นศูนย์ เพราะสปีน σ_j ไม่อาจอยู่ในสถานะมากกว่าหนึ่งสถานะได้
 พร้อม ๆ กัน โดยเหตุนี้จึงได้ว่า

$$\prod_{n=0}^{q-1} [1 + \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} - \delta_{n,\sigma_j}] = 1 - \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} + \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} \quad (25)$$

จากกฎการรวม (sum rule) $\sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} = 1$ จึงได้ว่า

$$\prod_{n=0}^{q-1} [1 + \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} - \delta_{n,\sigma_j}] = \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} \quad (26)$$

เมื่อแทนสมการ (26) ลงในสมการ (24) จะได้

$$\left\langle \delta_{\sigma_k, 0} \right\rangle = \left\langle \prod_{j=0}^{q-1} \left[\sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} \right] \prod_{r=0}^{q-1} \left[\sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_r} e^{D_n K'_{kr}} \right] \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \right\rangle_{\{X\}_n=0} \quad (27)$$

เท่าที่พิจารณามาถึงจุดนี้ยังไม่ได้มีการประมาณใด ๆ ทั้งสิ้น ผลที่ได้จะมีค่าแน่นอน แต่จะมีความยุ่งยากในการดำเนินการต่อไป โดยเฉพาะอย่างยิ่งเมื่อ j และ r มีค่ามาก ซึ่งทำการประมาณดังต่อไปนี้

$$1. \quad \left\langle \prod_{j=0}^{q-1} \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} \right\rangle = \prod_j \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K_{kj}} \right\rangle$$

$$\left\langle \prod_{r=0}^{q-1} \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_r} e^{D_n K'_{kr}} \right\rangle = \prod_r \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K'_{kr}} \right\rangle$$

กล่าวคือ ไม่คิดสหสัมพันธ์ระหว่างสปิน

2. จะคิดเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างสปิน σ_k กับสปินที่อยู่บริเวณใกล้เคียงที่สุด
อันดับหนึ่งและอันดับสอง ให้จำนวนสปินที่อยู่ใกล้เคียงอันดับหนึ่งเป็น z_1 และจำนวนสปินที่อยู่
ใกล้เคียงอันดับสองเป็น z_2

3. ถือว่าระบบที่พิจารณา มีอันตรกิริยาระหว่างสปินขนาดเท่ากันทุกทิศทาง (isotropic interaction) คือ K_{kj} เท่ากันทุกค่าของ j ไม่ว่า j จะอยู่ทางด้านใดของ k ก็ตาม ดังนั้นจึงเขียน $K_{kj} = K$ และ $K'_{kr} = K'$ ได้

จากการประมาณทั้งสามข้อ สมการ (27) เขียนใหม่ได้เป็น

$$\left\langle \delta_{\sigma_k, 0} \right\rangle = \frac{z_1}{j} \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n, \sigma_j} e^{D_n K} \right\rangle \frac{z_2}{r} \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n, \sigma_r} e^{D_n K'} \right\rangle \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} \quad (28)$$

$$= \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n, \sigma_j} e^{D_n K} \right\rangle z_1 \left\langle \sum_{n=0}^{q-1} \delta_{n, \sigma_r} e^{D_n K'} \right\rangle z_2 \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} \quad (29)$$

$$= \left\langle e^{D_0 K} \delta_{0, \sigma_j} + \sum_{n=1}^{q-1} \delta_{n, \sigma_j} e^{D_n K} \right\rangle z_1 \left\langle e^{D_0 K'} \delta_{0, \sigma_r} + \sum_{n=1}^{q-1} \delta_{n, \sigma_r} e^{D_n K'} \right\rangle z_2 \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} \quad (30)$$

$$\text{จาก } m_k = \frac{q \delta_{\sigma_k, 0} - 1}{q - 1} \text{ จะได้ } \delta_{0, \sigma_k} = \frac{1 + (q-1)m_k}{q} \quad (31)$$

และจากกฎการรวม $\delta_{0,\sigma_j} + (q-1)\delta_{n,\sigma_j} = 1$

จะเขียนเทอม

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{q-1} \delta_{n,\sigma_j} e^{D_n K} &= \sum_{n=1}^{q-1} \frac{(1 - \delta_{0,\sigma_j}) e^{D_n K}}{q-1} \\ &= \frac{1 - \delta_{0,\sigma_j} \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K}}{q-1} \\ &= \frac{1 - [1 + (q-1)m_j] \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K}}{q-1} \\ &= \frac{(1 - m_j) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K}}{q} \end{aligned} \tag{32}$$

เมื่อนำสมการ (31) และสมการ (32) แทนลงในสมการ (30) จะได้ผลเป็น

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1 + (q-1)m_k}{q} \right\rangle &= \\ \left\langle \frac{1}{z_1} [e^{D_0 K} [1 + (q-1)m_j] + (1 - m_j) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K} z_1] \right\rangle & \\ \times \left\langle \frac{1}{z_2} [e^{D_0 K'} [1 + (q-1)m_r] + (1 - m_r) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K'} z_2] \right\rangle & \\ \times \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\} = 0} &= 0 \end{aligned} \tag{33}$$

โดยถือว่าตำแหน่งบนแลตทิซเหมือนกันหมด ซึ่งไม่มีความจำเป็นต้องแยกระหว่าง

m_k , m_j และ m_r ซึ่งเขียนแทนด้วย m และเลิกใช้เครื่องหมาย $\langle \dots \rangle$ สมการ (33) จึงจะเปลี่ยนเป็น

$$\frac{1 + (q-1)m}{q} = \frac{1}{z_1} [e^{D_0 K} [1 + (q-1)m] + (1-m) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K} z_1^n] \times \frac{1}{z_2} [e^{D_0 K'} [1 + (q-1)m] + (1-m) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K'} z_2^n] \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \{X_n\} = 0 \quad (34)$$

หากดูเลขจำนวนทางขวามือใน [...] ออกมาตรง ๆ แล้วสังเกตสัมประสิทธิ์หรือพิจารณาว่า

ลัทธิ σ_j ที่ z ตำแหน่ง แยกเป็นกลุ่มดังนี้

$$\begin{array}{l} n_0 \text{ ลัทธิ อยู่ในสถานะ } \sigma_j = 0 \\ n_1 \text{ ลัทธิ อยู่ในสถานะ } \sigma_j = 1 \\ \vdots \\ n_{q-1} \text{ ลัทธิ อยู่ในสถานะ } \sigma_j = q-1 \end{array}$$

จะได้จำนวนวิธีที่จัดแบ่งลัทธิเป็นกลุ่ม ๆ ดังกล่าวไว้ $\frac{z!}{n_0! n_1! \dots n_{q-1}!}$ วิธีด้วยกัน ค่า

n_0, n_1, \dots, n_{q-1} ดังข้างบนเป็น 1 ชุด จะมีชุดอื่น ๆ ที่เป็นไปได้อีก ดังนั้นเมื่อ

