

530.4

๑ 2756

1-5

เอนโทรปีและสมการสถานะของแบบจำลองไอซิงที่มีอันตรกิริยา
ระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันที่สุด อันดับ หนึ่ง สอง
และสามตามลำดับบนเฟซเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ

ปริญญานิพนธ์

ของ

เอกชัย สวัสดิ์สิงห์

11 พ.ค. 2535

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

กรกฎาคม 2526

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

178603

คณะกรรมการที่ปรึกษาประจำตัวนิสิต และคณะกรรมการสอบ ได้พิจารณาปฏิญานิพนธ์
ฉบับนี้แล้ว เห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต
ของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒได้

คณะกรรมการที่ปรึกษา
..... ประธาน
..... กรรมการ

คณะกรรมการสอบ
..... ประธาน
..... กรรมการ
..... กรรมการ

ประกาศคุณูปการ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จได้ก็ด้วยดีเป็นผลเนื่องมาจากการตรวจแก้ไข ข้อเสนอแนะ และคำแนะนำเป็นอย่างดีจากคณาจารย์สามท่าน คือ ศศ.ดร.ทรงศรี วัฒนวิชัย
รศ.ดร.ชัยวัฒน์ กุประทกุลและ รศ.ดร.ประยงค์ พงษ์ทองเจริญ ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณ
คณาจารย์ทั้งสามท่านเป็นอย่างสูง

ขออุทิศสิ่งที่ตั้งใจทำสำหรับปริญญานิพนธ์ฉบับนี้แก่ ดวงวิญญาณ ของ พ.อ.อ.สุวัจน์
สวัสดิสังห์

เอกภย์ สวัสดิสังห์

สารบัญ

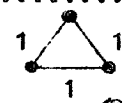
บทที่	หน้า
1 บทนำ	1
ความมุ่งหมายของการวิจัย	7
ความสำคัญของการวิจัย	7
ขอบเขตของการวิจัย	7
คำนิยามศัพท์เฉพาะ	7
2 ทฤษฎีและเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	10
พลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซ	10
พหุคูณฟังก์ชันและพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์	11
งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการหาค่าเอนโทรปี	24
งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับสมการสถานะ	24
3 วิธีดำเนินการวิจัย	26
การหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซ	
ซนิกเพชเชนเตอร์คิวบิกแลตทิซ	26
การหาค่าเอนโทรปีที่ปริมาตรคงที่	29
การหาค่าสมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่	30
4 ผลการวิจัย	31
ค่าเอนโทรปีที่ปริมาตรคงที่	31
สมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่	34
5 บทย่อ สรุปผล อภิปรายและข้อเสนอแนะ	36
บทย่อ	36

ความมุ่งหมายของการวิจัย	36
เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย	36
วิธีดำเนินการวิจัย	36
การวิเคราะห์ผล	38
สรุปผลการวิจัย	38
อภิปรายผลการวิจัย	39
ข้อเสนอแนะในการวิจัย	40
บรรณานุกรม	42
ภาคผนวก	45

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ

หน้า

1	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและอุณหภูมิของระบบ ของเหลว-ก๊าซและของแข็ง	2
2	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของระบบ ของเหลว-ก๊าซที่อุณหภูมิมากกว่า เท่ากับและน้อยกว่าอุณหภูมิวิกฤต ..	3
3	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นและอุณหภูมิของระบบ ของเหลว-ก๊าซ	3
4	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าความร้อนจำเพาะกับอุณหภูมิ	5
5	แสดงแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซกาศชนิก ซิมเปิลคิวบิก บอว์ลเชนเตอร์คิวบิก และเฟซเชนเตอร์คิวบิกแลตทิซตามลำดับ	8
6	แสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลอันดับที่ หนึ่ง สองและสาม	9
7	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $v(r_{ij})$ และ b_{ij} กับระยะทาง r_{ij} ..	12
8	แสดงลักษณะของแผนภาพที่มีเส้นประย่นออกมาจากวงกลม	18
9	แสดงแผนภาพวงกลมที่ยุบลงมามีตำแหน่งเดียวกันได้	19
10	แสดงแผนภาพที่มีบอนด์สามบอนด์	20
11	แสดงวิธีคำนวณหาจำนวนวิธีที่แผนภาพ  สามารถ บรรจุลงในไอซิ่งแลตทิซกาศชนิกเฟซเชนเตอร์คิวบิก	22
12	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $P-V$ ของสมการสถานะของ ระบบของเหลว-ก๊าซของ แวน เดอร์ วอลส์	25
13	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\frac{1}{q} \frac{a_n}{a_{n-1}}$ กับ $\frac{1}{n}$	33
14	สมการสถานะของระบบของเหลว-ก๊าซ ของ F.C.C.(1,0,0)	35

บัญชีตาราง

ตาราง

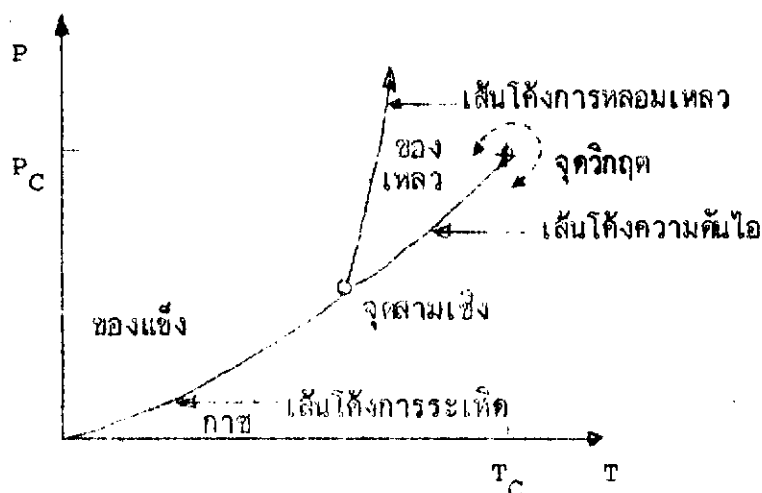
หน้า

- 1 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m K^n$ ที่ได้จาก
การกระจายอนุกรมคลัสเตอร์ของ $F.C.C.(1, 0, 0)$ 27
- 2 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m K^n$ ที่ได้จาก
การกระจายอนุกรมคลัสเตอร์ของ $F.C.C.(1, 1, 0)$ 28
- 3 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m K^n$ ที่ได้จาก
การกระจายอนุกรมคลัสเตอร์ของ $F.C.C.(1, 1, 1)$ 29
- 4 ค่าสัมประสิทธิ์ a_n ของ K^n จากสมการ $\frac{S_\infty - S_c}{K} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n K^n$
ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซซนิกเฟสเซนเตอร์คิวบิก
ต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร 32
- 5 ค่าวิกฤต K_c และค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตของไอซิง
แลตทิซกาซซนิกเฟสเซนเตอร์คิวบิกในกรณีต่าง ๆ 34
- 6 ค่าวิกฤต K_c ที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้เปรียบเทียบกับ
ค่าที่คำนวณไว้โดยคอมม์และคาลตันและทรวงศ์รี วิมลวิชัย 37
- 7 ค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้
เปรียบเทียบกับค่าของคอมม์และคาลตัน 38

บทนำ

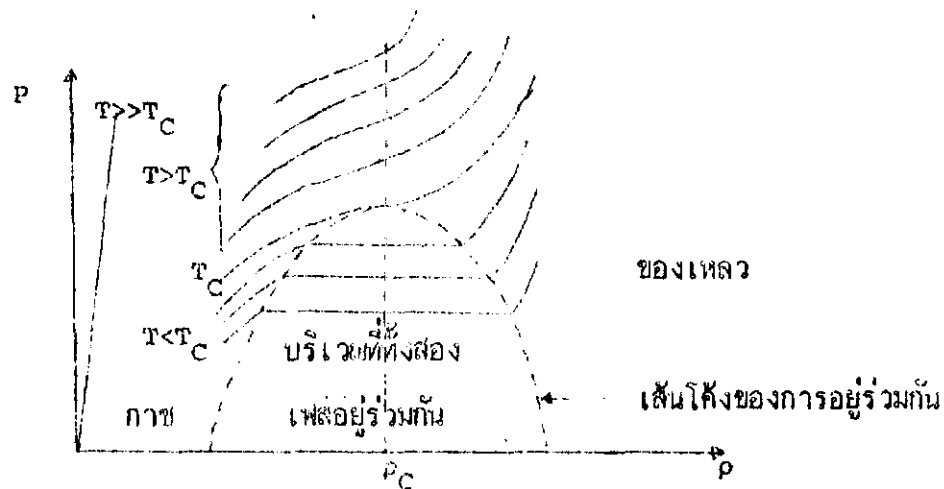
ปรากฏการณ์เกี่ยวกับพฤติกรรมวิกฤต (critical behaviour) ของสารหรือสารต่าง ๆ ได้มีผู้ศึกษาค้นคว้าเป็นเวลามากกว่าร้อยปีแล้ว โดยในปี ค.ศ.1869 แอนดรูว์ (Andrew. 1869 : 575) ได้ค้นพบพฤติกรรมวิกฤตของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์จากการทดลอง และในปี ค.ศ.1872 แวน เดอร์ วาลส์ (Van der Waals) ได้ค้นพบทฤษฎีที่อธิบายเกี่ยวกับพฤติกรรมของระบบของเหลว-ก๊าซ (liquid-gas system) ซึ่งเรียกว่า "ทฤษฎี แวน เดอร์ วาลส์ ของการเปลี่ยนสถานะของของเหลว-ก๊าซ" (Stanley. 1971 : 7) ถึงแม้ว่าจะมีปรากฏการณ์ที่น่าสนใจหลายแบบแสดงออกมา เมื่อสารอยู่ที่บริเวณวิกฤตก็ตาม ในที่นี้จะกล่าวเฉพาะพฤติกรรมที่จุดวิกฤตของระบบของเหลว-ก๊าซเท่านั้น

ในการศึกษาเกี่ยวกับพฤติกรรมวิกฤตของระบบของเหลว-ก๊าซนั้น เราจะพิจารณาสมการสถานะของระบบที่มีรูปแบบเป็น $f(P, \rho, T) = 0$ ซึ่งเกี่ยวข้องกับตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์ (thermodynamic) สามตัวคือความดัน (P) ความหนาแน่น (ρ) และอุณหภูมิ (T) จากสมการสถานะของระบบสามารถเขียนความสัมพันธ์ของตัวแปรทั้งสามนี้ลงบนพื้นผิวสามมิติให้ความสัมพันธ์ของแต่ละจุดมีโคออร์ดิเนต (coordinate) เป็น (P, ρ, T) และโคออร์ดิเนตจะแทนสถานะสมดุลของระบบ เพื่อสะดวกในการพิจารณาความสัมพันธ์ของ P, ρ, T เราสามารถแยกออกเป็นความสัมพันธ์ระหว่าง P กับ T ระหว่าง P กับ ρ และระหว่าง ρ กับ T ตามลำดับ ดังภาพประกอบ 1, 2 และ 3

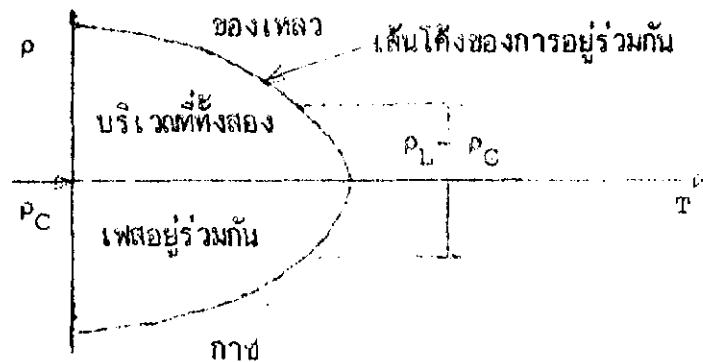


ภาพประกอบ 1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและอุณหภูมิของระบบของเหลว-ก๊าซ และของแข็ง

ภาพประกอบ 1 เป็นกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและอุณหภูมิของระบบของเหลว ก๊าซและของแข็ง เส้นโค้งจะแบ่งพื้นที่ออกเป็นสามบริเวณตามสถานะของสสาร คือสถานะของของเหลว ก๊าซและของแข็ง โดยที่สถานะของของแข็งและก๊าซจะอยู่ในสถานะสมดุลตามเส้นโค้งการระเหิด (sublimation curve) สถานะของของแข็งและของเหลวจะอยู่ในสถานะสมดุลตามเส้นโค้งการหลอมเหลว (fusion curve) และสถานะของของเหลวและก๊าซจะอยู่ในสถานะสมดุลตามเส้นโค้งความดันไอ (vapour pressure curve) เส้นโค้งทั้งสามนี้จะมารวมกันที่จุด ๆ หนึ่ง เราเรียกจุดนี้ว่า จุดสามเชิง (triple point) สำหรับเส้นโค้งความดันไอจะสิ้นสุดลงที่จุด ๆ หนึ่งและเรียกจุดนี้ว่า จุดวิกฤต (critical point) ณ จุดวิกฤตของเหลวและก๊าซจะมีความดันเท่ากับความดันวิกฤต (critical pressure, P_C) ความหนาแน่นเท่ากับความหนาแน่นวิกฤต (critical density, ρ_C) และอุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิวิกฤต (critical temperature, T_C) การเปลี่ยนสถานะกลับไปกลับมาระหว่างของเหลวและก๊าซจะเกิดขึ้นอย่างต่อเนื่องโดยไม่ต้องผ่านเส้นความดันไอ ซึ่งแทนด้วยเส้นประ ดังแสดงในภาพประกอบ 1 นั่นคือที่บริเวณจุดวิกฤตนี้เราไม่สามารถบอกความแตกต่างระหว่างสถานะของของเหลวและก๊าซได้



ภาพประกอบ 2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นของระบบ
ของเหลว-ก๊าซที่อุณหภูมิมากกว่า เท่ากับและน้อยกว่าอุณหภูมิวิกฤต



ภาพประกอบ 3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นและอุณหภูมิของระบบ
ของเหลว-ก๊าซ

ภาพประกอบ 2 และ 3 เป็นกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันกับความหนาแน่น และความหนาแน่นกับอุณหภูมิของระบบของเหลว-ก๊าซ จะเห็นได้ว่าในช่วงบริเวณที่อุณหภูมิต่ำกว่า อุณหภูมิวิกฤตมาก ๆ ความแตกต่างระหว่างความหนาแน่นของของเหลว (ρ_L) และก๊าซ (ρ_G) จะมีค่ามาก เมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น $\rho_L - \rho_G$ จะมีค่าลดลงและจะเท่ากับศูนย์ที่อุณหภูมิวิกฤตผลต่างของความหนาแน่น $\rho_L - \rho_G$ เรียกว่า พารามิเตอร์เชิงระเบียบ (order parameter) ในทำนองเดียวกันที่อุณหภูมิสูงมาก ๆ เส้นกราฟไอโซเทอร์มจะเป็นเส้นตรงเราจึงใช้กฎของก๊าซอุดมคติ แสดงสมการสถานะของก๊าซ $P = \frac{\rho k T}{m}$ ได้ ซึ่ง k เป็นค่าคงที่โบลต์ซมาน (Boltzmann constant) และ m เป็นมวลของก๊าซ 1 โมเลกุลเมื่ออุณหภูมิลดลงเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤต

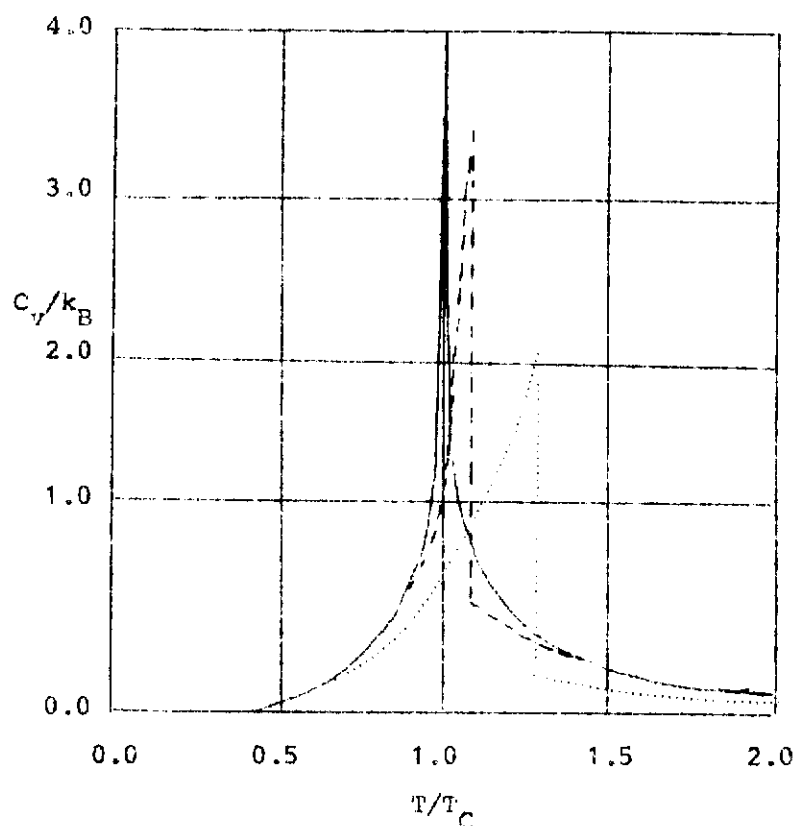
เส้นกราฟไอโซเทอร์มจะมีลักษณะเป็นเส้นโค้งซึ่งเป็นผลเนื่องมาจากมีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล (molecular interaction) ของระบบของเหลว-ก๊าซ

การศึกษาปรากฏการณ์เกี่ยวกับพฤติกรรมวิกฤตสมัยใหม่นั้น เริ่มในปี ค.ศ.1940 โดย กักเกนเฮม (Guggenheim) พบว่าเส้นโค้งการอยู่ร่วมกันของระบบของเหลว-ก๊าซไม่เป็นรูป พาราโบลา (Stanley. 1963 : 9) ต่อมาในปี ค.ศ.1944 ออนซาเกอร์ (Onsager. 1944 : 117) ได้หาค่าความร้อนจำเพาะของไอซิงแลตทิซ (Ising lattice gas) ชนิดสองมิติโดยไม่พิจารณาผลจากสนามแม่เหล็กภายนอก พบว่าค่าความร้อนจำเพาะที่ปริมาตร คงที่จะมีค่าใกล้เคียงอนันต์ (infinity) เมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤตและในปี ค.ศ.1952 แยงและลี (Yang and Lee. 1952 : 404) ได้ใช้แบบจำลองของก๊าซที่มีลักษณะไม่ต่อเนื่อง นั่นคือ ก๊าซจะมีลักษณะโครงสร้างเป็นแบบแลตทิซ (lattice) ทฤษฎีนี้ได้แสดงให้เห็นว่ากราฟ ของความดันและความหนาแน่นของระบบของเหลว-ก๊าซนั้นมีลักษณะคล้ายคลึงกับกราฟของสภาพ ความเป็นแม่เหล็กและสนามแม่เหล็กภายนอกของระบบแม่เหล็ก

การใช้แบบจำลองไอซิงชนิดสองมิติเพื่อศึกษาเกี่ยวกับพฤติกรรมวิกฤตนั้นมีข้อบ่ง ร้อง หลายประการ (Stanley. 1963 : 16) เช่นไม่สามารถที่จะหาค่า เอกซ์โปเนนซ์จุด วิกฤต (critical point exponent) β, γ และ γ' สำหรับระบบของเหลว-ก๊าซและระบบ แม่เหล็กได้ นอกจากนั้นแล้วค่าที่ได้จากการคำนวณโดยใช้แบบจำลองไอซิงชนิดสองมิติไม่สอดคล้อง กับผลการทดลองในระบบของเหลว-ก๊าซทั่วไป แบบจำลองอื่น ๆ ที่สามารถนำมาใช้ศึกษา พฤติกรรมวิกฤตได้เช่น แบบจำลองไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg model) แบบจำลองวงกลม (spherical model) แต่ก็มีข้อบ่ง ร้องเหมือนกับแบบจำลองไอซิงชนิดสองมิติ

ปัจจุบันยังไม่มีวิธีการแก้ปัญหาของไอซิงแลตทิซสามมิติที่อุณหภูมิวิกฤตเพื่อให้ ได้คำตอบที่แน่นอน (Stanley. 1971 : 15) เพื่อให้ได้คำตอบใกล้เคียงกับผลจากการ ทดลองการประมาณค่าแบบต่าง ๆ เช่น การประมาณค่าแบบพาเคต์ (Pade' approximation) การประมาณค่าแบบเบทเท่ (Bethe approximation) หรือการประมาณค่าแบบक्रमเมอร์-

แวนเนียร์และกิคุจิ (Kramers-Wannier and Kikuchi approximation) จะมีผลช่วยในการแก้ปัญหของไอซิ่งแลตทิซสามมิติที่อุณหภูมิวิกฤต ดังแสดงในภาพประกอบ 4



ภาพประกอบ 4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าความร้อนจะเพาะกับอุณหภูมิ เมื่อ

- แสดงผลการคำนวณของออนซากะเกอร์
- - - - - แสดงผลการคำนวณโดยใช้วิธีการประมาณค่าแบบแครมเมอร์-แวนเนียร์และกิคุจิ
- แสดงผลการคำนวณโดยใช้วิธีการประมาณค่าแบบเบทเทห์

ดัลตันและวูด (Dalton and Wood, 1969 : 1271) ใช้วิธีการประมาณค่าแบบพาเคห์หาค่าวิกฤตของพลังงานภายใน (internal energy) เอนโทรปี (entropy) สมมาตร (สมมาตร ชิดยูทึ. 2526 : 70) ใช้วิธีเอกซ์ตราโปลเลต (extrapolated method) หาค่าวิกฤตของอุณหภูมิความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่ปรากฏว่า ค่าที่ได้ใกล้เคียงกับค่าที่คำนวณ

โดยดอมบ์และดัลตัน (Domb and Dalton, 1961 : 859)

ในการศึกษาแบบจำลองไอซิงแลตทิซกึ่งสามมิติ เราพิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลในแลตทิซไซต์ (lattice site) มอริตาและฮิโรเกะ (Morita and Hiroike, 1961 : 537) ได้พิจารณาผลของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสี่อันดับแรก โดยกำหนดให้ความแรง (potential strength) ของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันแต่ละอันดับมีค่าไม่เท่ากัน ดอมบ์และดัลตัน (Domb and Dalton, 1966 : 873) ได้พิจารณาผลของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรก โดยกำหนดให้ความแรงของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทุกอันดับมีค่าเท่ากัน จะเห็นว่าการศึกษาของมอริตาและฮิโรเกะนั้นใกล้เคียงความเป็นจริงมากกว่า เพราะอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลของกาซแบบไอซิงจะลดลงเมื่อระยะทางเพิ่มมากขึ้น

ปัญหาที่นักค้นคว้าสนใจก็คือ การกระจายพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ (Helmholtz free energy) ของไอซิงแลตทิซกึ่งสามมิติ โดยมีอุณหภูมิและความหนาแน่นเป็นตัวแปร เพราะวิธีนี้เป็นวิธีที่สะดวกในการศึกษาปริมาณต่าง ๆ ใกล้จุดวิกฤต เช่น ค่าความร้อนจำเพาะ สภาพอัตรากว้าง เอนโทรปีและสมการสถานะเป็นต้น แมเออร์ แฟร์เรลและซอมเมอร์เฟลด์ (Meijer, Farrell and Sommerfeld, 1972 : 684) ได้ใช้การกระจายคลัสเตอร์ (cluster expansion) กับอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลโดยตรงเพื่อหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแบบจำลองของแลตทิซกึ่งสามมิติแบบคิวบิกเซนเตอร์ (body center cubic lattice) โดยพิจารณาเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดสี่อันดับแรก สมมาตร (สมมาตร ชิดญาทิ : 2526 : 70) ใช้วิธีการกระจายคลัสเตอร์หาค่าความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่ใกล้จุดวิกฤตของไอซิงแลตทิซกึ่งสามมิติแบบเฟซเซนเตอร์คิวบิก (face-centered cubic lattice) โดยพิจารณาเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดสามอันดับแรก ซุลลิแวน (Sullivan, 1970 : 94) ใช้วิธีการกระจายคลัสเตอร์หาค่าสภาพอัตรากว้างใกล้จุดวิกฤตของไอซิงแลตทิซกึ่งสามมิติแบบคิวบิก (simple cubic lattice)

งานวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยมีความประสงค์ที่จะศึกษาค่าเอนโทรปี เมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤตและหาสมการสถานะของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซซนิกเฟส เช่น เทอร์คิวบิกแลตทิซในสามมิติ สำหรับการเขียนของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดสามอันดับแรกมีค่าความแรงเท่ากัน

ความมุ่งหมายของการวิจัย

1. เพื่อคำนวณหาค่าเอนโทรปีของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซซนิกเฟส เช่น เทอร์คิวบิกในสามมิติ ณ บริเวณวิกฤตและเปรียบเทียบกับค่าของคอมบ์และกาลตัน
2. เพื่อคำนวณหาสมการสถานะที่อุณหภูมิสูงที่สุดของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซซนิกเฟส เช่น เทอร์คิวบิกแลตทิซในสามมิติ

ความสำคัญของการวิจัย

เป็นการยืนยันความถูกต้องของทฤษฎีที่มีอยู่ดั้งเดิม ศึกษาในความสัมพันธ์ของ S กับ T และ P กับ p ที่ได้จากวิธีการกระจายคอลัสเตอร์

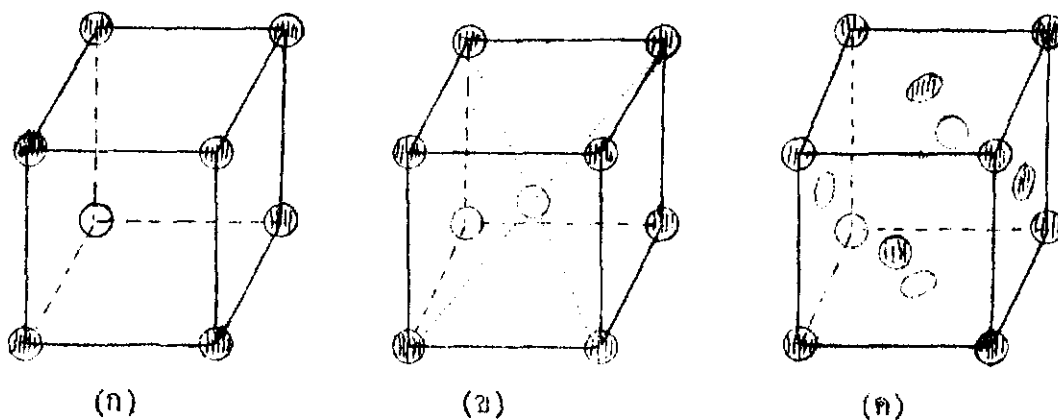
ขอบเขตของการวิจัย

พิจารณาอันตรกิริยาระหว่างเป็นของโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดสามอันดับแรก และถือว่าความแรงของอันตรกิริยาทุกอันดับมีค่าเท่ากันและเท่ากับ 1 ตลอดจนไม่พิจารณาถึงผลของสนามแม่เหล็กภายนอก เพื่อคำนวณหาการกระจายอนุกรมคัลเลเตอร์ของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของอุณหภูมิอันดับที่หกโดยมีฟังก์ชันโพลิโนเมียล (polynomial) ของความหนาแน่นเป็นสัมประสิทธิ์ดีฟเฟอเรนเชียลของการกระจายอิสระเพื่อหาค่าของเอนโทรปีและสมการสถานะ

คำนิยามศัพท์เฉพาะ

1. อุณหภูมิวิกฤต (critical temperature) คืออุณหภูมิที่ทำให้ของเหลวและกาซเปลี่ยนสถานะกลับไม่กลับมาได้อย่างต่อเนื่อง

2. แบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซ (Ising lattice gas model) เป็นแบบจำลองที่สร้างขึ้นเมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลของแลตทิซกาซ ซึ่งมีโมเลกุลอยู่กันอย่างไม่ต่อเนื่องคือ มีการจัดวางตัวในโครงสร้างเป็นแบบแลตทิซ แบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซมีอยู่ 3 ชนิด ดังแสดงในภาพประกอบ 5



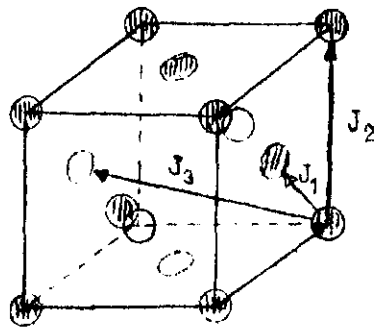
ภาพประกอบ 5 แสดงแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซชนิด ซิมเปิลคิวบิก บอดีเซนเตอร์คิวบิก และเฟสเซนเตอร์คิวบิก

2.1 ซิมเปิลคิวบิกแลตทิซ (simple cubic lattice) มีลักษณะโครงสร้างเป็นลูกบาศก์ซึ่งมีด้านแต่ละด้านยาวเท่ากันและมีโมเลกุลอยู่เฉพาะตามมุมต่าง ๆ ของลูกบาศก์เท่านั้น

2.2 บอดีเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (body-centered cubic lattice) มีโครงสร้างเหมือนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซแต่มีโมเลกุลอีกโมเลกุลหนึ่งอยู่ตรงกลางของลูกบาศก์

2.3 เฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ (face-centered cubic lattice) มีลักษณะโครงสร้างเหมือนซิมเปิลคิวบิกแลตทิซกาซและมีโมเลกุลอยู่ที่จุดกึ่งกลางของด้านแต่ละด้าน

3. อันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุล เป็นแรงที่เกิดขึ้นระหว่างสปินของโมเลกุลที่อยู่ตามตำแหน่งต่าง ๆ ในแลตทิซกาซ เช่น อันตรกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุด อันตัมที่หนึ่ง สองและสาม สามารถแทนได้ด้วย σ_1, σ_2 และ σ_3 ดังภาพประกอบ 6



ภาพประกอบ 6 แสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลอันดับที่หนึ่ง สองและสาม

4. เอนโทรปี (entropy) เป็นค่าที่แสดงสถานะของระบบของเหลว-ก๊าซ มีค่าค่าหนึ่ง เมื่ออุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิวิกฤตและความหนาแน่นเท่ากับค่าความหนาแน่นวิกฤต

5. สมการสถานะ (equation of state) เป็นสมการสถานะของระบบของเหลว-ก๊าซ ซึ่งมีรูปแบบสมการเป็น $f(P, \rho, T) = 0$

บทที่ 2

ทฤษฎีและเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ทฤษฎี

พลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซ (energy of Ising lattice gas model)

ในปี ค.ศ. 1925 ไอซิง (E. Ising, 1925:253) ได้สร้างแบบจำลองของสารแม่เหล็กเฟอร์โรจีน โดยถือว่าแต่ละโมเลกุลในแลตทิซกาซนั้นมีสปินอยู่สองลักษณะคือ มีสปินในทิศทางขึ้นและสปินในทิศทางลงซึ่งโมเลกุลเหล่านี้จะมีอันตรกิริยาระหว่างกัน อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่มีสปินขนานเดียวกันเท่ากับ $-J$ และอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่มีสปินขนานตรงข้ามกันเท่ากับ J

พลังงานของไอซิงแลตทิซกาซเมื่อพิจารณาถึงผลของสนามแม่เหล็กภายนอก B สามารถเขียนได้เป็น

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

ซึ่ง $E_I \{S_i\}$ เป็นพลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาซ

J_{ij} เป็นพลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล i และ j กรณีระบบที่ทุกค่า J_{ij} มีค่าเท่ากับ J จะได้ว่า เมื่อ $J > 0$ ระบบจะมีสภาพเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร (ferromagnetism) และถ้า $J < 0$ ระบบจะมีสภาพต้านทานการเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์โร (antiferromagnetism)

$S_i S_j$ เป็นอันตรกิริยาระหว่างสปินโมเลกุล i และ j มีค่าเป็น $+1$ เมื่อสปินมีทิศขนานแบบเดียวกัน $(+1)$ และเท่ากับ -1 เมื่อสปินมีทิศขนานแบบตรงข้ามกัน (-1)

$\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j$ เป็นพลังงานรวมทั้งหมดเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างสปินของทุกโมเลกุล i และ j

$B \sum_{i=1}^N S_i$ เป็นพลังงานรวมทั้งหมดของสปินของโมเลกุลเนื่องจากสนามแม่เหล็กภายนอก B

สัญลักษณ์ I เป็นตัวย่อของ Ising และ $\langle ij \rangle$ จะแทนคู่ของตำแหน่งที่มีอันตรกิริยาอยู่ใกล้กันมากที่สุด โดยที่ $\langle ij \rangle$ กับ $\langle ji \rangle$ จะไม่แตกต่างกัน ดังนั้นผลรวมทั้งหมดของ $\langle ij \rangle$ จะมีอยู่ $N/2$ เทอม เมื่อ N เป็นจำนวนของตำแหน่งโมเลกุลใด ๆ ที่วางอยู่ใกล้กันมากที่สุด เช่น $N = 12$ สำหรับคู่โมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดอันเดียวแรกในเฟสเซนเทอร์คิวบิกแลตทิซ ใน ลามมัต

ในการนิยามแม่เหล็กภายนอกมีค่าเป็นศูนย์ พลังงานของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกายสามารถเขียนได้เป็น

$$E_I \{S_i\} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (12)$$

พาร์ติชันฟังก์ชันและพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ (partition function and helmholtz free energy)

พิจารณาระบบอนุภาคที่เหมือนกัน N ซึ่งแต่ละอนุภาคมีมวล m และมีโคออร์ดิเนต เป็น $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ อยู่ภายในโดเมน (domain) Ω ซึ่งมีปริมาตร $V = V(\Omega)$ แคนอนิคัลพาร์ติชันฟังก์ชัน (canonical partition function) ของระบบเขียนได้เป็น

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N \exp \left[-\beta V_N \right] \quad (3)$$

ซึ่ง $\beta = 1/kT$ และ k เป็นค่าคงที่โบลต์ซมาน

$V_N = V_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = V(\Omega)$ เป็นพลังงานศักย์อันเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคทั้งหมด

ในการนิยามแลตทิซกายเครื่องหมายอันตรรกในสมการ (3) สามารถเขียนแทนได้ด้วยเครื่องหมายแสดงผลบวกของตำแหน่ง $i, j = 1, 2, \dots, L$ โดยที่ L ก็ือจำนวนทั้งหมดของตำแหน่งต่าง ๆ ในแลตทิซกาย