กระจายสมการข้างบนและกระทำด้วยตัวปฏิบัติการดีฟเฟอเรนเชียล โดยพิจารณาเทอมทาง

ขวามือแต่ละเทอม และให้ส่วนแม่เหล็กภายนอกเป็นศูนย์ ($L_k = 0$) จะได้

$$\begin{aligned}
& [e^{D_0 K} [1 + (q-1)m] + (1-m) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K} z_1] \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\}=0} \\
&= \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{q-1} [1 + (q-1)m]^{n_0} [1-m]^{z_1 - n_0} \times \frac{e^{n_0 K}}{e^{n_0 K} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_i K}} \quad (35)
\end{aligned}$$

และ

$$\begin{aligned}
& [e^{D_0 K'} [1 + (q-1)m] + (1-m) \sum_{n=1}^{q-1} e^{D_n K'} z_2] \frac{e^{X_0 + L_k}}{e^{X_0 + L_k} + \sum_{n=1}^{q-1} e^{X_n}} \Big|_{\{X_n\}=0} \\
&= \sum_{\{p_i\}} \frac{z_2!}{q-1} [1 + (q-1)m]^{p_0} [1-m]^{z_2 - p_0} \times \frac{e^{p_0 K'}}{e^{p_0 K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{p_i K'}} \quad (36)
\end{aligned}$$

เมื่อนำสมการ (35) และสมการ (36) แทนลงในสมการ (34) จะได้ผลเป็น

$$\begin{aligned}
& \frac{1 + (q-1)m}{q} = \\
& \frac{1}{q} \frac{1}{z_1 + z_2} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{q-1} \frac{z_2!}{q-1} [1 + (q-1)m]^{n_0} [1-m]^{z_1 - n_0} \\
& \quad \times [1 + (q-1)m]^{p_0} [1-m]^{z_2 - p_0} \times \frac{e^{n_0 K + p_0 K'}}{e^{n_0 K + p_0 K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_i K + p_i K'}} \quad (37)
\end{aligned}$$

$\sum_{\{n_i\}}$ และ $\sum_{\{p_i\}}$ หมายถึงผลบวกของชุด $(n_0, n_1, \dots, n_{q-1})$ ที่สอดคล้องกับเงื่อนไข

$$\sum_{i=0}^{q-1} n_i = z_1 \quad (38)$$

$$\sum_{i=0}^{q-1} p_i = z_2 \quad (39)$$

เอาผลของการกระจายเทอม $[1 + (q-1)m]^{n_0} [1-m]^{z_1 - n_0}$
 $\times [1 + (q-1)m]^{p_0} [1-m]^{z_2 - p_0}$ แทนลงในสมการ (37) ผลที่ได้เป็น

$$1 + (q-1)m =$$

$$\frac{1}{z_1 + z_2 - 1} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} \{ [1 + n_0(q-1)m + \frac{n_0(n_0-1)(q-1)^2 m^2}{2!} + \dots] \{ 1 - (z_1 - n_0)m + \frac{(z_1 - n_0)(z_1 - n_0 - 1)m^2}{2!} + \dots \} \{ [1 + p_0(q-1)m + \frac{p_0(p_0-1)(q-1)^2 m^2}{2!} + \dots] \{ 1 - (z_2 - p_0)m + \frac{(z_2 - p_0)(z_2 - p_0 - 1)m^2}{2!} + \dots \} \} \frac{e^{n_0 K + p_0 K'}}{e^{n_0 K + p_0 K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_i K + p_i K'}} \quad (40)$$

$$= \frac{1}{z_1 + z_2 - 1} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [1 + n_0(q-1)m - (z_1 - n_0)m + \dots] \times [1 + p_0(q-1)m - (z_2 - p_0)m + \dots] \frac{e^{n_0 K + p_0 K'}}{e^{n_0 K + p_0 K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_i K + p_i K'}} \quad (41)$$

$$1 + (q-1)m = \frac{1}{q^{z_1+z_2-1}} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [1 + n_0(q-1)m - (z_1-n_0)m + p_0(q-1)m - (z_2-p_0)m + \dots] \times \frac{e^{n_0K + p_0K'}}{e^{n_0K + p_0K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_iK + p_iK'}} \quad (42)$$

$$= \frac{1}{q^{z_1+z_2-1}} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [1 + \{(n_0+p_0)(q-1) - (z_1+z_2-n_0-p_0)\}m + \dots] \times \frac{e^{n_0K + p_0K'}}{e^{n_0K + p_0K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_iK + p_iK'}} \quad (43)$$

สมการ (43) มีเทอมที่ไม่ขึ้นกับตัวแปร m เมื่อเทียบสัมประสิทธิ์กับเทอมทางซ้ายมือคือ

$$\frac{1}{q^{z_1+z_2-1}} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} \cdot \frac{e^{n_0K + p_0K'}}{e^{n_0K + p_0K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_iK + p_iK'}} = 1 \quad (44)$$

เทอมที่อยู่ในรูปของตัวแปร m ในสมการ (43) แสดงความสัมพันธ์ในรูปสมการ

$$(q-1)m = \frac{1}{q^{z_1+z_2-1}} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [\{(n_0+p_0)(q-1) - (z_1+z_2-n_0-p_0)\}m + \dots] \times \frac{e^{n_0K + p_0K'}}{e^{n_0K + p_0K'} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_iK + p_iK'}} \quad (45)$$

$$m = \frac{1}{(q-1)q} z_1+z_2-1 \prod_{i=1}^{\Sigma} \{p_i\} \prod_{i=1}^{\Sigma} \{n_i\} \frac{z_1!}{q-1} \frac{z_2!}{q-1} [(n_0+p_0)(q-1) - (z_1+z_2-n_0-p_0)] \times \frac{e^{n_0K+p_0K'}}{e^{n_0K+p_0K'} + \sum_{i=1}^{\Sigma} e^{n_iK+p_iK'}} \quad (46)$$

สมการ (46) แสดงได้ในรูปแบบ

$$m = A_1(z_1, z_2)m + A_2(z_1, z_2)m^2 + \dots + A_{z_1+z_2}(z_1, z_2)m^{z_1+z_2} \quad (47)$$

ในที่นี้จะแสดงเฉพาะสัมประสิทธิ์ $A_1(z_1, z_2)$ เท่านั้น

$$A_1(z_1, z_2) = \frac{1}{(q-1)q} z_1+z_2-1 \prod_{i=1}^{\Sigma} \{p_i\} \prod_{i=1}^{\Sigma} \{n_i\} \frac{z_1!}{q-1} \frac{z_2!}{q-1} [(n_0+p_0)(q-1) - (z_1+z_2-n_0-p_0)] \times \frac{e^{n_0K+p_0K'}}{e^{n_0K+p_0K'} + \sum_{i=1}^{\Sigma} e^{n_iK+p_iK'}} \quad (48)$$