ดังนั้น แคนอนิคัลพาร์ติชันฟังก์ชันของไอซิงแลตทิซกาย เขียนได้เป็น

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \sum_{r_1=1}^L \sum_{r_2=1}^L \dots \sum_{r_N=1}^L \exp[-\beta V(q)] \quad (4)$$

สำหรับระบบอนุภาคที่มี N โมเลกุลจะมีจำนวนคู่ที่ต่างกันอยู่ $N(N-1)/2$ คู่ นั่นคือ $V(q)$ จะเป็นผลรวมของ $N(N-1)/2$ พจน์ ดังนั้น

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

ซึ่ง $v(r_{ij}) = v(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ เป็นพลังงานศักย์ของคู่มอเลกุลตัวที่ i และ j

แทนอนุพันธ์อันดับฟังก์ชันของไอซิงแบบค่าภายใน จึงสามารถเขียนได้ใหม่เป็น

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \sum_{r_1=1}^L \sum_{r_2=1}^L \dots \sum_{r_N=1}^L \exp \left[-\beta \sum_{i>j}^N \sum_{j=1}^{N-1} v(r_{ij}) \right] \quad (6)$$

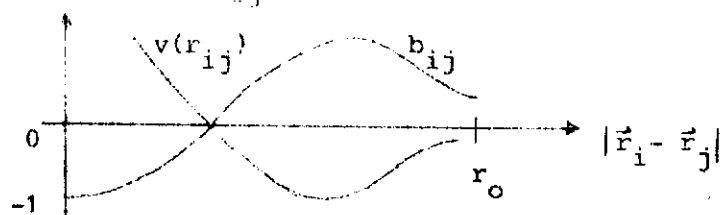
จากความจริงที่ว่า ค่าเอกซ์โปเนนเชียล (exponential) ของผลรวมจะมีค่าเท่ากับผลคูณของเอกซ์โปเนนเชียล ดังนั้น

$$\exp \left[-\beta \sum_{i>j}^N \sum_{j=1}^{N-1} v(r_{ij}) \right] = \prod_{N \geq i > j \geq 1} \exp[-\beta v(r_{ij})] \quad (7)$$

เพื่อความสะดวก เราจะนิยามฟังก์ชันใหม่

$$\exp[-\beta v(r_{ij})] = 1 + b_{ij} \quad (8)$$

ซึ่ง b_{ij} เป็นอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลตัวที่ i และ j โดยที่ $v(r_{ij})$ และ b_{ij} มีความสัมพันธ์กันกับระยะทาง r_{ij} ดังภาพประกอบ 7



ภาพประกอบ 7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $v(r_{ij})$ และ b_{ij} กับระยะทาง r_{ij}

ดังนั้น

$$\prod_{N \geq i > j \geq 1} \exp[-\beta v(r_{ij})] = \prod_{N \geq i > j \geq 1} (1 + b_{ij}) \quad (9)$$

โดยการแทนค่าสมการ (9) ลงในสมการ (6) แล้วกระจายเราจะได้

$$Q(N, \Omega) = \frac{1}{N!} \sum_{r_1=1}^L \sum_{r_2=1}^L \cdots \sum_{r_N=1}^L \left\{ 1 + \sum_{\langle ij \rangle} b_{ij} + \sum_{\langle ij \rangle \langle i'j' \rangle} b_{ij} b_{i'j'} + \dots \right\} \quad (10)$$

จากแคนอนิคัลพาร์ติชันฟังก์ชัน เราสามารถหาพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ได้ (Huang, 1963: 158)

$$- \beta F = \ln Q(N, \Omega) \quad (11)$$

ซึ่ง F เป็นพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ต่อจำนวนอนุภาค

ดังนั้น

$$- \beta F = \ln \frac{1}{N!} \sum_{r_1=1}^L \sum_{r_2=1}^L \cdots \sum_{r_N=1}^L \left\{ 1 + \sum_{\langle ij \rangle} b_{ij} + \sum_{\langle ij \rangle \langle i'j' \rangle} b_{ij} b_{i'j'} + \dots \right\} \quad (12)$$

พลังงานอิสระดังแสดงในสมการ (12) นี้ได้จากสมมติฐานที่ว่า โมเลกุลของแลตทิซทุกสองโมเลกุลจะอยู่ในตำแหน่งเดียวกันไม่ได้ ถ้าโมเลกุลสองโมเลกุลอยู่ในตำแหน่งเดียวกันจะพบว่า $b_{ii} = -1$ หรือ $1 + b_{ii} = 0$ นั่นคือ พลังงานศักย์ที่จุตกำเนิดมีค่าเป็นอนันต์ (infinity) (Huang, 1963: 298)

พิจารณาพจน์แรกของสมการพลังงานอิสระ คือ $\sum_{r_1=1}^L \sum_{r_2=1}^L \cdots \sum_{r_N=1}^L 1$ สำหรับ 1 โมเลกุลแต่ละผลรวมจะมีค่าเท่ากับ L ดังนั้นสำหรับ N โมเลกุลผลรวมทั้งหมดจะเป็น L^N ถ้าไม่พิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล คือ $b_{ij} = 0$ ค่า $\frac{L^N}{N!}$ สำหรับพาร์ติชันฟังก์ชันที่ได้จะให้สมการที่แสดงสถานะของก๊าซอุดมคติ นั่นคือ $PV = NkT$ ผลรวมของพจน์ที่สองของพลังงานอิสระสมนัยกับการชน (collisions) กันของคู่ของโมเลกุล ซึ่งมีอยู่เป็นจำนวน

$N(N-1)/2$ คู่ เนื่องจากมี $N-2$ โมเลกุลซึ่งต่างจากโมเลกุลที่ i และที่ j ดังนั้นเมื่อรวม $N-2$ โมเลกุลจะได้ค่า L^{N-2} นั่นคือ

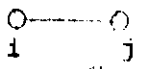
$$\prod_{r_1=1}^L \prod_{r_2=1}^L \cdots \prod_{r_{N-2}=1}^L \sum_{i>j} b_{ij} = L^{\frac{N-2}{2} \frac{N(N-1)}{2}} \sum_{i>j} \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} \quad \dots (13)$$

พจน์ต่อ ๆ ไปก็สามารถคำนวณได้โดยวิธีคล้าย ๆ กัน ดังนั้นพลังงานอิสระสามารถเขียนได้เป็น

$$-BF = \ln \left[\frac{1}{N!} \left\{ \frac{L^N}{2} + \frac{N(N-1)L^{N-2}}{2} \sum_{i>j} \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} + \dots \right\} \right] \quad \dots (14)$$

ในกรณีที่ N และ L มีค่าเข้าใกล้ค่าอนันต์ และ $N/L = \rho$ ดังนั้น $N(N-1)/2$ มีค่าเข้าใกล้ $N^2/2$ พลังงานอิสระสามารถเขียนได้เป็น

$$-BF = \ln \left[\frac{L^N}{N!} \left\{ 1 + \frac{\rho^2}{2} \sum_{i>j} \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} + \dots \right\} \right] \quad \dots (15)$$

การรวมกันหลายครั้งของ b_{ij} ก็คือ อันตรกิริยาระหว่างคู่ของโมเลกุลที่ต่างกัน จากหนังสือกลศาสตร์เชิงสถิติของเมเยอร์ (Mayer 1940:286) b_{ij} สามารถแทนได้ด้วยแผนภาพ  เมื่อวงกลมแทนโมเลกุลที่ i และที่ j และเส้นตรงแทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งสอง

เนื่องจาก $\ln AB = \ln A + \ln B$ ดังนั้น

$$-BF = \ln \frac{L^N}{N!} + \ln \left\{ 1 + \frac{\rho^2}{2} \sum_{i>j} \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} + \dots \right\} \quad \dots (16)$$

โดยการใช้การประมาณค่าแบบสเตอร์ลิง (Stirling's approximation) ของ $\ln N! = N \ln N - N$ และจาก $N/L = \rho$ ดังนั้น

$$\ln \frac{L^N}{N!} = L(\rho - \rho \ln \rho)$$

$$\ln \frac{L^N}{N!} = \sum_{r=1}^L p(1 - \ln p) \quad \dots (17)$$

สมการ (16) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$- \beta F = \sum_{r=1}^L p(1 - \ln p) + \ln \left\{ 1 + \frac{p^2}{2!} \sum_{i>j}^N \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} + \dots \right\} \quad \dots (18)$$

พจน์ที่สองของพลังงานอิสระแสดงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล แผนภาพที่ใช้แทนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลนั้นมีอยู่ 2 ชนิด คือ แผนภาพลดทอนไม่ได้ (irreducible diagram) ซึ่งมีลักษณะเป็น  ,  ,  เป็นต้น และแผนภาพลดทอนได้ (reducible diagram) ซึ่งมีลักษณะเป็น  ,  ,  เป็นต้น จะเห็นได้ว่าแผนภาพลดทอนได้เป็นส่วนประกอบของแผนภาพลดทอนไม่ได้ ดังนั้นเราจะพิจารณาเฉพาะแผนภาพที่ลดทอนไม่ได้

เพื่อที่จะพิจารณาการกระจายอนุกรมของอนุกรมสูง ๆ ในพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ เราเขียนพจน์เอกซโพเนนเชียลในพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ให้อยู่ในรูปของอนุกรม เทเลอร์ (Taylor series) ได้ ถ้า b_{ij} จะแสดงทั้งส่วนที่ไม่ขึ้นกับอนุภาค (hard core) และส่วนที่ขึ้นกับอนุภาค ถ้าเรานิยามให้

$$v(r_{ij}) = - \beta J_{ij} S_i S_j$$

$$\begin{cases} - \beta J_{ij} & \text{เมื่อ } r_i \neq r_j \\ \infty & \text{เมื่อ } r_i = r_j \end{cases} \quad \dots (19)$$

ดังนั้นจากสมการ (18) จะได้ว่า อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลส่วนที่ไม่ขึ้นกับอนุภาค คือ $b_0 = -1$, $r_i \neq r_j$

อันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลส่วนที่ขึ้นกับอนุภาค

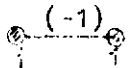
$$b_{ij} = \exp \left[\beta J_{ij} \right] - 1 \quad , \quad r_i \neq r_j \quad \dots (20)$$

โดยการกระจายอนุกรมแบบเทเลอร์ (Taylor series)

$$b_{ij} = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{(\beta J)^N}{N!} = \beta J + \frac{(\beta J)^2}{2!} + \dots \quad \dots (21)$$

จะเห็นได้ว่า พจน์ที่สองในพลังงานอิสระประกอบด้วยวงกลมและบอนด์ (bond)

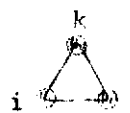
แบบ b_0, b_{ij} เชื่อมต่อระหว่างวงกลม ในกรณีที่ $r_i = r_j$, b_0 จะเท่ากับ +1 ซึ่งสามารถ

แทนด้วยแผนภาพ  นั่นคือ โมเลกุลทั้งสองอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกัน วงกลมทุก

วงสามารถใช้แทนโมเลกุลและบอนด์ระหว่างวงกลมจะมีความแรงเท่ากับ βJ ถ้าระหว่างวงกลม

นั้นมีบอนด์ทั้งหมด N บอนด์ เราจะแทนด้วย βJ^N เนื่องจากบอนด์ต่าง ๆ ระหว่างวงกลมนั้น

เหมือนกันและสลับที่กันได้

พิจารณาแผนภาพ  ซึ่งแทนด้วย $b_{ij}b_{jk}b_{ki}$ เราสามารถกระจายแต่ละ พจน์ของ b ให้เป็นฟังก์ชันของ βJ ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} b_{ij}b_{jk}b_{ki} &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\beta J)^l}{l!} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta J)^m}{m!} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} \\ &= \beta^3 J_{ij} J_{jk} J_{ki} \left\{ 1 + \frac{\beta}{2!} (J_{ij} + J_{jk} + J_{ki}) + \frac{\beta^2}{3!} (J_{ij}^2 + J_{jk}^2 + J_{ki}^2) \right. \\ &\quad + \frac{\beta^2}{2!2!} (J_{ij} J_{jk} + J_{jk} J_{ki} + J_{ki} J_{ij}) + \frac{\beta^3}{2!2!2!} (J_{ij} J_{jk} J_{ki} + \dots) + \dots \left. \right\} \quad \dots (22) \end{aligned}$$

พจน์ $b_{ij}b_{jk}b_{ki}$ สามารถแทนได้ด้วยแผนภาพดังนี้

$$\begin{aligned} \text{Diagram of triangle } i, j, k &= \beta J \text{ (triangle)} + \left[\begin{aligned} &\frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ (triangle with one double bond)} + \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ (triangle with two double bonds)} + \dots \end{aligned} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^3}{3!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 2: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^3}{3!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 3: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^3}{3!} \text{ on } ij. \end{array} \right] \\
& + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 4: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 5: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 6: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \end{array} \right] \\
& + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 7: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 8: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \\ \text{Diagram 9: Triangle } i-k-j \text{ with } \beta J \text{ on edges } ik, kj, \text{ and } \frac{(\beta J)^2}{2!} \text{ on } ij. \end{array} \right] + \dots
\end{aligned}$$

โดยการแทนบอนด์แบบ b_{ij} ด้วยค่า βJ จำนวน N บอนด์ พลังงานอิสระเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned}
-\beta F/L &= p(1 - \ln p) + \text{ผลรวมทั้งหมดของแผนภาพที่เชื่อมต่อกันด้วยบอนด์หนึ่งบอนด์และมากกว่าหนึ่งบอนด์} \\
&\text{โดยที่แผนภาพเหล่านี้ประกอบด้วยวงกลมที่มีความหนาแน่น } \phi(r) \\
&\text{และบอนด์แบบ } b_0 \text{ และ } \beta J \text{ เชื่อมระหว่างวงกลมเหล่านั้น} \quad \dots (23)
\end{aligned}$$

เนื่องจากพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ประกอบด้วยส่วนที่ขึ้นกับอุณหภูมิและส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิซึ่งจะมีแผนภาพเป็นเส้นประเชื่อมต่อกันระหว่างวงกลมเท่านั้น แสดงว่าอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทั้งสองไม่มี ดังนั้นพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิจึงสามารถคำนวณได้โดยตรงจากทฤษฎีบททวินาม (binomial theorem) จำนวนวิธีที่โมเลกุล N โมเลกุลจะอยู่ใน L ตำแหน่ง คือ $\frac{L^N}{N! (L-N)!}$ ดังนั้นพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของส่วนที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ คือ

$$-\beta F = \ln \left[\frac{L^N}{N! (L-N)!} \right] \quad \dots (24)$$

โดยใช้การประมาณค่าแบบสเตอร์ลิงและจาก $N/L = p$ เราจะได้

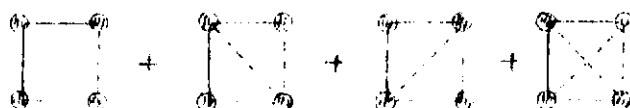
$$-\beta F = - \sum_{r=1}^L \left\{ p(1-p)^{r-1} + (1-p) \ln(1-p)^{r-1} \right\} \quad \dots (25)$$

โดยการเปรียบเทียบกับสมการ (23) จะพบว่า

$$\sum_{r=1}^L (p - p \ln p) + \text{ผลรวมของแผนภาพที่มีบอนด์แบบ } b_0 \text{ และวงกลม } p(r) \\ = - \sum_{r=1}^L \left\{ p + (1-p) \ln(1-p) \right\}$$

พิจารณาแผนภาพซึ่งประกอบวงกลมวงหนึ่งหรือหลายวงที่มีเส้นประยื่นออกมาดังภาพ

ประกอบ 8



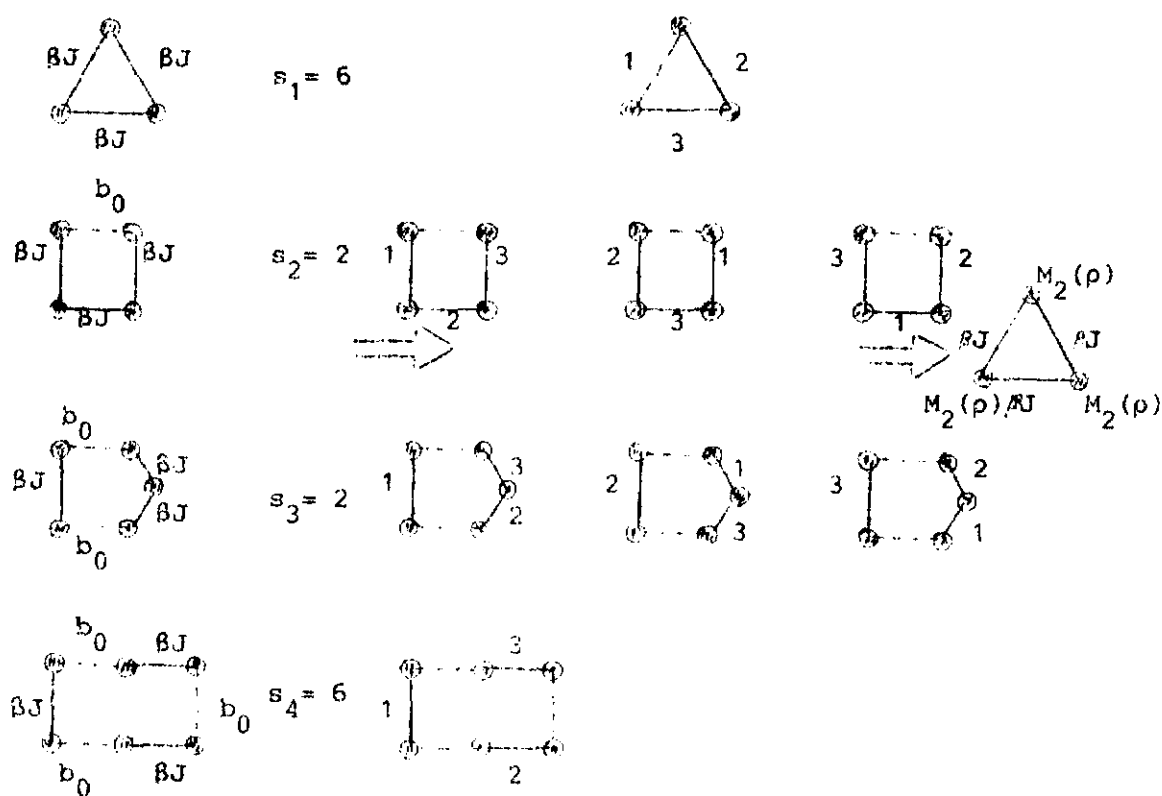
$$(-1)^2 + (-1)^3 + (-1)^3 + (-1)^4 = 0$$