ในการศึกษาหาค่าอนุกรมวิกฤตครั้งนี้คิดจากต้นอนุกรมที่น้อยกว่าอนุกรมวิกฤต ($T < T_c$) ณ บริเวณใกล้ ๆ อนุกรมวิกฤต พหุนามเตอริเยิงระเบียบมีค่าน้อย ดังภาพประกอบ 2 ดังนั้นสมการ (47) จะกลายเป็น

$$m = A_1(z_1, z_2)m \quad (49)$$

ดังนั้นเงื่อนไขสำหรับค่าอนุกรมวิกฤตจึงเป็น

$$A_1(z_1, z_2) = 1 \quad (50)$$

ซึ่งได้สมการที่ใส่สำหรับคำนวณหาอนุกรมวิฤกต ($K_c = q\beta_c J$) จะได้

$$1 = \frac{1}{(q-1)q} z_1^{z_1+z_2-1} \prod_{i=1}^{\Sigma} \{p_i\} \prod_{i=1}^{\Sigma} \{n_i\} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [(n_0+p_0)(q-1) - (z_1+z_2-n_0-p_0)] \times \frac{e^{n_0 K_c + p_0 K'_c}}{e^{n_0 K_c + p_0 K'_c} + \sum_{i=1}^{q-1} e^{n_i K_c + p_i K'_c}} \quad (51)$$

บทที่ 4

ผลการวิจัย

โดยอาศัยเอกลักษณ์หนึ่งของคัลเลน (Callen. 1963 : 161) จะสามารถหาค่าอุณหภูมิวิกฤตของแบบจำลองพอดัสบนซีมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเพย์เชนเตอร์คิวบิกแลตทิซได้ เมื่อไม่คิดสหสัมพันธ์ระหว่างสปิน และคิดความแรงของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่ง (J) และอันดับสอง (J') ซึ่งมีความสัมพันธ์ของความแรงของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง ดังสมการ

$$\rho = J'/J = K'/K \quad (52)$$

แทนค่า ρ ในสมการ (51) ของบทที่ 3 จะได้

$$1 = \frac{1}{(q-1)^q} \sum_{z_1+z_2-1} \sum_{\{p_i\}} \sum_{\{n_i\}} \frac{z_1!}{\prod_{i=0}^{q-1} n_i!} \frac{z_2!}{\prod_{i=0}^{q-1} p_i!} [(n_0+p_0)^{(q-1)} - (z_1+z_2-n_0-p_0)] \times \frac{e^{K_c(n_0+p_0\rho)}}{e^{K_c(n_0+p_0\rho)} + \sum_{i=0}^{q-1} e^{K_c(n_i+p_i\rho)}} \quad (53)$$

โดยการหาค่าความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยาระหว่าง สปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) ซึ่งมีค่าระหว่าง 0 ถึง 1 ครั้งละ 0.1 สำหรับค่าขนาดหาอุณหภูมิวิกฤต โดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรน (fortran) ดังที่แสดงไว้ในภาคผนวก สำหรับ s.c., b.c.c. และ f.c.c. ในกรณีที่มี $q = 2, 3, 4$ และ 5 ค่าอุณหภูมิวิกฤตที่คำนวณได้เป็นดังในตารางต่อไปนี้

ตาราง 1 ค่าอุณหภูมิวิกฤตสำหรับขั้วเปิดตัวต่อแต่ละชนิดในรูป $k_B T_c / J$ เมื่อ $q = 2, 3, 4$
และ 5

ρ	q			
	2	3	4	5
0.0	5.0736	5.3831	5.6770	5.9595
0.1	6.4061	6.6919	6.9699	7.2380
0.2	7.6717	7.9512	8.2203	8.4846
0.3	8.8968	9.1771	9.4518	9.7163
0.4	10.0959	10.3842	10.6667	10.9433
0.5	11.2740	11.5785	11.8730	12.1625
0.6	12.4456	12.7660	13.0762	13.3833
0.7	13.6054	13.9405	14.2755	14.5985
0.8	14.7493	15.1134	15.4679	15.8178
0.9	15.8983	16.2778	16.6597	17.0358
1.0	17.0358	17.4419	17.8492	18.2482

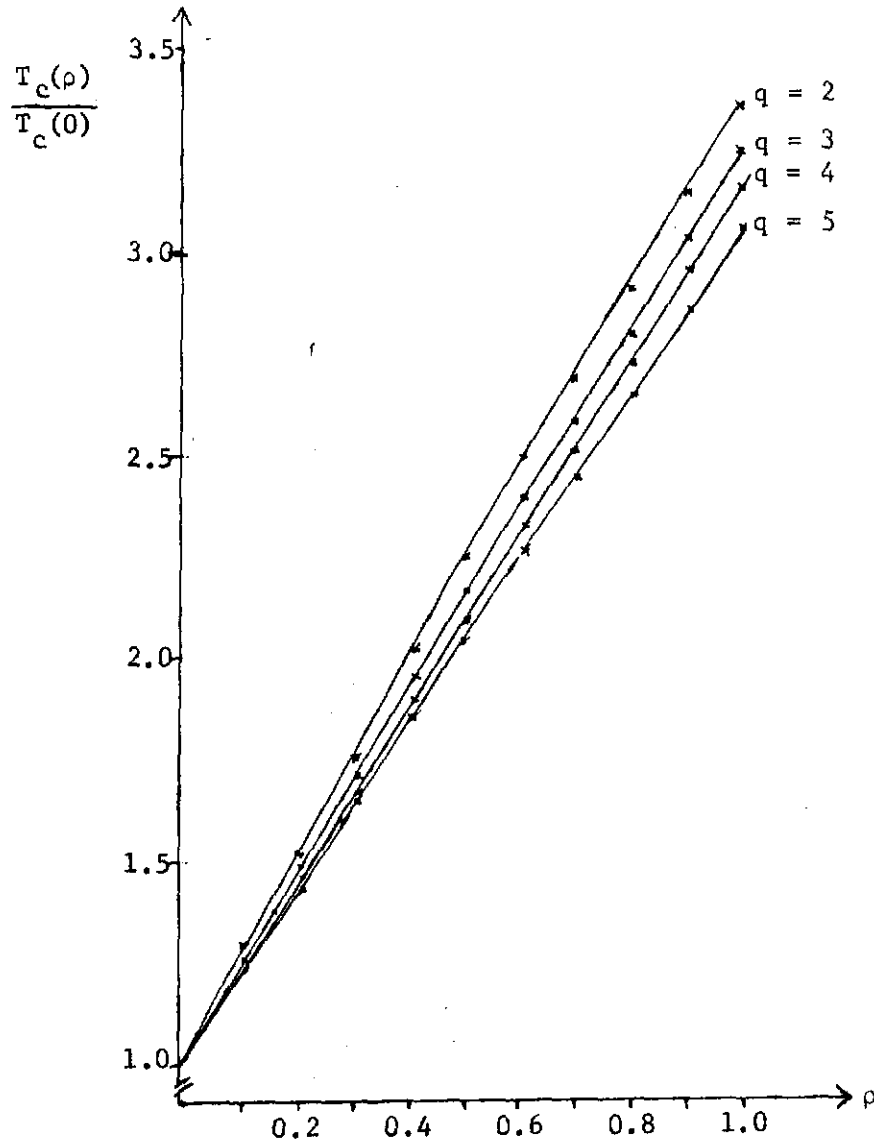
ตาราง 2 ค่าอุณหภูมิวิกฤตสำหรับบอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซในรูปแบบ $k_B T_c / J$ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5