ภาพประกอบ 8 แสดงลักษณะของแผนภาพที่มีเส้นประยื่นออกมาจากวงกลม

เส้นประเหล่านี้จะแทนบอนด์แบบ b_0 ซึ่งวงกลมที่เชื่อมอยู่ทั้งหมดนั้นอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกัน เนื่องจากบอนด์แบบ b_0 มีค่าเท่ากับ 1 ดังนั้นผลรวมของแผนภาพที่มีเส้นประจะต้องเป็นศูนย์และหลังจากอินทิเกรตเขียนได้เป็น

$$-BF/L = - \left\{ p \ln p + (1-p) \ln(1-p) \right\} + \text{ผลรวมทั้งหมดของแผนภาพที่เชื่อมต่อกันด้วยบอนด์} \\ \text{หนึ่งบอนด์และมากกว่าหนึ่งบอนด์ ซึ่งประกอบด้วยบอนด์แบบ } b_0, \beta, \text{ และวงกลม } \\ p(r) \text{ โดยที่แต่ละวงกลมจะต้องมีบอนด์แบบ } \beta, \text{ ยื่นออกมาอย่างน้อยหนึ่งบอนด์} \\ \dots (26)$$

แผนภาพลักษณะต่าง ๆ นี้จะพิจารณาให้ละตัวกัน โดยอาศัยสมการทางทฤษฎีการให้ $\mu_n(p)$ เป็นตัวประกอบน้ำหนัก (weight factor) ของวงกลม $p(r)$ โดยที่ n เป็นจำนวนของบอนด์ที่เชื่อมออกมาจากวงกลม เนื่องจากบอนด์แบบ b_0 จะเกิดขึ้นเฉพาะวงกลมที่อยู่ตำแหน่งเดียวกัน ดังนั้นวงกลมเหล่านี้สามารถยุบ (collapse) ลงมาเป็นวงกลมเดียวกันได้ โดยมีบอนด์แบบ b_0 เชื่อมต่อกันไว้ ดังตัวอย่างแสดงในภาพประกอบ 9



ภาพประกอบ 9 แสดงแผนภาพวงกลมที่ยับลงมาอยู่ตำแหน่งเดียวกันได้

ภาพประกอบ 9 แสดงแผนภาพแบบสามเหลี่ยมซึ่งแต่ละวงจะมีบอนด์แบบ βJ ล้อมรอบบอนด์ออกมา เราจึงใช้ $M_2(p)$ เป็นตัวประกอบนำหน้าของวงกลมในแผนภาพแบบนี้ ดังนั้นตัวประกอบนำหน้าของแผนภาพสามเหลี่ยม คือ $M_2(p)M_2(p)M_2(p) = p^3 - 3p^4 + 3p^5 - p^6$

จากภาพประกอบ 9 จะเห็นว่าแผนภาพทั้งสี่ชุดนี้จะมีบอนด์ βJ สามบอนด์เหมือนกัน และเท่ากับ $(\beta J)^3$ เมื่อนำทุกชุดของแผนภาพที่มีจำนวนบอนด์เท่ากันและตัวประกอบนำหน้า $M_2(p)$ ของวงกลมที่มีบอนด์ βJ มารวมกันจะได้ค่าเป็น $(\beta J)^3(p^3 - 3p^4 + 3p^5 - p^6)$ ซึ่งเท่ากับ $(\beta J)^3 M_2(p)M_2(p)M_2(p)$ ผลที่ได้ประกอบด้วยบอนด์แบบ βJ และตัวประกอบนำหน้า $M_2(p)$ ของวงกลมแต่ละวงในแผนภาพแบบสามเหลี่ยม

สูตรทั่วไปของตัวประกอบนำหน้า $M_n(p)$ นั้นขึ้นอยู่กับจำนวนบอนด์แบบ βJ ที่ยื่นออกมาจากวงกลม เอสฟานเดียรีและคนอื่น ๆ (Esfandiari and other, 1981:1301)

ได้แสดงไว้ดังนี้

$$M_n(\rho) = \sum_{m=1}^n W_{n,m} \rho^m \quad \dots (27)$$

เมื่อ $W_{n,m} = mW_{n-1,m} + (n-1)W_{n-1,m-1}$ ซึ่ง $n \geq 2$ และ $1 \leq m \leq n$
โดยที่ $W_{1,1} = 1$ และ $W_{n,m} = 0$ ถ้า $m = 0$ หรือ $m > n$

ในกรณีที่ $n = 1, 2, \dots, 6$ ค่า $M_n(\rho)$ สามารถเขียนได้ดังนี้

$$M_1(\rho) = \rho$$

$$M_2(\rho) = \rho(1 + \rho)$$

$$M_3(\rho) = \rho - 3\rho^2 + 2\rho^3$$

$$M_4(\rho) = \rho - 7\rho^2 + 12\rho^3 - 6\rho^4$$

$$M_5(\rho) = \rho - 15\rho^2 + 50\rho^3 - 60\rho^4 + 24\rho^5$$

$$M_6(\rho) = \rho - 31\rho^2 + 180\rho^3 - 390\rho^4 + 360\rho^5 - 120\rho^6$$

ในการหาพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์นั้น เมเยอร์ แฟร์เรลล์และซอมเมอร์เฟลด์

(Meiyer, Farrell and Sommerfeldt, 1972:115) ได้แสดงสมการพลังงานอิสระ
เฮล์มโฮลทซ์ไว้ดังนี้

$$- \beta F/L = - \left\{ \rho \ln \rho + (1-\rho) \ln (1-\rho) \right\} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{2n} C(n,m) \rho^m K^n \quad \dots (28)$$

เมื่อ $K = \beta U$

$C(n,m)$ เป็นสัมประสิทธิ์ของ $\rho^m K^n$

n เป็นผลรวมของบอนด์ของอันตรกิริยาทุกอันคัมที่พิจารณา

พิจารณาแผนภาพที่มีสามบอนด์ ดังแสดงในภาพประกอบ 17



ภาพประกอบ 18 แสดงแผนภาพที่มีบอนด์สามบอนด์

เนื่องจากแผนภาพแต่ละแบบมีสามบอนด์ ดังนั้นความแรงของอันตรกิริยาจึงเป็น $(\beta v)^3$ และถ้าเราพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดของอันดับแรก คือ $n = n_1 + n_2 = 3$ ซึ่ง n_1 และ n_2 เป็นจำนวนบอนด์ของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลทุกอันตัวมีค่าเท่ากับ 1 ดังนั้น $s_1 = s_2 = 1$

พิจารณาแผนภาพแบบสามเหลี่ยม เราสามารถจัดให้ค่า $n_1 + n_2 = 3$ ได้ 4 แบบคือ

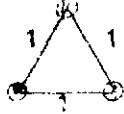
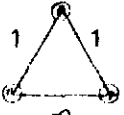
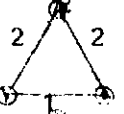
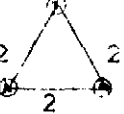
$$1 \quad n_1 = 3 \quad n_2 = 0$$

$$2 \quad n_1 = 2 \quad n_2 = 1$$

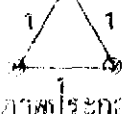
$$3 \quad n_1 = 1 \quad n_2 = 2$$

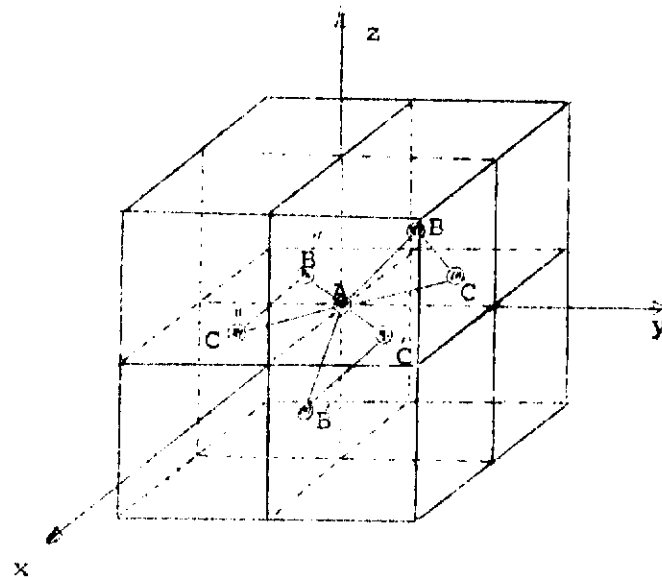
$$4 \quad n_1 = 0 \quad n_2 = 3$$

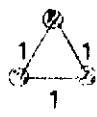
จำนวนของแผนภาพสามเหลี่ยมที่สามารถบรรจุลงในแลตทิซกาศหนึ่งหน่วยเฟสเซนเตอร์คิวบิก นั้นมีค่าเท่ากับ

จำนวนวิธีที่แผนภาพ		บรรจุในแลตทิซ / s_1
+ จำนวนวิธีที่แผนภาพ		บรรจุในแลตทิซ / s_2
+ จำนวนวิธีที่แผนภาพ		บรรจุในแลตทิซ / s_3
+ จำนวนวิธีที่แผนภาพ		บรรจุในแลตทิซ / s_4

โดยที่เลขสมมาตร $s_1 = 6$ $s_2 = 2$ $s_3 = 2$ และ $s_4 = 6$

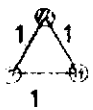
การคำนวณค่าจำนวนวิธีที่แผนภาพ  บรรจุลงในไอซิ่งแลตทิซกาศหนึ่งหน่วยเฟสเซนเตอร์คิวบิกหนึ่งหน่วยได้ดังนี้ พิจารณาภาพประกอบ 11 ซึ่งเป็นภาพของไอซิ่งแลตทิซกาศหนึ่งหน่วยเฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ



ภาพประกอบ 11 แสดงวิธีคำนวณหาจำนวนวิธีที่แผนภาพ  สามารถบรรจุลงในไอซิ่งแลตทิซภาพชนิดเฟซเซนเตอร์คิวบิก

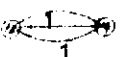
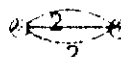
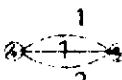
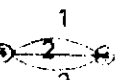
เนื่องจากแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซภาพชนิดเฟซเซนเตอร์คิวบิกมีลักษณะโครงสร้างเป็นรูปลูกบาศก์ซึ่งมีโมเลกุลอยู่ที่มุมต่าง ๆ ของลูกบาศก์และที่จุดกึ่งกลางของพื้นผิวแต่ละด้าน สมมติว่าความยาวแต่ละด้านของเฟซเซนเตอร์คิวบิกเท่ากับ 1 หน่วย ดังนั้นอันตรกิริยาอันดับที่หนึ่ง สอง และสามจะมีระยะห่างเท่ากับ $1/\sqrt{2}$ หน่วย 1 หน่วย และ $\sqrt{3}/2$ หน่วยตามลำดับ

เนื่องจากแผนภาพ  แสดงถึงอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดอันหนึ่งที่หนึ่งทั้งสามมอนต์ แผนภาพ  จึงเป็นสามเหลี่ยมด้านเท่าที่มีแต่ละด้านความยาวเท่ากับ $1/\sqrt{2}$ หน่วย ในภาพประกอบ 11 ให้จุด A เป็นจุดเริ่มต้นแล้วลากเส้นตรงไปยังจุด B ในใด ๆ ให้ยาว $1/\sqrt{2}$ หน่วยแล้วพบว่าจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพ  ลงในแลตทิซได้นั้นมีค่าเท่ากับ 12 ถ้าใช้จุด B เป็นจุดเริ่มต้นแล้วลากเส้นตรงไปยังจุด C ในใด ๆ โดยให้มีความยาว $1/\sqrt{2}$ หน่วย แล้วจะพบว่า มีเพียง 4 วิธีเท่านั้นที่สามารถจะบรรจุแผนภาพ  ลงในแลตทิซได้ ต่อมาลากเส้นตรงจากจุด C ในใด ๆ กลับไปยังจุดเริ่มต้น A โดยให้มีความยาว $1/\sqrt{2}$ หน่วยเหมือนเดิม แล้วพบว่า มีเพียงหนึ่งวิธีเท่านั้นที่สามารถจะทำให้เส้นตรง CA มีความยาวเป็น $1/\sqrt{2}$ หน่วยเหมือนเดิมได้ ดังนั้นจำนวนวิธีที่สามารถ

บรรจุแผนภาพ  ลงในแลตทิซได้จึงเป็น $12 \cdot 4 \cdot 1 = 48$ วิธี

โดยวิธีการทำนองเดียวกันจะสามารถคำนวณได้ว่ามี 24 วิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพ  ลงในแลตทิซได้ สำหรับแผนภาพ  และ  ไม่สามารถบรรจุลงในแลตทิซได้ ดังนั้น

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} 8J \\ \triangle \\ M_2(p) \quad 8J \quad M_2(p) \end{array} &= M_2^3(p) \left\{ \frac{48}{6} \left(\frac{1}{kT} \right)^3 + 24 \left(\frac{1}{kT} \right)^3 + 0 + 0 \right\} \\ &= 20 \left(\frac{1}{kT} \right)^3 (6p^3 - 3p^4 + 3p^5 - p^6) \\ &= (20p^3 - 60p^4 + 60p^5 - 20p^6) \left(\frac{1}{kT} \right)^3 \quad \dots (29) \end{aligned}$$

ต่อไปพิจารณาแผนภาพ  จำนวนของแผนภาพที่สามารถบรรจุลงในแลตทิซได้จะมีค่าเหมือนกับกรณีอื่นที่เลขสมมาตรจะมีค่าต่างกัน โดยใช้วิธีการทำนองเดียวกันกับการหาจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพ  ลงในแลตทิซดังกล่าวมาแล้วข้างต้นพบว่า จำนวนของแผนภาพ  และแผนภาพ  ที่สามารถบรรจุลงในแลตทิซได้มีค่าเป็น 12 และ 6 ตามลำดับ เลขสมมาตรของแผนภาพทั้งสองนี้มีค่าเท่ากับ 12 ทั้งคู่ สำหรับจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพ  และ  ลงในแลตทิซจะเป็นศูนย์ทั้งคู่ ดังนั้น

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} 8J \\ \diamond \\ M_3(p) \quad 8J \quad M_3(p) \end{array} &= M_3^2(p) \left\{ \frac{12}{12} \left(\frac{1}{kT} \right)^3 + \frac{6}{12} \left(\frac{1}{kT} \right)^3 + 0 + 0 \right\} \\ &= 15 \left(\frac{1}{kT} \right)^3 (p^2 - 6p^3 + 13p^4 - 12p^5 + 4p^6) \\ &= (15p^2 - 90p^3 + 195p^4 - 180p^5 + 60p^6) \left(\frac{1}{kT} \right)^3 \quad \dots (30) \end{aligned}$$

เมื่อนำสมการ (29) และ (30) มารวมกันก็จะเป็นกรณีที่มีสมบัตินี้ทั้งหมดและ

ผลลัพธ์คือ

$$(15p^2 - 90p^3 + 195p^4 - 180p^5 + 60p^6) \left(\frac{1}{kT} \right)^3 = \sum_{m=2}^6 C(3, m) p^m k^3 \quad \dots (31)$$

โดยที่ $C(3,2) = 1.5, C(3,3) = 11, C(3,4) = -40.5, C(3,5) = 42$

และ $C(3,6) = -14$

สำหรับแผนภาพที่มีลักษณะซับซ้อนกว่ากรณีข้างต้นจะพบว่ามีความยุ่งยากมาก ในการที่จะคำนวณหาจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพลักษณะนั้น ๆ ลงในแลตติซได้ แต่จะสะดวกขึ้นมากถ้าใช้คอมพิวเตอร์ช่วยในการหาจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพแบบต่าง ๆ ลงในไอซิงแลตติซกาซซันคเฟยเชนเตอร์คิวบิก ในการหาจำนวนวิธีที่จะบรรจุแผนภาพลักษณะต่าง ๆ ลงในแลตติซด้วยคอมพิวเตอร์นั้น ผู้เขียนได้ใช้ผลงานของ ทรวงศรี วิมลวนิชย์ (Vimolvanich, 1973:66) ดังแสดงไว้ในภาคผนวก

เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

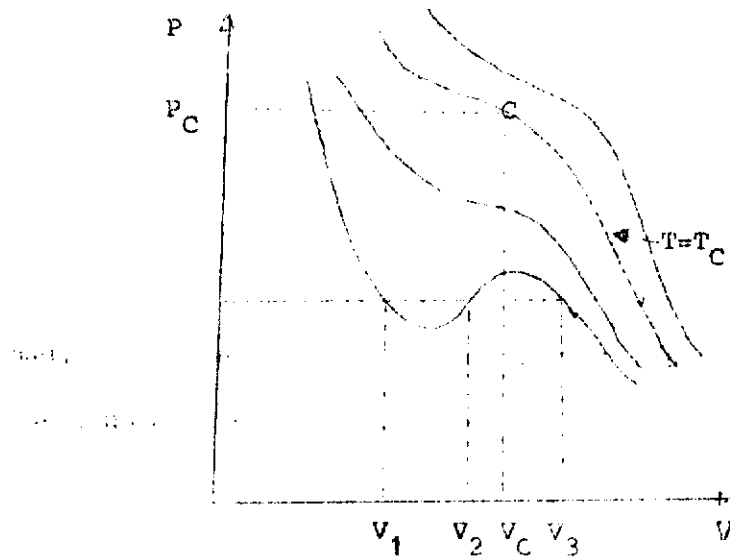
งานวิจัยที่เกี่ยวกับการหาค่าเอนโทรปี

ดอมบ์และคาลตัน (Domb and Dalton, 1966:859) ได้ศึกษาค่าเอนโทรปีวิกฤตของไอซิงแลตติซ โดยการประมาณค่าแบบเอกซ์ทราโพลเลตได้ค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤต $S_{\frac{1}{2}} - S_c = \frac{1.4}{q}$ เมื่อ q เป็นเลขจำนวนโคออร์ดิเนชัน คาลตันและวูด (Dalton and Wood, 1967:1271) ได้ศึกษาค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตโดยการอินทิเกรต (integrate) ค่าความร้อนจำเพาะที่ปริมาตรคงที่ดังสมการ $S_{\frac{1}{2}} - S_c = \frac{1}{k} \int_{T_c}^{\frac{1}{2}} \frac{C}{T^2} dT$ และใช้การประมาณค่าแบบพาเทรเพื่อพิจารณาค่าดัชนีวิกฤต จากอนุกรมของเอนโทรปี ไฮคส์ ฮันเตอร์, แมคเคนซี และซีฟ (Sykes, Hunter, Mc.Kenzie and Wood, 1972:667) ได้ประมาณค่าวิกฤตของเอนโทรปีโดยใช้ค่าดัชนีวิกฤต $\approx \frac{1}{8}$ ซึ่งได้จากการกระจายอนุกรมความร้อนจำเพาะ ณ อุณหภูมิสูง ๆ ของแบบจำลองไอซิงซันคเฟยเชนเตอร์คิวบิก ในสามมิติ และพบว่า ณ จุดวิกฤต $S/R = 0.59023 \pm 0.00003$

งานวิจัยที่เกี่ยวกับสมการสถานะ

ในปี ค.ศ. 1872 แวนเดอร์วาลส์ ได้ค้นพบทฤษฎีที่อธิบายเกี่ยวกับพฤติกรรมของระบบของเหลว-กาซ (Stanley, 1971:7) โดยสมการสถานะของระบบของเหลว-กาซของ

ได้พิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุด และได้ความสัมพันธ์ระหว่าง $P-V$ ดังแสดงในภาพประกอบ 12



ภาพประกอบ 12 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $P-V$ ของสมการสถานะของระบบของเหลว-ก๊าซ ของแวนเดอร์วาลส์

วิธีคำนวณการวิจัย

การศึกษาค่าเอนโทรปีทั้งปริมาตรคงที่และสมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่ของแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซกาซซันคเฟซ เช่น เฟอร์คิวบิคแลตทิซ ในสามมิติ ณ บริเวณวิกฤตนั้น เราสามารถศึกษาได้ตามลำดับต่อไปนี้

1. หาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซกาซซันคเฟซ เฟอร์คิวบิคในสามมิติ โดยวิธีการกระจายอนุกรมทอรัสเตอร์ พิจารณาถึงกรณีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดตามอันดับแรกและมีเพียงหกบอนด์ จากสมการ (28) เราสามารถเขียนพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ได้เป็น

$$-BF/L = -\{p \ln p + (1-p) \ln(1-p)\} + \sum_{n=1}^6 \sum_{m=2}^{12} C(n, m) p^m K^n + O(K^7) \quad \dots (32)$$

โดยที่ $O(K^7)$ คือผลรวมของแผนภาพที่มีบอนด์ตั้งแต่ เจ็ดบอนด์ขึ้นไปซึ่งจะไม่พิจารณาในการวิจัยครั้งนี้

สมการ (32) สามารถเขียนแทนด้วยแผนภาพได้ดังนี้

$$\begin{aligned} -BF/L = & -\{p \ln p + (1-p) \ln(1-p)\} + \left[\begin{aligned} & \left\{ \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \right\} \\ & + \left\{ \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \right\} \\ & + \left\{ \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \right\} \\ & + \left\{ \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} \right\} \\ & + \left\{ \text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} + \text{Diagram 17} + \text{Diagram 18} + \text{Diagram 19} \right\} \\ & + \left\{ \text{Diagram 20} + \text{Diagram 21} + \text{Diagram 22} + \text{Diagram 23} \right\} \end{aligned} \right] \quad \dots (33) \end{aligned}$$

จากสมการ (32) เมื่อทราบค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m k^n$ เราจะหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซภายใต้เงื่อนไขเทอร์มิตในสามมิติได้ การพิจารณาจำนวนของอันดับกิริยาระหว่างโมเลกุลใช้สัญลักษณ์เป็น $F.C.C(1, 0, 0)$, $F.C.C.(1, 1, 0)$ และ $F.C.C.(1, 1, 1)$ เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาอันดับที่หนึ่ง อันดับที่สอง และอันดับที่หนึ่ง สองและสามตามลำดับโดยสามารถคำนวณค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m k^n$ ได้ดังแสดงในตาราง 1 ตาราง 2 และตาราง 3 ตามลำดับ

ตาราง 1 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\rho^m k^n$ ที่ได้จากการกระจายอนุกรมคลัสเตอร์ของ $F.C.C.(1, 0, 0)$

$C(n, m)$						
$m \backslash n$	1	2	3	4	5	6
2	6	3	1	0.25	0.05	0.0083
3		-6	2	8.5	8.5	5.4833
4		3	-11	-34.25	-10.75	49.2683
5			12	57	-75	-566.62
6			-4	-54	285.4	2749.62
7				30	-468	-8024.8
8				-7.5	423	14668.96
9					-204	-16803.6
10					40.8	11722.48
11						-4560.96
12						760.16

ตาราง 2 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n,m)$ ของ $p^m K^n$ ที่ได้จากการกระจายอนุกรมคัสเตอร์ของ
F.C.C. (1,1,0)

$C(n,m)$						
$n \backslash m$	1	2	3	4	5	6
2	9	4.5	1.5	0.375	0.075	0.0125
3		-9	11	24.75	22.75	14.225
4		4.5	-40.5	-40.875	178.875	500.6475
5			42	-64.5	-1090.5	-1858.87
6			-14	186	2308.1	2278.62
7				-141	-2682	-1807.3
8				35.25	1939.5	3706.58
9					-846	-6483.6
10					169.2	5610.48
11						-2352.96
12						392.16

ตาราง 3 ค่าสัมประสิทธิ์ $C(n, m)$ ของ $\alpha^m K^n$ ที่ได้จากการกระจายอนุกรมคลัสเตอร์ของ
F.C.C. (1, 1, 1)

C(n, m)						
m \ n	1	2	3	4	5	6
2	21	10.5	3.5	0.875	0.175	0.029
3		-21	103	173.75	149.75	91.1917
4		10.5	-326.5	1180.625	6252.375	12038.164
5			330	-6298.5	-1142.5	135631.13
6			-110	10062	-86021.1	-451363.4
7				-6825	225362	-590485.3
8				1706.25	-245469.5	4134480
9					126086	-7034598
10					-25217.2	5783612
11						-2387281.9
12						397881.2

2. ทาค่าเอนโทรปีที่เหมาะสมที่สุด โดยใช้สมการ

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad (34)$$

เนื่องจากสมการของพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ที่ได้พิจารณามานี้ขึ้นอยู่กับ $- \partial F / \partial T$ ดังนั้นสมการเอนโทรปีที่เหมาะสมที่สุดจึงสามารถเขียนได้เป็น

$$S/Lk = k^2 \frac{\partial}{\partial k} (F/L) \quad \dots (35)$$

โดยที่ S/Lk คือค่าของเอนโทรปีต่อแลตทิซไซต์ (lattice site)

$k = \beta$ เนื่องจากเราพิจารณาให้ค่า $\beta = 1$ ดังนั้นจะได้ว่า $k = \beta = 1/kT$

3. คำนวณหาสมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่ โดยใช้สมการ

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = -c^2 \frac{\partial}{\partial c} (F/Lp)$$

$$\text{นั่นคือ } \beta P = -c^2 \frac{\partial}{\partial c} (F/Lp) \quad \dots (36)$$

เมื่อ P คือความดันของไอซึ่งแลตทิซก๊าซ

ผลการวิจัย

ค่าของเอนโทรปีที่ปริมาตรคงที่

เมื่อแทนค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ที่ได้จากสมการ (28) ลงในสมการ (35) ค่าของเอนโทรปีที่ได้นั้นจะอยู่ในรูปของความหนาแน่นและอุณหภูมิยกกำลังต่าง ๆ เมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤตความหนาแน่นจะมีค่าเท่ากับความหนาแน่นวิกฤตและมีค่าเท่ากับ $1/2$ เมื่อแทนค่า $\rho = 1/2$ ลงในสมการ (35) ค่าเอนโทรปีจะอยู่ในรูปอนุกรมของอุณหภูมิยกกำลังต่าง ๆ ดังนี้

$$\frac{S}{Lk} \left\{ F.C.C. (1, 0, 0) \right\} = \ln 2 - 0.1875K^2 - 0.25K^3 - 0.380596K^4 - 0.624996K^5 - 1.0816295K^6 \quad \dots (37)$$

$$\frac{S}{Lk} \left\{ F.C.C. (1, 1, 0) \right\} = \ln 2 - 0.28125K^2 - 0.625K^3 - 1.6787109K^4 - 4.6562456K^5 - 13.536521K^6 \quad \dots (38)$$

$$\frac{S}{Lk} \left\{ F.C.C. (1, 1, 1) \right\} = \ln 2 - 0.65625K^2 - 3.875K^3 - 28.385751K^4 - 21265643K^5 - 1634.6909K^6 \quad \dots (39)$$

เนื่องจากหนึ่งหน่วยปริมาตรของไอซิ่งแลตทิซภาคซนิตเพซ เช่น เคอร์คิวบิกประกอบด้วยสี่โมเลกุล ดังนั้นพจน์ $K = 1/kT$ แต่เดิมนี้ เมื่อพิจารณาทั้งหมดสี่โมเลกุลจะต้องเป็นค่า $K = 4/kT$

เมื่อนำค่า $K = 4/kT$ แทนค่าลงในสมการ (37), (38) และ (39) จะได้ค่าเอนโทรปีต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรที่ความหนาแน่นเท่ากับความหนาแน่นวิกฤตตามลำดับดังนี้

$$\frac{S}{k} \left\{ F.C.C. (1, 0, 0) \right\} = \ln 2 - 3K^2 - 15K^3 - 87.50057K^4 - 639.99956K^5 - 4430.3502K^6 \quad \dots (40)$$

$$\frac{S}{k} \left\{ F.C.C. (1, 1, 0) \right\} = \ln 2 - 4.5K^2 - 40K^3 - 429.74998K^4 - 4767.9952K^5 - 55445.587K^6 \quad \dots (41)$$

$$\frac{S}{k} \left\{ F.C.C(1,1,1) \right\} = 10.5K^2 - 248K^3 - 7266.7521K^4 - 217760.17K^5 - 6695687K^6 \quad \dots (42)$$

พิจารณาค่าเอนโทรปีเมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อนันต์ จากสมการ(41), (41) และ(42) ปรากฏว่ามีค่าเท่ากันทั้งสามสมการ คือเท่ากับ 10.5 จัตุรัสค่าเอนโทรปีให้อยู่ในรูปของ $\frac{S}{k} - \frac{S}{k}$ ดังแสดงในตาราง 4

ตาราง 4 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ a_n ของ K^n จากสมการ $\frac{S}{k} - \frac{S}{k} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n K^n$ ของแบบจำลอง ไอซิงเลตติงภายใต้เงื่อนไขเทอร์มอดินามิกต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร

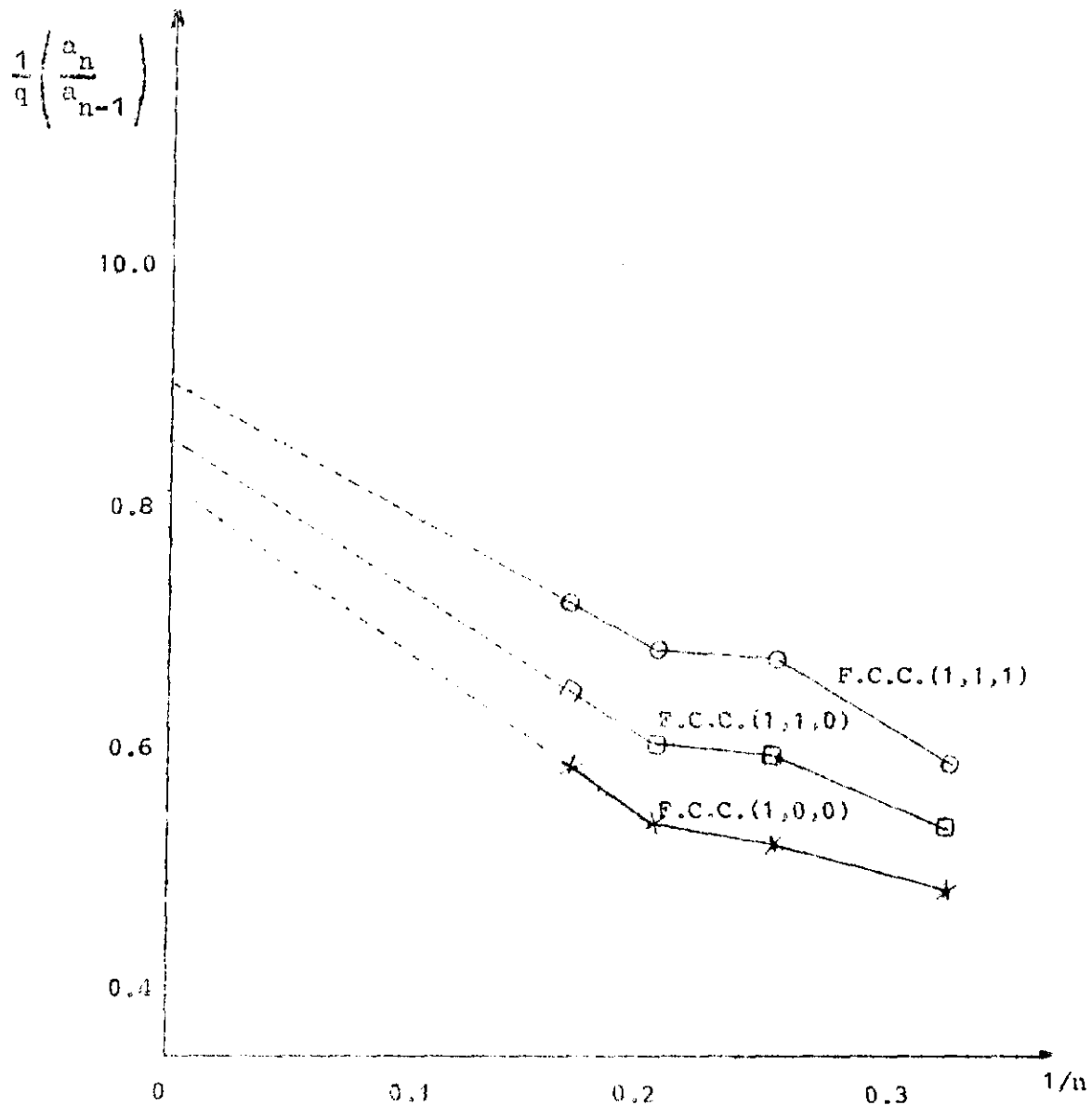
a_n					
K^n F.C.C. (J_1, J_2, J_3)	K^2	K^3	K^4	K^5	K^6
F.C.C. (1,0,0)	3	16	97.500057	639.99956	4430.3502
F.C.C. (1,1,0)	4.5	40	429.76998	4767.9952	55445.587
F.C.C. (1,1,1)	10.5	248	7266.7521	217760.17	6695687