ρ	q			
	2	3	4	5
0.0	7.0597	7.4038	7.7325	8.0502
0.1	7.7160	8.0472	8.3682	8.6760
0.2	8.3507	8.6780	8.9928	9.2989
0.3	8.9726	9.2966	9.6108	9.9167
0.4	9.5785	9.9043	10.2223	10.5330
0.5	10.1729	10.5079	10.8313	11.1458
0.6	10.7585	11.1029	11.4351	11.7564
0.7	11.3379	11.6913	12.0337	12.3701
0.8	11.9119	12.2750	12.6302	12.9803
0.9	12.4766	12.8590	13.2275	13.5870
1.0	13.0378	13.4348	13.8217	14.1965

ตาราง 3 ค่าจุดหลอมวิกฤตสำหรับเฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซในรูป $k_B T_c / J$ เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5

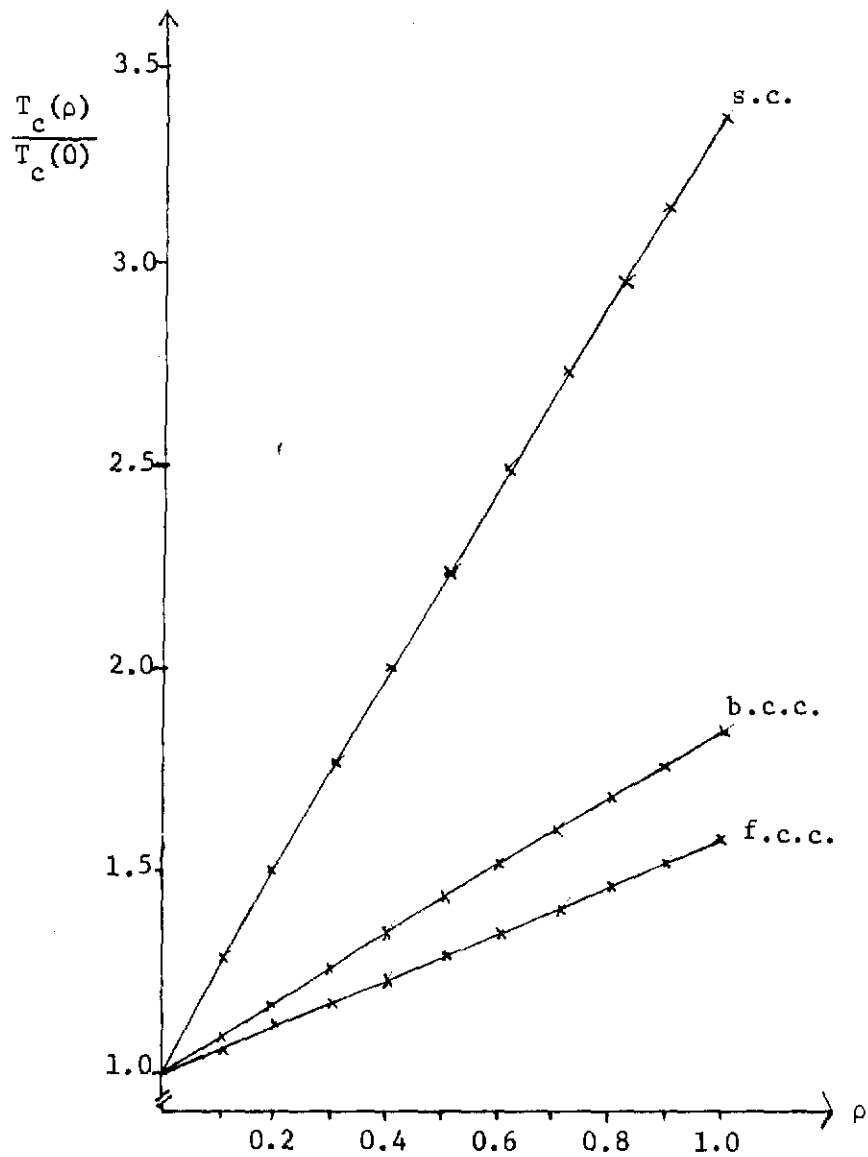
ρ	q			
	2	3	4	5
0.0	11.0436	11.4286	11.7994	12.1595
0.1	11.6822	12.0579	12.4185	12.7714
0.2	12.3153	12.6743	13.0336	13.3797
0.3	12.9282	13.2861	13.6426	13.9899
0.4	13.5318	13.8953	14.2501	14.5985
0.5	14.1343	14.4998	14.8588	15.2068
0.6	14.7275	15.0981	15.4619	15.8178
0.7	15.3022	15.6904	16.0578	16.4258
0.8	15.8856	16.2778	16.6597	17.0358
0.9	16.4609	16.8634	17.2563	17.6429
1.0	17.0358	17.4419	17.8492	18.2482

ผลการคำนวณเมื่อแสดงด้วยกราฟของอัตราส่วนค่าจุดหลอมวิกฤต $[T_c(\rho)/T_c(0)]$ กับค่าความแรงรังสีของอันตรกิริยา ระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) เป็นดังภาพประกอบ 5



ภาพประกอบ 5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนของอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/T_c(0)]$ กับค่าความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) สำหรับซีมเปิลคิวบิกแลตทิซ (s.c.) เมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5

กราฟสำหรับบอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซและเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ของตัวแปรเต็ม ในกรณี $q = 2, 3, 4$ และ 5 มีลักษณะคล้ายกับกราฟของซีมเปิลคิวบิกแลตทิซ จะต่างกันเฉพาะความชัน (slope) คือกราฟของซีมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเฟซเซ็นเตอร์คิวบิกแลตทิซ จะมีความชันเรียงจากมากไปหาน้อยตามลำดับ ดังแสดงในภาพประกอบ 6



ภาพประกอบ 6 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าอัตราส่วนของอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/T_c(0)]$ กับค่าความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) สำหรับ $q = 2$ ในระบบอิมเปลควบิคแลตทิซ (s.c.c.) บอติเซนเตอรัควบิคแลตทิซ (b.c.c.) และเฟซเซนเตอรัควบิคแลตทิซ (f.c.c.)