จากตาราง 4 เราจะเห็นว่าสัมประสิทธิ์ของ K^n ของค่าเอนโทรปีมีค่าเป็นบวกทั้งหมด ดังนั้นการหาค่าวิกฤต K_c จากอนุกรมของเอนโทรปีจึงใช้วิธีเอกซ์ตราโพลาร์ ซึ่งเป็นวิธีหาคำจำกัดของการลู่ออก (radius of convergence) ของอนุกรม ที่มีค่าอัตราส่วนของสัมประสิทธิ์ของตัวแปรเป็นบวกทั้งหมด (Gomb and Green, 1974:199) คำจำกัดของการลู่ออก หาได้จากสูตร

$$\frac{1}{r} = \lim_{n \rightarrow \infty} (a_n / a_{n-1}) \quad \dots (43)$$

เมื่อนำค่าสัมประสิทธิ์ของ K_c ยกกำลังต่าง ๆ ของอนุกรมเอนโทรปีจากตาราง 4

มาเขียนกราฟระหว่าง $\frac{1}{q} \left(\frac{a_n}{a_{n-1}} \right)$ กับ $\frac{1}{n}$ เมื่อ q คือตัวเลขโคออร์ดิเนชัน (coordination number) ซึ่งเป็นผลรวมของจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้ที่สุดทุกอันที่พิจารณา เราจะได้กราฟดังภาพประกอบ 13



ภาพประกอบ 13 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\frac{1}{q} \left(\frac{a_n}{a_{n-1}} \right)$ กับ $\frac{1}{n}$

จากภาพประกอบ 13 เราจะได้ค่า K_C และโดยการแทนค่า K_C ลงในตาราง 4 แล้วจะได้ค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤต ดังแสดงในตาราง 5

ตาราง 5 แสดงค่า K_C และค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตของไอซิ่งแลตทิซกาซชนิด เฟสเซนเตอร์คิวบิก ในกรณีต่าง ๆ

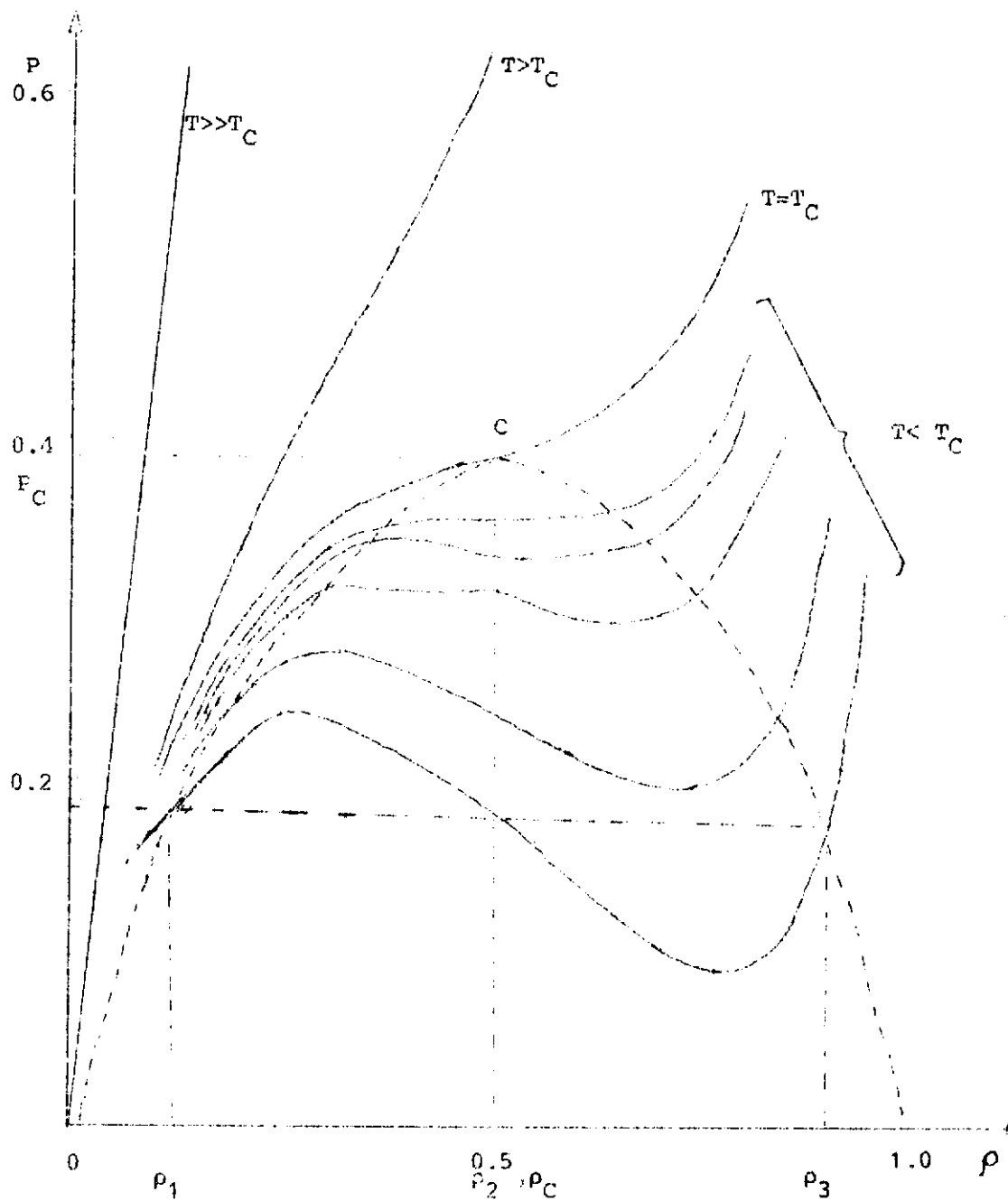
F.C.C. (J_1, J_2, J_4)	q	K_C	$\frac{S_{\text{max}} - S_C}{K}$
F.C.C. (1, 0, 0)	12	0.10288	0.08101
F.C.C. (1, 1, 0)	18	0.06326	0.04170
F.C.C. (1, 1, 1)	42	0.02569	0.01914

สมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่

เมื่อแทนค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ที่ได้จากสมการที่ (28) ลงในสมการ (36) โดยพิจารณาเฉพาะกรณีอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันมากที่สุดคือ F.C.C.(1, 0, 0) ค่าความดันที่ได้เป็นดังนี้

$$\begin{aligned}
 BP = & -k_B(1-p) - 6p^2K - (3p^2 - 12p^3 + 9p^5)K^2 \\
 & -(p^2 + 4p^3 - 33p^4 + 48p^5 - 20p^6)K^3 - (0.25p^2 + 17p^3 - 102.75p^4 \\
 & + 228p^5 - 270p^6 + 180p^7 - 52.3p^8)K^4 - (0.05p^2 + 17p^3 - 32.25p^4 \\
 & - 300p^5 + 1427p^6 - 2808p^7 + 2961p^8 - 1632p^9 + 367.2p^{10})K^5 \\
 & -(0.0051p^2 + 11.0666p^3 + 147.8049p^4 - 2266.48p^5 + 13748.1p^6 \\
 & - 48148.81p^7 + 102682.72p^8 - 134828.8p^9 + 105502.32p^{10} \\
 & + 45609.6p^{11} + 8361.76p^{23})K^6 \dots(44)
 \end{aligned}$$

จากอนุกรมความดันดังสมการที่ (44) เขียนกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความดัน กับความหนาแน่นที่อุณหภูมิคงที่ ดังแสดงในภาพประกอบ 14



ภาพประกอบ 14 สมการสถานะของระบบของเหลว-กาซ ของ F.C.C (1.0, 0)

บทย่อ สรุป อภิปราย และข้อเสนอแนะ

บทย่อ

ความมุ่งหมายของการวิจัย

การวิจัยครั้งนี้เพื่อศึกษาค่าเอนโทรปีปริมาณทรงที่และสมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่ของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาสเฟสเช่นเทอร์คิวบิกในสามมิติ เมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤต โดยพิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลที่อยู่ข้างเคียงอันดับที่หนึ่งถึงอันดับที่สาม

เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย

ผลของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ของ ทรงกรี วัฒนฉัตร

วิธีดำเนินการวิจัย

การวิจัยเริ่มต้นด้วยการหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของไอซิงแลตทิซกาสเฟสเช่นเทอร์คิวบิก โดยวิธีการกระจายอนุกรมกัลเลอร์และดำเนินการต่อไปตามลำดับดังนี้

1. หาค่าเอนโทรปีปริมาณทรงที่ จากสูตร

$$\frac{S}{k} = K' \frac{C}{\ln 2}$$

ซึ่งอนุกรมที่ได้จะอยู่ในรูปของอนุกรมอนันต์ยกกำลังต่าง ๆ จากนั้นจึงหาค่าวิกฤต K_C ด้วยวิธีเอกซ์ตราโพลาร์ และหาค่าเอนโทรปีปริมาณทรงที่โดยแทนค่า K_C ลงในอนุกรมของเอนโทรปี

2. หาค่าสมการสถานะที่อุณหภูมิคงที่ จากสูตร

$$E_p = \frac{C}{\ln 2} (S_p / S_C)$$

ซึ่งอนุกรมที่ได้จะอยู่ในรูปของความหนาแน่นและอุณหภูมิยกกำลังต่าง ๆ แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง E กับ p ด้วยเส้นกราฟ

การวิเคราะห์ผล

1. พิจารณาค่าเอนโทรปีที่ได้จากการแทนค่าวิกฤติในอนุกรมของเอนโทรปี
2. พิจารณาสถิติการสถานะจากความสัมพันธ์ระหว่างความดันกับความหนาแน่นที่อุณหภูมิ

คงที่

สรุปผลการวิจัย

1. ในการศึกษาค่าเอนโทรปีของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาศชนิตเฟสเซนเตอร์คิวบิกนั้นจะพิจารณาในสามกรณีด้วยกัน คือ $F.C.C.(1,0,0)$, $F.C.C.(1,1,0)$ และ $F.C.C.(1,1,1)$ เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลอันดับที่ หนึ่ง อันดับที่สองและสอง และ อันดับทีหนึ่งสองและสามตามลำดับ

การศึกษาค่าเอนโทรปีของแบบจำลองไอซิงแลตทิซกาศชนิตเฟสเซนเตอร์คิวบิกทั้งสามกรณี สามารถสรุปได้ว่า ค่าเอนโทรปีจะมีค่า ค่าหนึ่งเมื่ออุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิวิกฤต โดยจะมีค่าลดลงเมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างดปีของโมเลกุลเพิ่มขึ้น สำหรับค่าวิกฤต K_C ของอนุกรมเอนโทรปีแต่ละกรณีนี้นั้นจะมีค่าแตกต่างกันดังแสดงไว้ในตาราง 6 โดยเปรียบเทียบกับค่าที่คำนวณได้โดยคอมม์และคาลตัน (Domb and Dalton, 1966:859) และค่าที่คำนวณได้โดยทรวงฟรี วิลลวณชัย (Vilmlvaich, 1973:66) ดังตาราง 6

ตาราง 6 แสดงค่าวิกฤต K_C ที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้เปรียบเทียบกับค่าที่คำนวณไว้โดยคอมม์และคาลตันและทรวงฟรี วิลลวณชัย

F.C.C. : (J_1, J_2, J_3)	ค่าวิกฤต K_C		
	ค่าที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้	ค่าที่ได้จากการคำนวณของคอมม์และคาลตัน	ค่าที่ได้จากการคำนวณของทรวงฟรี วิลลวณชัย
$F.C.C.(1,0,0)$	0.10286	0.10208	0.1021
$F.C.C.(1,1,0)$	0.06356	0.06445	0.0644
$F.C.C.(1,1,1)$	0.02588	0.0257	0.0255

สำหรับอนุกรมของเอนโทรปีซึ่งอยู่ในรูปของอนุกรมของอุดมหมัยกกำลังต่าง ๆ กรณี F.C.C. (1,1,0) เปรียบเทียบกับค่าที่คำนวณได้โดย ดาลตันและวูด (Dalton and Wood, 1969:1299) ดังนี้

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

$$\frac{S_0 - S_c}{k} = 4.5K_c^2 + 40K_c^3 + 429.74998K_c^4 + 4767.9952K_c^5 + 55445.587K_c^6 \quad (45)$$

อนุกรมของเอนโทรปีที่คำนวณโดยดาลตันและวูด

$$\frac{S_0 - S_c}{k} = 4.5K_c^2 + 40K_c^3 + 429.75K_c^4 + 4768K_c^5 + 55311K_c^6 \quad (46)$$

สำหรับค่าของเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตซึ่งจะมีค่าลดลงเมื่อพิจารณาอันตรกิริยาเพิ่มมากขึ้น เปรียบเทียบค่าที่คำนวณไว้โดยคอมม์และดาลตัน (Domb and Dalton, 1966:86) ดังแสดงไว้ในตาราง 7

ตาราง 7 ค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้เปรียบเทียบกับค่าของคอมม์และดาลตัน

ค่า $\frac{S_0 - S_c}{k}$		
F.C.C. (J_1, J_2, J_3)	ค่าที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้	ค่าที่ได้จากการคำนวณของคอมม์และดาลตัน
F.C.C. (1,0,0)	0.08101	0.102
F.C.C. (1,1,0)	0.04170	0.065
F.C.C. (1,1,1)	0.01914	0.028

2. สำหรับการศึกษาลักษณะของไอซิ่งแลตทิซกาซชนิดเพนเซอร์คิวบิก นั้นพิจารณาเฉพาะอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลใกล้เคียงกันที่ลำดับหนึ่งเท่านั้น คือ $\epsilon, \epsilon, \epsilon$ (1, 0, 0)

โดยการพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นที่อุณหภูมิคงที่ ของ ไอซิ่งแลตทิซกาซชนิดเพนเซอร์คิวบิก สามารถสรุปได้ว่า ที่อุณหภูมิค่า ๆ T และความดัน P ใด ๆ เราสามารถหาค่าความหนาแน่น ρ ได้สามค่า คือ ρ_1, ρ_2 และ ρ_3 เมื่ออุณหภูมิ เพิ่มขึ้น ๆ ค่า ρ_1, ρ_2 และ ρ_3 จะมีค่าใกล้เคียงกันเรื่อย ๆ จนกระทั่งอุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิวิกฤต ρ_1, ρ_2 และ ρ_3 จะมารวมกันเป็นจุด ๆ หนึ่ง ซึ่งจุดนี้จะมีค่าความหนาแน่นเท่ากับค่าความหนาแน่นวิกฤตและความดันเท่ากับค่าความดันวิกฤต

อภิปรายผลการวิจัย

การอภิปรายผลที่ได้จากการวิจัยครั้งนี้สามารถแยกได้เป็น 2 กรณี คือ

1. ค่าเอนโทรปีที่มีปริมาณคงที่

1.1 ค่าวิกฤต K_C

จากการวิจัยเพื่อศึกษาค่าเอนโทรปีของแบบจำลองไอซิ่งแลตทิซกาซชนิดเพนเซอร์คิวบิกทั้งสามกรณี พบว่า ค่าวิกฤตของอนุกรมเอนโทรปีจะมีค่าลดลงเมื่ออันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลอันดับต่าง ๆ มากขึ้น แสดงว่าค่าวิกฤต K_C ขึ้นอยู่กับจำนวนอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลที่พิจารณา นั่นคือ ถ้าจำนวนอันดับของอันตรกิริยาเพิ่มขึ้น ค่าวิกฤต K_C จะลดลงซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของสมมาตร ชื่นญาต (สมมาตร ชื่นญาต . 2525:56) และงานวิจัยของบุญเรือง ศรีเทรวัณ (บุญเรือง ศรีเทรวัณ 2527:44)

เมื่อเปรียบเทียบค่าวิกฤต K_C ตามตาราง*6 ค่าวิกฤต K_C จากการวิจัยครั้งนี้ใกล้เคียงกับค่าของ เอนโทรปีเอนทัลปี และค่าของทรงรี รวมลวดลาย ค่าวิกฤตที่แตกต่างกันนี้เนื่องมาจากการวิจัยครั้งนี้มุ่งเน้นให้พิจารณาจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลเพียงหกอันดับ ส่วนผู้วิจัยทั้งสามท่านให้พิจารณาจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลถึง เจ็ดอันดับ ทำให้มีค่าละเอียดมากกว่า แสดงว่าค่าวิกฤตนั้นขึ้นอยู่กับจำนวนอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลด้วย

1.2 ค่าเอนโทรปี

ในกรณี F.C.C (1:1:0) เปรียบเทียบสมบัติของอนุกรมของเอนโทรปีที่กำหนดไว้จากการวิจัยครั้งนี้กับค่าของคาลตันและวูค ตามสมการ (44) และ (45) ตามลำดับ จะพบว่าสมบัติของ x^6 เมื่อ $n = 2, 3, 4$ และ 5 มีค่าเท่ากัน สำหรับสมบัติของ x^6 หากที่คำนวณได้จากการวิจัยครั้งนี้มากกว่าค่าของคาลตันและวูค 0.24 % นับว่าใกล้เคียงกันมาก

สำหรับค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตของแบบจำลองไอซิงแลตทิซทางขั้วพิเศษเช่นเตอร์คิวบ์ทั้งสามกรณี พบว่ามีค่าลดลงเมื่ออันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลอันตัมต่าง ๆ มากขึ้น แสดงว่าค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตขึ้นอยู่กับจำนวนอันตัมของอันตรกิริยาระหว่างสปินของโมเลกุลที่พิจารณา นั่นคือ ถ้าจำนวนอันตัมของอันตรกิริยาเพิ่มขึ้นค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตจะลดลงซึ่งสอดคล้องกับค่าของคอมบ์และคาลตัน ดังแสดงในตาราง 7

เมื่อเปรียบเทียบค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตตามตาราง 7 พบว่ามีค่าใกล้เคียงกับค่าของคอมบ์และคาลตันทั้งสามกรณี ค่าเอนโทรปีที่แตกต่างกันนี้เนื่องมาจากค่าเอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตคำนวณได้จากการแทนค่าวิกฤต x_c ที่ได้จากการวิจัยในครั้งนี้ลงในอนุกรมของเอนโทรปีที่กำหนดไว้

2 สมการสถานะ

ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความหนาแน่นที่อุณหภูมิคงที่ของไอซิงแลตทิซทางขั้วพิเศษเตอร์คิวบ์ ดังแสดงในภาพประกอบ 14 ให้ผลสอดคล้องกับสมการสถานะของแวนเดอร์วาลส์ ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความดัน (P) กับปริมาตร (V) ตามทฤษฎี แวนเดอร์วาลส์ ของการเปลี่ยนสถานะของของเหลว กาช (Stanley, 1971: 44)

ข้อเสนอแนะในการวิจัย

ในการวิเคราะห์เกี่ยวกับหัวแปรทางอุณหพลศาสตร์ของแลตทิซกซ์ชนิดต่าง ๆ นั้นเริ่มจากการหาค่าพลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ของแลตทิซกซ์ ผู้วิจัยมีความเห็นและข้อเสนอแนะ คือ คำนวณหาตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์ต่าง ๆ ที่นอกเหนือจาก ความร้อนจำเพาะ ค่าสภาพอัตราได้

ค่าสภาพความเข้มข้นได้ ค่าเอนโทรปีและสมการสถานะที่อุณหภูมิกำหนดของแบบไอซิ่งแลตทิซกาซชนิดต่าง ๆ เช่น

1. คำนวณหาค่าพลังงานภายใน (internal energy) ตามสมการ

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} (F/kT)$$

2. คำนวณหาค่าความเข้มศักย์ทางเคมี (chemical potential) ตามสมการ

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}$$

บรรณานุกรม

บรรณานุกรม

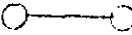
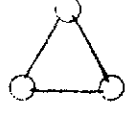
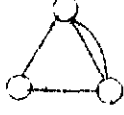
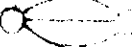
- ณมมาตร ชิตญาที ความร้อนจำเพาะของไอซิงแลตทิซในสามมิติ ชนิดเพชเชนเทอร์คิตัล
เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาที่ใกล้ที่สุดตามอันดับแรก ปรินซิปีพนธ์ กศ.ม. มหาวิทยาลัย
ศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร 2525, 70 หน้า อีตลำนเา
- บุญเรือง ศรีเทริญ สภาพอัดได้ของแบบจำลองไอซิง เมื่อพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุล
ข้างเคียง อันดับหนึ่ง สอง สามและสี่ ปรินซิปีพนธ์ กศ.ม. มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
ประสานมิตร 2527, 120 หน้า
- Andrews, G. Philosophical Transaction of the Royal Society. 159 575,
1869.
- Baker, G.A. "Application of the Pade Approximant Method to the
Investigation of Some magnetic Properties of the Ising Model"
Physical review. 124 : 768, 1961.
- Dalton, N.W. and D. W. Wood. "Critical Point Behaviour of the Ising
Model with Higher-Neighbour Interactions Present," Journal of
Mathematical Physics. 10 : 1271. 1969.
- Domb, C. and N.W. Dalton. "Crystal Statistics with Long-Range Force
I : The Equivalent Neighbour Model," Proceeding of the Physical
Society. 89 : 859 - 873, 1966.
- _____ "Crystal statistics with Long-Range force II : Asymtotic
Behaviour of the Equivalent Neighbour Model," Proceeding of the
Physical Society. 89 : 873 - 891, 1966.
- Domb, C. and M.S. Green. Phase Transitions and Critical Phenomena III,
1 st. ed. London. Academic. Press Inc., 1976. 470 p.
- E. Ising, z. Physics., 31 : 253, 1952.
- Huang, K. Statistical Mechanics. 1 st. ed., John Wiley and Sons, Inc.,
1963. 470 p.
- Mayer. J.E. and M.G. Mayer. Statistical Mechanics. 1 st. ed., John
Wiley and Sons, Inc., 1940. 495 p.
- Meijer, P.H.E., R.A. Farrel and E.E. Sommerfeldt. "Cluster Expansion
of the Lattice Gas : Determination of the First Ten High- Temperature
Coefficients," Physica. 113 : 684, 1972.

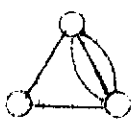
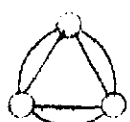
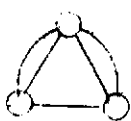
- Morita, T. and K. Hiroike. Progress of Theoretical Physics. Kyoto, 25 : 537, 1961.
- Onsager, L. Physical Review. 65 : 117, 1944.
- Stanley, H.E. Introduction of Phase Transition and Critical Phenomena. 1 st. ed., Oxford, Clarendon Press, 1971. 308 p.
- Sullivan, J.T. Physical Review. 27 : 94, 1970.
- Sykes, M.F., F.L. Hunter and D.S. Mc. Kenzie. "Specific Heat of a Three-Dimensional Ising Ferromagnetic Above the Curie Temperature," Journal of Physics. A5 : 667, 1972.
- Vimolvanich, 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.

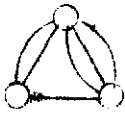
ກາຍພັນ

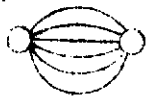
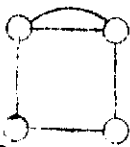
ภาคผนวก ผลของโปรแกรมคอมพิวเตอร์แสดงจำนวนวิธีที่สามารถบรรจุแผนภาพลงใน

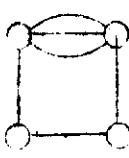
เฟสเซนเตอร์คิวบิกแลตทิซ

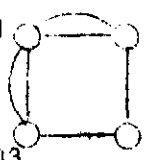
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
							
1	100	12		1^4	400	12	
2	010	6		2^4	040	6	
3	001	24		3^4	004	24	
							
333	003	48		1^5	500	12	
111	300	48		2^5	050	6	
332	012	48		3^5	005	24	
331	102	48					
311	201	48		$3^2 33$	004	48	
211	210	24		$1^2 11$	400	48	
321	111	24		$3^2 32$	013	48	
				332^2	022	48	
1^2	200	12		$3^2 31$	103	48	
2^2	020	6		331^2	202	48	
3^2	002	24		$3^2 11$	202	48	
				311^2	301	48	
1^3	300	12		$2^2 11$	220	24	
2^3	030	6		211^2	310	24	
3^3	003	24		$3^2 21$	112	24	

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
321^2	211	24		$3^2 1^2 1$	302	48	
$32^2 1$	121	24		$31^2 1^2$	401	48	
				$2^2 1^2 1$	320	24	
$3^3 33$	005	48		$21^2 1^2$	410	24	
$1^3 11$	500	48		$3^2 2^2 1$	122	24	
$3^3 32$	014	48		$32^2 1^2$	221	24	
332^3	032	48		$3^2 21^2$	212	24	
$3^3 31$	104	48					
331^3	302	48		$3^2 3^2 3^2$	006	48	
$3^3 11$	203	48		$1^2 1^2 1^2$	600	48	
311^3	401	48		$3^2 3^2 2^2$	024	48	
$2^3 11$	230	24		$3^2 3^2 1^2$	204	48	
211^3	410	24		$3^2 1^2 1^2$	402	48	
$3^3 21$	113	24		$2^2 1^2 1^2$	420	24	
$32^3 1$	131	24		$3^2 2^2 1^2$	222	24	
321^3	311	24					
				$3^4 33$	006	48	
$3^2 3^2 3$	005	48		$1^4 11$	600	48	
$1^2 1^2 1$	500	48		$3^4 32$	015	48	
$3^2 3^2 2$	014	48		332^4	042	48	
$33^2 2^2$	023	48		$3^4 31$	105	48	
$3^2 3^2 1$	104	48		331^4	402	48	
$33^2 1^2$	203	48		$3^4 11$	204	48	

DESIGNATION	XYZ	V	A
311^4	501	48	
2^411	240	24	
211^4	510	24	
3^421	114	24	
32^41	141	24	
321^4	411	24	
			
3^33^23	006	48	
1^31^21	600	48	
3^332^2	024	48	
3^232^3	033	48	
3^33^22	015	48	
3^231^3	303	48	
3^33^21	105	48	
3^311^2	303	48	
3^211^3	402	48	
31^21^3	501	48	
2^311^2	350	24	
2^211^3	420	24	
21^21^3	510	24	
3^321^2	213	24	
3^221^3	312	24	
3^32^21	123	24	

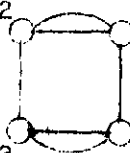
DESIGNATION	XYZ	V	A
3^22^31	132	24	
32^31^2	231	24	
32^21^3	321	24	
			
1^6	600	12	
2^6	060	6	
3^6	006	24	
			
3^2333	005	1248	1244
2^2222	050	24	18
1^2111	500	264	253
3^2322	023	72	
3322^2	0321		
3^2232	023	216	
3232^2	032	216	
3^2311	203	504	
3311^2	302		
3^2131	203	792	
3131^2	302		
22^211	230	24	
2211^2	320		
2^2121	230	96	
2121^2	320		

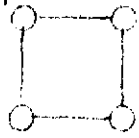
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
$3^2 231$	113	240		3332^2	023		
$32^2 31$	122			$3^2 331$	104	864	
3231^2	212			$33^2 31$	104		
$3^2 312$	113	240		3331^2	203		
$33^2 12$	113			$3^2 111$	302		
$331^2 2$	212			$311^2 1$	401		
3312^2	122			3111^2	401		
$3^2 221$	122	96		$2^2 111$	320	144	
$32^2 21$	131			$211^2 1$	410		
$322^2 1$	131			2111^2	410		
3221^2	221						
$3^2 212$	122	96		3333^3	006	1248	1224
$32^2 12$	131			2222^3	060	24	18
$321^2 2$	221			1111^3	600	264	252
$3^2 211$	212	192		$3^3 322$	024	72	
$32^2 11$	221			3322^3	042		
$321^2 1$	311			$3^3 232$	024	216	
3211^2	311			$32^3 32$	042		
$3^2 121$	212	192		$3^3 311$	204	504	
$31^2 21$	311			3311^3	402		
$312^2 1$	221			$3^3 131$	204	792	
$3^2 332$	014	288		3131^3	402		
$33^2 32$	014			$2^3 211$	240	24	

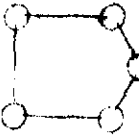
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
2211^3	420			312^3_1	231		
2^3_{121}	240	96		3^3_{332}	015	288	
2121^3	420			33^3_{32}	015		
3^3_{231}	114	340		3332^3	033		
32^3_{31}	132			3^3_{331}	105	864	
3231^3	312			33^3_{31}	105		
3^3_{312}	114	240		3331^3	303		
33^3_{12}	114			3^3_{111}	303	432	
331^3_2	312			31^3_{11}	501		
3312^3	132			311^3_1	501		
3^3_{221}	123	96		2^3_{111}	330	144	
32^3_{21}	141			21^3_{11}	510		
322^3_1	141	96		211^3_1	510		
3221^3	321				006	1248	1224
3^3_{212}	123	96		$2^2_{2^2 22}$	060	24	18
32^3_{12}	141			$1^2_{1^2 11}$	600	264	252
321^3_2	321			$3^2_{3^2 22}$	204	72	
3^3_{211}	213	192		$33^2_{2^2 2}$	033		
32^3_{11}	201			$332^2_{2^2}$	042		
321^3_1	411			$3^2_{2^2 32}$	033	216	
3211^3	411			$3^2_{3^2 11}$	204	504	
3^3_{121}	213			$33^2_{1^2 1}$	303		
31^3_{21}	411						

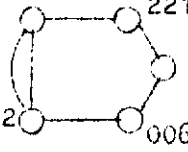
DESIGNATION	XYZ	V	A
$331^2 1^2$	402		
$3^2 1^2 31$	303	792	
$2^2 2^2 11$	240	24	
$22^2 1^2 1$	330		
$221^2 1^2$	420		
$2^2 1^2 21$	330	96	
$3^2 2^2 31$	123	240	
$323^2 1^2$	213		
$3^2 3^2 12$	114	240	
$33^2 1^2 2$	213		
$331^2 2^2$	222		
$3^2 312^2$	123		
$3^2 2^2 21$	132	96	
$32^2 2^2 1$	141		
$322^2 1^2$	231		
$3^2 221^2$	222		
$3^2 2^2 12$	132	96	
$321^2 2^2$	231		
$3^2 2^2 11$	222	192	
$32^2 1^2 1$	321		
$321^2 1^2$	411		
$3^2 211^2$	312		
$3^2 1^2 21$	312	192	

DESIGNATION	XYZ	V	A
$312^2 1^2$	321		
$3^2 3^2 32$	015	288	
$333^2 2^2$	024		
$3^2 3^2 13$	105	864	
$331^2 3^2$	204		
$3^2 1^2 11$	402	432	
$311^2 1^2$	501		
$2^2 1^2 11$	420	144	
$211^2 1^2$	510		
$3^2 33^2 3$	006	1248	1224
$2^2 22^2 2$	060	24	18
$1^2 11^2 1$	600	264	252
$3^2 32^2 2$	033	74	
$3^2 23^2 2$	024	216	
$32^2 32^2$	042		
$3^2 31^2 1$	303	504	
$3^2 13^2 1$	204	792	
$31^2 31^2$	402		
$2^2 21^2 1$	330	24	
$2^2 12^2 1$	240	96	
$21^2 21^2$	420		
$3^2 23^2 1$	114	240	



DESIGNATION	XYZ	V	A
$3^2 2^2 3 1^2$	222		
$3^2 3 1^2 2$	213	240	
$3 3^2 1 2^2$	123		
$3^2 2 2^2 1$	132	96	
$3 2^3 1 2^2$	231		
$3^2 2 1^2 2$	222	96	
$3 2^2 1 2^2$	141		
$3^2 2 1^2 1$	312	192	
$3 2^2 1 1^2$	321		
$3^2 1 2^2 1$	222	192	
$3 1^2 2 1^2$	411		
$3^2 3 3^2 2$	015	288	
$3 3^2 3 2^2$	024		
$3^2 3 3^2 1$	105	864	
$3 3^2 3 1^2$	204		
$3^2 1 1^2 1$	402	432	
$3 1^2 1 1^2$	501		
$2^2 1 1^2 1$	420	144	
$2 1^2 1 1^2$	510		
	004	1248	1224
2222	040	24	18
1111	400	264	252

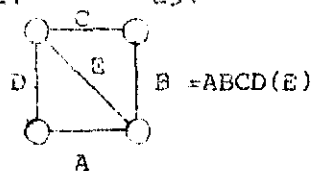
DESIGNATION	XYZ	V	A
3322	022	72	
3232	022	216	
3311	202	504	
3131	202	792	
2211	220	24	
2121	220	96	
3231	112	240	
3312	112	240	
3221	121	96	
3212	121	96	
3211	211	192	
3121	211	192	
3332	013	288	
3313	103	864	
3111	301	432	
2111	310	144	
	005	17520	17280
11111	500	1680	1440
31111	401	3264	<u>3168</u>
21111	410	912	864
33313	104	12768	12672
33332	014	5856	5760

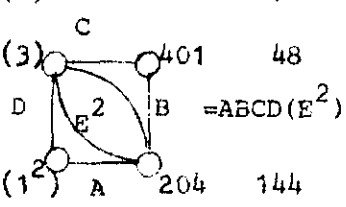
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
33311	203	7680	7632	33121	212	2640	
33131	203	9360		32311	212	2640	
22211	230	96	72	32211	221	528	
22121	230	216		32131	212	3216	
33111	302	4560	4512	32121	221	816	
31311	302	6240		32112	221	816	
22111	320	288		31221	221	528	
21211	320	576					
33232	023	1584		33333 ²	006	17520	17280
33222	032	336	288	11111 ²	600	1680	1440
32322	032	576		3 ² 1111	402	3264	3168
33322	023	1296		31 ² 111	501		
33312	113	3696	3672	311 ² 11	501		
33231	113	4248		2 ² 1111	420	912	864
32111	311	1536	1512	21 ² 111	510		
31211	311	1800		211 ² 11	510		
32221	131	240	216	3 ² 3331	105	12768	12672
32212	131	360		33 ² 331	105		
33221	122	864		33331 ²	204		
33212	122	1152		2 ² 3333	024	5856	5760
32321	122	1152		23 ² 333	015		
32231	122	864		233 ² 33	015		
33211	212	2064		3 ² 3311	204	7680	7632

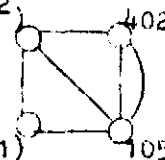
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
33^2311	204			3^23232	024	1584	
3331^21	303			332^232	033		
3^23131	204	9360		3323^22	024		
331^231	303			3^23222	033	336	268
3313^21	204			332^222	042		
2^22211	240	96	72	3322^22	042		
22^2211	240			3^22322	033	576	
2221^21	330			32^2322	042		
2^22121	240	216		3232^22	042		
221^221	330			3^23322	024	1296	
2212^21	240			33^2322	024		
3^23111	303	4560	4512	3332^22	033		
331^211	402			3^23312	114	3696	3672
3311^21	402			33^2312	114		
3^23131	303	6240		333^212	114	3696	3672
31^2311	402			3331^22	213		
3131^21	402			33312^2	123		
2^22111	330	238		3^23231	114	4248	
221^211	420			33^2231	114		
2211^21	420			332^231	123		
2^22121	330	576		3323^21	114		
21^2211	420			33231^2	213		
2121^21	420			3^22111	312	1536	1512