กราฟสำหรับ $q = 3, 4$ และ 5 แสดงความสัมพันธ์ของตัวแปรตามในระบบอิมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ มีลักษณะคล้ายรูปกราฟของกรณี $q = 2$ จะต่างกันในส่วนของความชันคือ ความชันเรียงจากมากไปหาน้อยเมื่อ $q = 2, 3, 4$ และ 5 ตามลำดับ

จากกราฟในภาพประกอบ 5 และภาพประกอบ 6 จะได้ความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิวิกฤตกับความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสองในรูปสมการ

$$T_c(\rho) = T_c(0) \{1 + a\rho - b\rho^2\} \quad (54)$$

จากสมการ (54) เมื่อใช้วิธีกำลังสองน้อยที่สุด (least square method) ซึ่งแสดงไว้ในภาคผนวก ค่าพารามิเตอร์ a และ b สำหรับอิมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ ในกรณี $q = 2, 3, 4$ และ 5 โดยขอยกให้มีความผิดพลาดน้อยกว่า 1% จะได้ค่าคงที่ a และ b ดังแสดงในตาราง 4, 5 และ 6 ตามลำดับ

ตาราง 4 ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับอิมเปิลคิวบิกแลตทิซ

	q			
	2	3	4	5
a	2.5511	2.3778	2.2327	2.1093
b	0.2009	0.1430	0.0924	0.0497

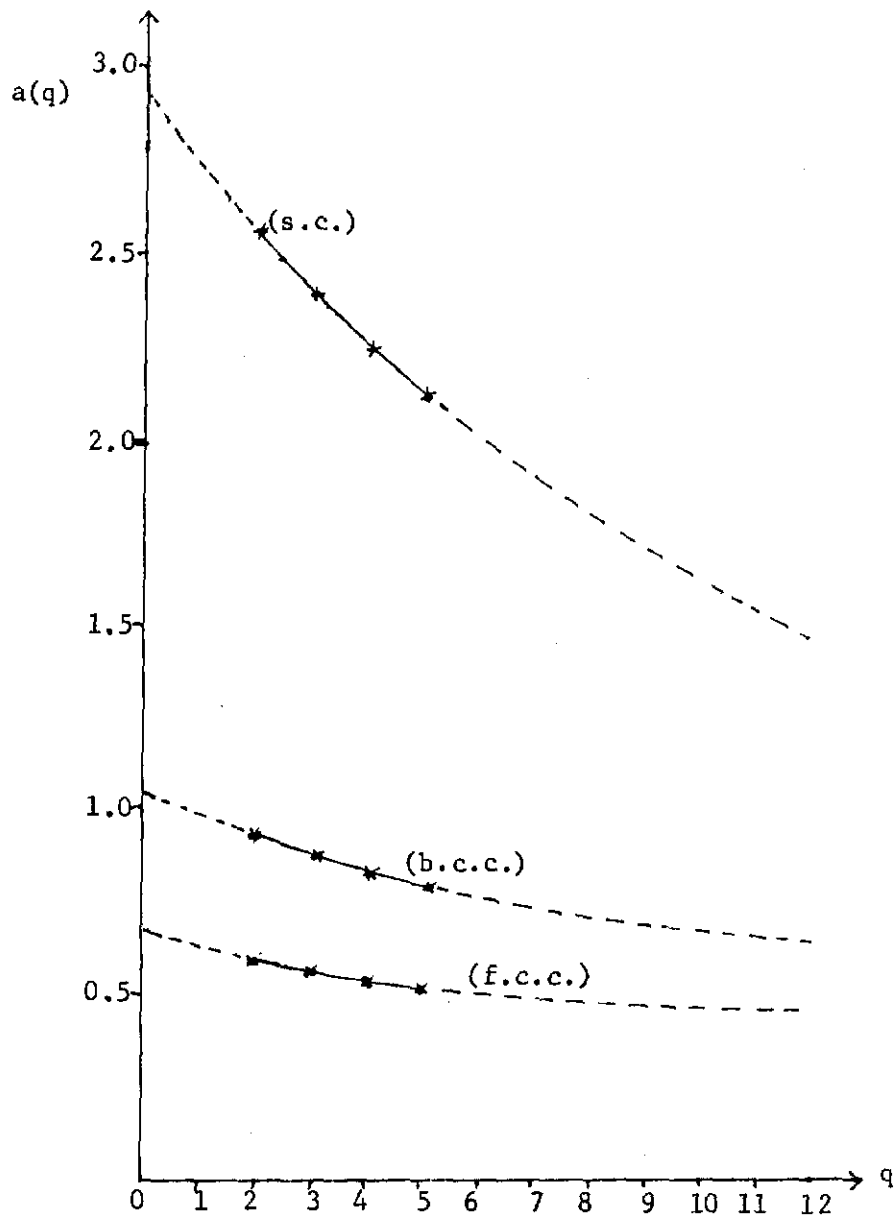
ตาราง 5 ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับบอดีเชนเตอร์คิวบิกแลตทิจ

	q			
	2	3	4	5
a	0.9208	0.8642	0.8167	0.7755
b	0.0757	0.0507	0.0301	0.0124

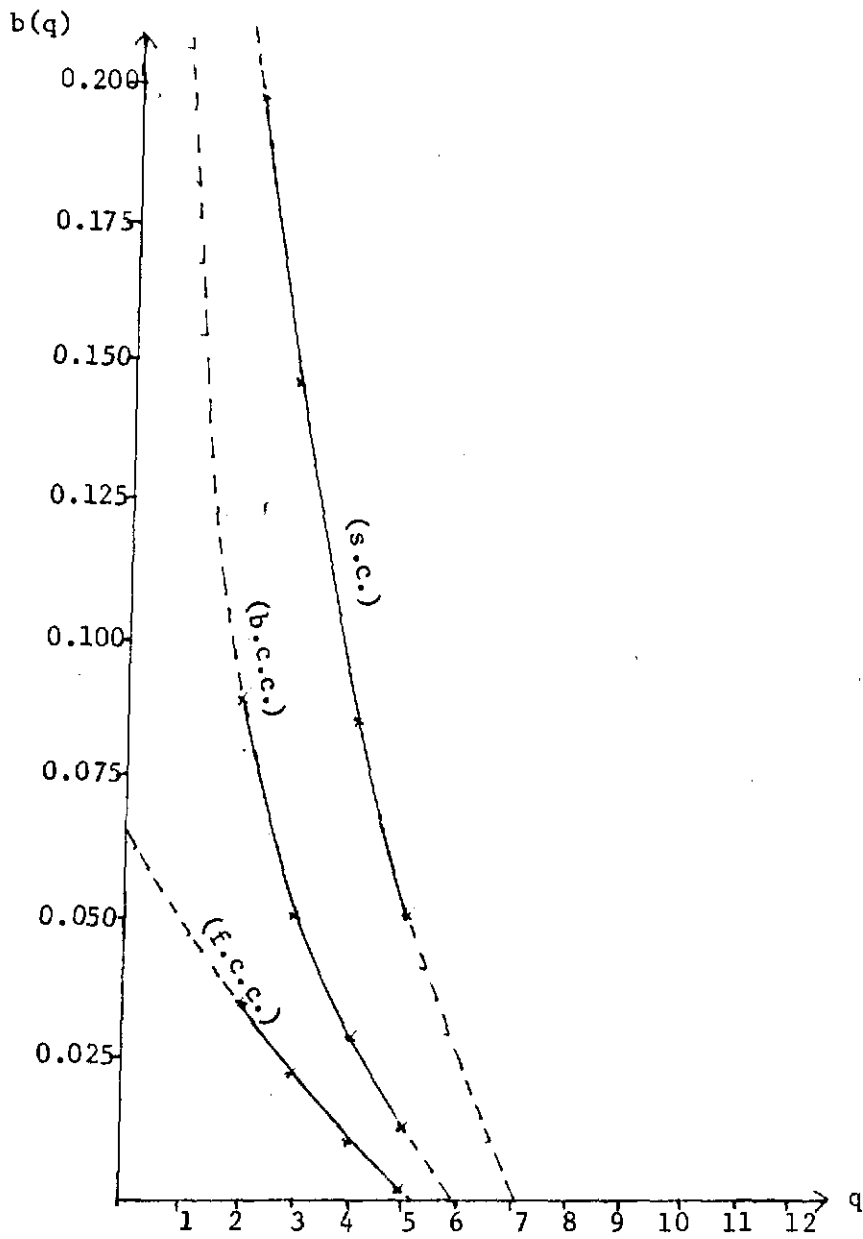
ตาราง 6 ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b สำหรับเฟซเชนเตอร์คิวบิกแลตทิจ

	q			
	2	3	4	5
a	0.5777	0.5487	0.5241	0.5021
b	0.0361	0.0226	0.0115	0.0013

ค่าคงที่ a และ b ที่คำนวณได้สำหรับซิมเบิลคิวบิกแลตทิจ บอดีเชนเตอร์คิวบิกแลตทิจ และเฟซเชนเตอร์คิวบิกแลตทิจ ขึ้นอยู่กับจำนวนสถานะของสปีน (q) ดังที่แสดงในภาพประกอบ 7 และภาพประกอบ 8



ภาพประกอบ 7 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $a(q)$ กับค่า q สำหรับ s.c., b.c.c. และ f.c.c.



ภาพประกอบ 8 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $b(q)$ กับค่า q สำหรับ s.c., b.c.c. และ f.c.c.

บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ

บทย่อ

ความมุ่งหมายของการวิจัย

เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ของอุณหภูมิวิกฤตกับความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินของแบบจำลองพอตส์บนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ บอดีเชนเตอร์คิวบิกแลตทิซ และเพชเชนเตอร์คิวบิกแลตทิซ

เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรนสำหรับ s.c., b.c.c. และ f.c.c. ในกรณี $q = 2, 3, 4$ และ 5

วิธีการดำเนินการ

จากนิยามของพารามิเตอร์เชิงระเบียบ หาลำการสัณฐาน ใช้เงื่อนไขสัมประสิทธิ์ของสมการสัณฐานของเทอม ตัวแปรกำลังหนึ่งเท่ากับ 1 ค่าพหุนามวิกฤต $[K_c(\rho) = q\beta_c J]$ โดยใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ สำหรับ $q = 2, 3, 4$ และ 5 โดยคิดค่าความแรงสัมพัทธ์ตั้งแต่ 0 ถึง 1 จากค่าวิกฤต ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนของอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/T_c(0)]$ กับความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปิน (ρ) สำหรับแต่ละค่าของ q

การวิเคราะห์ผล

ใช้กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง $T_c(\rho)/T_c(0)$ กับ ρ ในภาพประกอบ 5 และภาพประกอบ 6 กับกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง $a(q)$ กับ q และ $b(q)$ กับ q ในภาพประกอบ 7 และภาพประกอบ 8 ในบทที่ 4 ตามลำดับ

สรุปผลการวิจัย

จากกราฟระหว่าง $T_c(\rho)/T_c(0)$ กับ ρ ได้ความสัมพันธ์ในรูปสมการ

$$T_c(\rho) = T_c(0)\{1 + a\rho - b\rho^2\}$$

a และ b เป็นค่าคงที่สำหรับ s.c., b.c.c. และ f.c.c. ในกรณี $q = 2, 3, 4$ และ 5 ค่าคงที่ a และ b มีค่าดังตาราง 7

ตาราง 7 ค่าสัมประสิทธิ์ a และ b

		q			
		2	3	4	5
(s.c.)	a	2.5511	2.3778	2.2327	2.1093
	b	0.2009	0.1430	0.0924	0.0497
(b.c.c.)	a	0.9208	0.8642	0.8167	0.7755
	b	0.0757	0.0507	0.0301	0.0124
(f.c.c.)	a	0.5777	0.5487	0.5241	0.5021
	b	0.0361	0.0226	0.0115	0.0013

อภิปรายผลการวิจัย

สมการ (53) ในบทที่ 4 ซึ่งใช้สำหรับคำนวณค่าอุณหภูมิวิกฤตที่ขึ้นกับความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสองนั้น ใช้ได้เฉพาะกับจำนวนสถานะของสปิน (q) ซึ่งมิต่ำมากกว่า 1 ขึ้นไป ตามต้นและจุด ใช้วิธีการกระจายอนุกรมกับสปินตามแบบจำลองไอซิง หาความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิวิกฤต (T_c) กับความแรง

สัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินใกล้เคียงอันดับหนึ่งและอันดับสอง (ρ) ได้ความสัมพันธ์ $T_c(\rho) = T_c(0)[1 + c\rho]$ โดยค่าคงที่ $c = 2.47, 0.85$ และ 0.61 สำหรับแลตทิซชนิด s.c., b.c.c. และ f.c.c. ตามลำดับ การวิจัยในครั้งนี้ยังใช้ทฤษฎีสนามเอฟเฟกต์แบบใหม่ ได้ค่าคงที่ที่แตกต่างจากค่าคงที่ของดาลตันและวูด ลักษณะของ เส้นกราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนค่าอุณหภูมิวิกฤต $[T_c(\rho)/T_c(0)]$ กับ ρ จะมีลักษณะโค้งลงเล็กน้อย และเส้นกราฟจะเป็นเส้นตรงที่ชัน ในกรณีที่ค่าจำนวนสถานะของสปิน (q) และจำนวนโมเลกุลในหนึ่งหน่วยลูกบาศก์เซลล์ มีจำนวนมากขึ้นแสดงว่าความสัมพันธ์ระหว่าง $T_c(\rho)$ และ ρ จะมีลักษณะเป็นเส้นตรงเมื่อจำนวนความหนาแน่นโมเลกุลมีค่าสูง ในการวิจัยครั้งนี้ใช้ค่า $q = 2, 3, 4$ และ 5 จำนวนโมเลกุลในหนึ่งหน่วยลูกบาศก์เซลล์มีค่า $1, 2$ และ 4 โมเลกุล สำหรับแลตทิซชนิด s.c., b.c.c. และ f.c.c. ตามลำดับ เป็นที่น่าสังเกตจากกราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์ a กับ q และ b กับ q ว่า ค่า b เป็นศูนย์ สำหรับค่าเฉพาะ q ค่าหนึ่งซึ่งแตกต่างกันสำหรับแลตทิซต่าง ๆ กัน ส่วนค่าความชันของกราฟหรือค่า a จะมีค่าลดลงในกรณีที่ค่า q มีค่ามากขึ้น

ข้อเสนอแนะ

1. การศึกษาครั้งต่อไปอาจใช้ทฤษฎีสนามเอฟเฟกต์แบบใหม่กับแบบจำลองพอตส์ สำหรับแลตทิซ s.c., b.c.c. และ f.c.c. แต่ขยายค่าจำนวนสถานะของสปิน (q) ให้มากขึ้น โดย $q = 6, 7, 8$ และ 9 เพื่อศึกษาธรรมชาติของความแรงของอันตรกิริยาระหว่างสปิน
2. การคิดลหสัมพันธ์ระหว่างสปินในทฤษฎีสนามเอฟเฟกต์แบบใหม่กับแบบจำลองพอตส์ สำหรับแลตทิซ s.c., b.c.c. และ f.c.c. อาจทำให้ค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) ที่ขึ้นกับค่าความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินมีค่าดีขึ้น

บรรณานุกรม

- Animulu, A.O.E. Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids. New Delhi, Prentice-Hall, 1978. 516 p.
- Ashkin, J. and E. Teller. Physical Review. 64 : 178, 1943.
- Callen, H.B. Physics Letters. 4 : 161, 1963.
- Domb, C. and M.S. Green. Phase Transitions and Critical Phenomena III. London, Academic Press, 1976. 694 p.
- Honmura, R. and T. Kaneyoshi. "A Note on a New Effective-Field Theory of the Ising Model." Progress of Theoretical Physics. 60 : 635, 1978.
- _____. "Contribution to the New Type of Effective-Field Theory of the Ising Model." Journal of Physics C. 12 : 3979, 1979.
- Honmura, R. and others. "New Effective-Field Theory for the Potts Model." Physical Review B. 29 : 2761, 1984.
- Huang, K. Statistical Mechanics. New York, John Wiley and Sons, 1963. 470 p.
- Ising, E. Z. Phys. 21 : 613, 1925.
- Kaneyoshi, T. and others. "New Correlated-Effective-Field Theory in the Ising Model." Physical Review B. 24 : 481, 1981.
- Kihara, T., Y. Midzuno and J. Shizume. Journal of the Physical Society of Japan. 9 : 681, 1954.
- Mittage, L. and J. Stephen. "Mean-Field Theory of the Many Component Potts Model." Journal of Physics A. 7 : L109, 1974.
- Oguchi, T. and I. Ono. Progress of Theoretical Physics. 35 : 998, 1966.
- Onsager, L. Physical Review. 65 : 117, 1944.
- Pippard, A.B. Element of Classical Thermodynamics. London, Cambridge University Press, 1961. 165 p.

- Rief, F. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics. Tokyo, Tosho Printing Co., 1965. 651 p.
- Sear, F.W. and M.W. Zemansky. University Physics. Tokyo, printed in Japan, 1963. 548 p.
- Stanley, H.E. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. 1st. ed., Oxford, Clarendon Press, 1976. 308 p.
- Sykes, M.F. and others. Journal of Physics A. 5 : 640, 1972.
- Wu, F.Y. "The Potts Model." Reviews of Modern Physics. 54 : 235, 1982.
- Yang, C.N. Physical Review. 85 : 805, 1952.

ภาคผนวก

วิธีการกำลังสองน้อยที่สุด (Least Squares Method)

ให้สมการของกราฟ $y = a + bx + cx^2$

เลือก a, b, c โดยที่

$$D_i = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)^2 \text{ มีค่าน้อยที่สุด}$$

$$\frac{\partial D_i}{\partial a} = 0$$

$$\sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i - cx_i^2)(-1) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial D_i}{\partial b} = 0$$

$$\sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i - cx_i^2)(-x_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)x_i = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial D_i}{\partial c} = 0$$

$$\sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i - cx_i^2)(-2x_i^2) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)x_i^2 = 0 \quad (3)$$

$$\text{จาก (1)} \quad \sum_{i=1}^n y_i - na - b \sum_{i=1}^n x_i - c \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0 \quad (4)$$

$$\text{จาก (2)} \quad \sum_{i=1}^n x_i y_i - a \sum_{i=1}^n x_i - b \sum_{i=1}^n x_i^2 - c \sum_{i=1}^n x_i^3 = 0 \quad (5)$$

$$\text{จาก (3)} \quad \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^2 - b \sum_{i=1}^n x_i^3 - c \sum_{i=1}^n x_i^4 = 0 \quad (6)$$

จาก (4), (5) และ (6) แก้สมการ หาค่า a , b และ c ได้

FILE: POTT1 FORTRAN A

```

C LARGE SCALE COMPUTER IBM 3031
C NATIONAL STATISTICAL OFFICE BANGKOK THAILAND
C PURPOSE
C DEPENDENCE OF CRITICAL TEMPERATURES ON RELATIVE STRENGTHS OF FIRST
C AND SECOND NEIGHBOR INTERACTIONS OF POTTS FERROMAGNETS ON CUBIC
C LATTICES (SC) (Q = 2)
C PARAMETER DESCRIPTION
C IQ - NUMBER OF STATES FOR POTTS SPIN (Q)
C IZ1- NUMBER OF FIRST NEAREST NEIGHBORS (Z1)
C IZ2- NUMBER OF SECOND NEAREST NEIGHBORS (Z2)
C SK - CRITICAL VALUE ( $k_c$ )
C RO - RATIO OF STRENGTHS OF FIRST AND SECOND NEIGHBOR INTERACTION
      (J2/J1)
C IN(I,J)-VALUE OF STATE FOR FIRST NEAREST NEIGHBOR (N)
C IP(I,J)-VALUE OF STATE FOR SECOND NEAREST NEIGHBOR (P)
C Z - COEFFICIENT OF THE EQUATION OF STATE (=1)
C CT- CRITICAL TEMPERATURE (KT/J)
C FACULTY OF SCIENCE SRINAKHARINWIROT UNIVERSITY (PRASANMITR)
C   MAIN PROGRAM
      REAL*8 SUM,A,JJ,IQ,NFAC,JFAC,T,TSAM,EXP,SAM
      DIMENSION RSK(11),RRO(11),RZ(11),CT(11)
      COMMON IN(7,2),IP(13,2)
      READ(1,5) ((IN(K,I),I=1,2),K=1,7)
      5  FORMAT(14I2)
      READ(3,10) ((IP(L,J),J=1,2),L=1,13)
      10 FORMAT(26I2)
      READ(9,15) IQ,IZ1,IZ2,M,N,X,IB
      15 FORMAT(F3.1,2I2,2I4,F6.4,I4)
      RO = 0.0
      DO 350 I = 1,11
      IF(I.GT.1) RO=RO+0.1
      SK = X
      RMIN = 999999.99
      DO 350 J = 1,IB
      IF(J.GT.1) SK=SK+0.0001
      A = 0.0
      DO 300 K = 1,N
      IA = IP(K,1)
      IC = IP(K,2)
      CALL FAC(IA,IFAC1)
      CALL FAC(IC,IFAC3)
      NFAC=IFAC1*IFAC3
      CALL FAC(IZ2,IFAC14)
      SUM = 0.0
      DO 200 L = 1,M

```

```

ID = IN(L,1)
IE = IN(L,2)
CALL FAC(ID,IFAC2)
CALL FAC(IE,IFAC4)
JFAC = IFAC2*IFAC4
CALL FAC(IZ1,IFAC13)
CALL SAMI(K,L,SK,RO,TSAM)
T = (((ID+IA)*(IQ-1))-(IZ1+IZ2-ID-IA))*EXP(SK*(ID+(IA*RO)))
SUM = SUM +(IFAC13*T)/(JFAC*TSAM)
200 CONTINUE
A = A + (IFAC14*SUM)/NFAC
300 CONTINUE
JJ = IQ*(IZ1+IZ2-1)
II = IQ-1
Z = A/(JJ*II)
SAVE = ABS(1.0-Z)
IF(RMIN.LT.SAVE) GO TO 350
RMIN = SAVE
CT(I) = IQ/SK
RSK(I) = SK
RRG(I) = RO
RZ(I) = Z
350 CONTINUE
WRITE(5,400)
400 FORMAT(1X,5X,'RHO',9X,'KC',10X,'A(T)',10X,'KT/J',/)
WRITE(5,500) (RRO(I),RSK(I),RZ(I),CT(I),I=1,11)
500 FORMAT(1X,5X,F3.1,7X,F6.4,7X,F6.4,7X,F7.4,/)
STOP
END
C SUBROUTINE PROGRAMS
SUBROUTINE FAC(K,IFAC)
IFAC = 1
DO 10 I = 1,K
10 IFAC = IFAC*I
RETURN
END
SUBROUTINE SAMI(K,L,SK,RO,SAM)
COMMON IN(7,2),IP(13,2)
SAM = 0.0
DO 10 I = 1,2
10 SAM = SAM + EXP(SK*(IN(L,I)+(IP(K,I)*RO)))
RETURN
END

```

จุดทฤษฎีวิกฤตกับความแรงสัมพันธ์ของอันตรกิริยาอันดับหนึ่งและอันดับสอง
ของระบบแม่เหล็กเฟอร์โรแบบพอดัลบนคิวบิกแลตทิซ

บทคัดย่อ

ของ

วิศาล จิตต์วาริน

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาดุษฎีบัณฑิต

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

กันยายน 2529

โดยการใช้นำปฏิบัติการไฟฟ้าเฟอเรนเยลตามวิธีของฮอนเจอร์และคาเนโบซี ทำให้สามารถศึกษาผลของความแรงสัมพัทธ์ของอันตรกิริยาระหว่างสปินที่อยู่ใกล้กันอันดับหนึ่ง และที่อยู่ใกล้กันอันดับสอง ที่มีต่อจุดหมุนวิกฤตของสปินแบบพอดด์ บนแลตทิซรูปลูกบาศก์ โดยกำหนดค่าจำนวนสถานะสำหรับสปินแบบพอดด์ (q) เท่ากับ 2, 3, 4 และ 5 ผลที่ได้แสดงชัดว่าจุดหมุนวิกฤตขึ้นอยู่กับความแรงสัมพัทธ์ ρ ซึ่งเขียนเป็นสมการได้ในรูปแบบ

$$T_c(\rho) = T_c(0) \{1 + a\rho - b\rho^2\}$$

และพบว่าความสัมพันธ์ระหว่าง $T_c(\rho)$ กับ ρ จะมีลักษณะเป็นเชิงเส้น เมื่อความหนาแน่นของสปินเพิ่มขึ้น และเมื่อจำนวนสถานะ q มีค่าเฉพาะค่าหนึ่งสำหรับแลตทิซหนึ่ง ๆ

DEPENDENCE OF CRITICAL TEMPERATURES ON RELATIVE
STRENGTHS OF FIRST AND SECOND NEIGHBOR INTERACTIONS
OF POTTS FERROMAGNETS ON CUBIC LATTICES

AN ABSTRACT

BY

WISAN CHITTVARIN

Presented in partial fulfillment of the requirements
for the Master of Education degree
at Srinakharinwirot University
September 1986

The differential operator technique of Hormura and Kaneyoshi is applied to the study of the effect on the critical temperatures of the relative strengths of the first nearest neighbor and the second nearest neighbor interactions of Potts spins on cubic lattices by assigning the number of states q to be 2, 3, 4 and 5 for a Potts spin. The results show definite dependence of the critical temperatures on the relative strengths ρ that is best described by an equation of the form:

$$T_c(\rho) = T_c(0)\{1 + a\rho - b\rho^2\}$$

It is found that the relation between $T_c(\rho)$ and ρ approaches linearity when the density of spins increases and also when the number of states q reaches a definite value for each lattice.