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
32^2111	321			33221^2	222		
321^211	411			3^23212	123	1152	
3211^21	411			332^212	132		
32111^2	411			3321^22	222		
3^21211	312	1800		3^22321	123	1152	
31^2211	411			32^2321	132		
312^211	321			323^221	123		
3121^21	411			3232^21	132		
31211^2	411			32321^2	222		
3^22221	1320	240		3^22231	123	864	
32^2221	141			32^2231	132		
322^221	141			32231^2	222		
3222^21	141			3^23211	213	2064	
32221^2	231			33^2211	213		
3^22212	132	360		332^211	222		
32^2212	141			3321^21	312		
322^212	141			33211^2	312		
3221^22	231			3^23121	213	2640	
32212^2	141			331^221	312		
3^23221	123	864		3312^21	222		
33^2221	123			3^22311	213	2640	
332^221	132			32^2311	222		
3322^21	132			3231^21	312		

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
$3^2 2211$	222	528		3333(1)	104	144	192
$32^2 211$	231			3333(2)	014	336	364
$322^2 11$	231			3333(3)	005	48	96
$3221^2 1$	321			3332(1)	113	96	
32211^2	321			3332(2)	014	96	
$3^2 2131$	213	3216		3331(1)	203	192	
$32^2 131$	222			3331(2)	113	192	
$321^2 31$	312			3331(3)	104	96	
$3213^2 1$	213			3322(1)	122	24	48
32131^2	312			3322(3)	023	48	96
$3^2 2121$	222	816		3213(1)	212	96	
$32^2 121$	231			3213(3)	113	48	
$321^2 21$	321			3321(1)	212	96	
$3212^2 1$	231			3321(3)	113	96	
32121^2	321			3113(1)	302	192	
$3^2 2112$	222	816		3113(2)	212	192	
$32^2 112$	231			3113(3)	203	96	
$321^1 12$	321			3311(1)	302	144	192
$3^2 1221$	222	528		3311(2)	212	72	96
$31^2 221$	321			3311(3)	203	48	96
$312^2 21$	231			3232(1)	122	48	
				3232(3)	023	96	
				3231(1)	212	96	



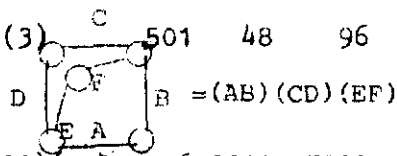
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A	
3231(3)	113	96		1111(2)	410	72	96	
3122(1)	221	48		1111(3)	401	48	96	
3122(3)	122	48			3333(1 ²)	204	144	192
3212(1)	221	48		3333(2 ²)	024	336	384	
3212(3)	122	48		3333(3 ²)	006	48	96	
3211(1)	311	96		3332(1 ²)	213	96		
3211(3)	212	48		3332(3 ²)	015	96		
3112(1)	311	96		3331(1 ²)	303	192		
3112(3)	212	96		3331(2 ²)	123	192		
3131(1)	302	192		3331(3 ²)	105	96		
3131(2)	212	96		3322(1 ²)	222	24	48	
3131(3)	203	96		3322(3 ²)	024	48	96	
3121(1)	311	96		3213(1 ²)	312	96		
3121(3)	212	48		3213(3 ²)	114	48		
3111(1)	401	192		3321(1 ²)	312	96		
3111(2)	311	96		3321(3 ²)	114	96		
3111(3)	302	96		3113(1 ²)	402	192		
2211(1)	320	24	48	3113(2 ²)	222	192		
2121(1)	320	48		3113(3 ²)	204	96		
2121(3)	221	24		3311(1 ²)	402	144	192	
2111(1)	410	96		3511(2 ²)	222	72	96	
2111(3)	311	48		3311(3 ²)	204	48	96	
1111(1)	500	144	192					

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
3232(1 ²)	222	48		2111(1 ²)	510	96	
3232(3 ²)	024	96		2111(3 ²)	312	48	
3231(1 ²)	312	96		1111(1 ²)	600	144	192
3231(3 ²)	114	96		1111(2 ²)	420	72	96
3122(1 ²)	321	48		1111(3 ²)	402	48	96
3122(3 ²)	123	48					
3212(1 ²)	321	48			105	144	192
3212(3 ²)	123	48		3333 ² (2)	015	336	384
3211(1 ²)	411	96		3333 ² (3)	006	48	96
3211(3 ²)	213	48		3 ² 332(1)	114	96	
3112(1 ²)	411	96		33 ² 32(1)	114		
3112(3 ²)	213	96		333 ² 2(1)	114		
3131(1 ²)	402	192		3332 ² (1)	123		
3131(2 ²)	222	96		3 ² 332(3)	015	96	
3131(3 ²)	204	96		33 ² 32(3)	015		
3121(1 ²)	411	96		333 ² 2(3)	015		
3121(3 ²)	213	48		3332 ² (3)	024		
3111(1 ²)	501	192		3 ² 331(1)	204	192	
3111(2 ²)	321	96		33 ² 31(1)	204		
3111(3 ²)	303	96		333 ² 1(1)	204		
2211(1 ²)	420	24	48	3331 ² (1)	303		
2121(1 ²)	420	48		3 ² 331(2)	114	192	
2121(3 ²)	222	24		33 ² 31(2)	114		

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
$333^2_1(2)$	114			$33^2_{21}(3)$	114		
$333^2_1(3)$	213			$332^2_1(3)$	123		
$3^2_{331}(3)$	105	96		$332^2_1(3)$	213		
$33^2_{31}(3)$	105			$3^2_{113}(1)$	303	192	
$333^2_1(3)$	105			$31^2_{13}(1)$	402		
$3331^2(3)$	204			$3^2_{113}(2)$	213	192	
$3^2_{322}(1)$	123	24	48	$31^2_{13}(2)$	312		
$332^2_2(1)$	132			$3^2_{113}(3)$	204	96	
$3^2_{322}(3)$	024	48	96	$31^2_{13}(3)$	303	96	
$332^2_2(3)$	033			$3^2_{311}(1)$	303	144	192
$3^2_{213}(1)$	213	96		$331^2_1(1)$	402		
$32^2_{13}(1)$	222			$3^2_{311}(2)$	312	72	96
$321^2_3(1)$	312			$331^2_1(2)$	312		
$3213^2(1)$	213			$3^2_{311}(3)$	204	48	96
$3^2_{213}(3)$	114	48		$331^2_1(3)$	303		
$32^2_{13}(3)$	123			$3^2_{232}(1)$	123	48	
$321^2_3(3)$	213			$32^2_{32}(1)$	132		
$3213^2(3)$	114			$3^2_{232}(2)$	024	96	
$3^2_{321}(1)$	213	96		$32^2_{32}(3)$	033		
$33^2_{21}(1)$	213			$3^2_{231}(1)$	213	96	
$332^2_1(1)$	222			$32^2_{31}(1)$	222		
$3321^2(1)$	312			$323^2_1(1)$	213		
$3^2_{321}(3)$	114	96		$3231^2(1)$	312		

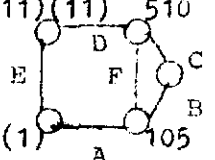
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
$3^2 231(3)$	114	96		$3211^2(1)$	411		
$32^2 31(3)$	123			$3^2 211(3)$	213	48	
$323^2 1(3)$	114			$32^2 11(3)$	222		
$3231^2(3)$	213			$321^2 1(3)$	312		
$3^2 122(1)$	222	48		$3211^2(3)$	312		
$31^2 22(1)$	321			$3^2 112(1)$	312	96	
$312^2 2(1)$	231			$31^2 12(1)$	411		
$3122^2(1)$	231			$311^2 2(1)$	411		
$3^2 122(3)$	123	48		$3112^2(1)$	321		
$31^2 22(3)$	222	48		$3^2 112(3)$	213	96	
$312^2 2(3)$	132			$31^2 12(3)$	312		
$3122^2(3)$	132			$311^2 2(3)$	312		
$3^2 212(1)$	222	48		$3112^2(3)$	222		
$32^2 12(1)$	231			$3^2 131(1)$	303	192	
$321^2 2(1)$	321			$31^2 31(1)$	402		
$3212^2(1)$	231			$3^2 131(2)$	213	96	
$3^2 212(3)$	123	48		$31^2 31(2)$	312		
$32^2 12(3)$	132			$3^2 131(3)$	204	96	
$321^2 2(3)$	222			$31^2 31(3)$	303		
$3212^2(3)$	132			$3^2 121(1)$	312	96	
$3^2 211(1)$	312	96		$31^2 21(1)$	411		
$32^2 11(1)$	321			$312^2 1(1)$	321		
$321^2 1(1)$	411			$3121^2(1)$	411		

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
$3^2_1 21(3)$	213	48		$21^2_{11}(1)$	510		
$31^2_2 21(3)$	312			$211^2_1(1)$	510		
$312^2_1(3)$	222			$2111^2(1)$	510		
$3121^2(3)$	312			$2^2_{111}(3)$	321	48	
$3^2_{111}(1)$	402	192		$21^2_{11}(3)$	411		
$31^2_{11}(1)$	501			$211^2_1(3)$	411		
$311^2_1(1)$	501			$2111^2(3)$	411		
$3111^2(1)$	501			$1^2_{111}(1)$	600	144	192
$3^2_{111}(2)$	312	96		$1^2_{111}(2)$	510	72	96
$31^2_{11}(2)$	411			$1^2_{111}(3)$	501	48	96
$311^2_1(2)$	411						
$3111^2(2)$	411						
$3^2_{111}(3)$	303	96					
$31^2_{11}(3)$	402						
$311^2_1(3)$	402						
$3111^2(3)$	402						
$2^2_{211}(1)$	330	24	48				
$221^2_1(1)$	420						
$2^2_{121}(1)$	330	48					
$21^2_2 21(1)$	420						
$2^2_{121}(3)$	231	24					
$21^2_2 21(3)$	321						
$2^2_{111}(1)$	420	96					



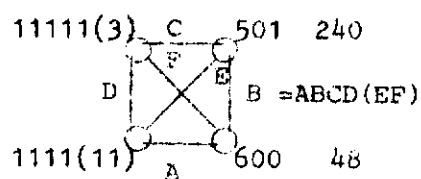
DESIGNATION	XYZ	V	A
(33)(32)(23)	024	192	480
(33)(33)(11)	204	2040	2544
(33)(31)(31)	204	2592	
(33)(31)(13)	204	1728	2592
(33)(22)(22)	042	48	120
(33)(11)(11)	402	1248	1752
(31)(31)(11)	402	1536	
(31)(13)(11)	402	1104	1536
(22)(22)(11)	240	24	48
(21)(21)(11)	420	240	
(21)(12)(11)	420	96	240
(33)(32)(21)	123	288	
(33)(32)(12)	123	288	
(33)(32)(11)	213	576	
(33)(31)(22)	123	192	
(33)(31)(21)	213	672	
(33)(31)(12)	213	672	
(33)(21)(11)	312	480	
(32)(32)(31)	123	432	
(32)(32)(21)	132	192	
(32)(31)(32)	123	192	432
(32)(31)(31)	213	624	
(32)(31)(13)	213	384	624

DESIGNATION	XYZ	V	A
(32)(31)(11)	312	576	
(32)(23)(31)	123	192	432
(32)(23)(21)	132	96	192
(32)(23)(12)	132	96	192
(32)(21)(21)	231	144	
(32)(21)(12)	231	48	144
(32)(21)(11)	321	288	
(32)(13)(11)	312	576	
(32)(12)(21)	231	48	144
(32)(12)(11)	321	288	
(31)(31)(21)	312	576	
(31)(22)(11)	321	96	
(31)(21)(31)	312	384	576
(31)(21)(21)	321	288	
(31)(21)(12)	321	96	192
(31)(13)(21)	312	384	576
(31)(12)(21)	321	96	288
(33)(22)(11)	222	48	
(33)(12)(21)	222	96	336
(32)(32)(11)	222	384	
(32)(31)(21)	222	288	
(32)(31)(12)	222	288	
(32)(23)(11)	222	192	288

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
(32)(21)(31)	222	288		33322(1)	123	816	
(32)(13)(21)	222	288		33322(3)	024	824	
(31)(31)(22)	222	384		33321(1)	213	4968	
(31)(22)(31)	222	288	384	33321(2)	123	1704	1352
(33)(31)(11)	303	1824		33321(3)	114	4128	
(32)(32)(32)	033	144	360	33311(1)	303	5136	5232
(31)(31)(31)	303	1776	2568	33311(2)	213	2832	
(31)(13)(31)	303	768	2280	33311(3)	204	3600	3639
(21)(21)(21)	330	48	72	33232(1)	123	1152	
(33)(33)(32)	015	480	768	33232(3)	024	1368	
(33)(33)(31)	105	2734	3648	33231(1)	213	5088	5184
(31)(11)(11)	501	960	1392	33231(2)	123	1872	
(21)(11)(11)	510	336	480	33231(3)	114	4800	
 =ABCDE (F)				33222(1)	132	144	192
33333(1)	105	1632		33222(1)	042	96	
33333(2)	015	1056		33222(3)	033	96	144
33333(3)	006	1200	1243	33221(1)	222	1200	1248
33332(1)	114	2784		33221(3)	123	912	1008
33332(2)	024	1296	1476	33212(1)	222	1056	
33332(3)	015	2832	2928	33212(3)	123	864	
33331(1)	204	6720	7102	33211(1)	312	3696	3792
33331(2)	114	3744	3760	33211(2)	222	768	
33331(3)	105	4752	4848	33211(3)	213	2736	2928

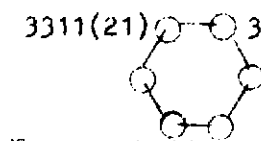
DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
33121(1)	303	5856	6048	32211(1)	321	1008	
33131(2)	213	2692	2640	32211(3)	222	768	
33131(3)	204	2056		32131(1)	312	4752	
33121(1)	312	1968	2064	32131(2)	222	1152	
33121(2)	222	720	768	32131(3)	213	3888	
33121(3)	213	1440		32121(1)	321	1824	
33111(1)	402	3792	4080	32121(3)	222	1296	
33111(2)	312	2064	2208	32112(1)	321	864	
33111(3)	303	2736	2976	32112(3)	222	840	
32322(1)	132	336		32111(1)	411	3168	3264
32322(3)	033	480		32111(2)	321	768	
32321(1)	222	2016		32111(3)	312	2400	2472
32321(3)	123	216		31311(1)	402	4944	
32311(1)	312	2016		31311(2)	312	1968	
32311(2)	222	768		31311(3)	303	3360	
32311(3)	213	1680		31221(1)	321	384	480
32231(1)	222	720		31221(3)	222	336	432
32231(3)	123	528		31211(1)	411	3504	
32212(1)	231	552		31211(2)	321	840	
32212(3)	132			31211(3)	312	2400	
32221(1)	321	192		31111(1)	501	3216	2408
32221(2)	141	96		31111(2)	411	1488	1524
32221(3)	132	192		31111(3)	402	2232	2376

DESIGNATION	XYZ	V	A
22211(1)	330	24	
22211(2)	240	48	
22211(3)	231	48	
22121(1)	330	192	240
22121(3)	231	144	
22111(1)	420	288	384
22111(3)	321	288	
21211(1)	420	768	
21211(3)	321	480	
21111(1)	510	1128	1224
21111(2)	420	216	240
21111(3)	411	720	
11111(1)	600	384	624
11111(2)	510	192	336



1111(11)	600	48
3111(11)	501	48
2111(11)	510	48
3211(11)	411	48
3311(31)	303	48
3333(21)	114	48
3312(33)	114	48

DESIGNATION	XYZ	V	A
3333(22)	024	48	
3311(11)	402	48	
1111(22)	420	24	
3311(22)	222	48	
3232(11)	222	24	
3331(21)	213	48	
3321(11)	312	48	
3311(21)	312	48	



Type AAAAAA

333333	006	329184	321072
222222	060	264	132
111111	600	11640	8544
Type AAAAAB			
333332	015	93600	92160
333331	105	212832	209664
311111	501	24720	22272
211111	510	6480	5472

Type AAAABB

333322	024	22320	21744
333232	024	29016	28512
332332	024	30336	29664
332222	042	960	820

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
323222	042	1896	1680	311211	411	13824	13440
322322	042	2544		Type AAABBB			
333311	204	117744	116208	333222	033	5184	4869
333131	204	144072	142992	332232	033	6624	
331331	204	150384	149904	323232	033	8352	
222211	240	192	144	333111	303	65808	63936
222121	240	600	504	331311	303	85248	84672
221221	240	936		313131	303	105408	
331111	402	38928	37104	222111	330	864	720
313111	402	50568	49200	221211	330	1584	
311311	402	53424	52656	212121	330	2448	
221111	420	2496	2328	Type AAABBC			
212111	420	3792	3552	333221	123	13296	12960
211211	420	408	3840	333212		17184	16992
Type AAABBC				332321		19392	19296
333321	114	60048	59328	332312		18432	17952
333231	114	64464	63936	332231		15456	15264
332331	114	63168	62784	323231		21600	
322221	141	768	576	33221	132	2676	2736
322212	141	1152	1152	332212		4176	
322122	141	1152		323221		4176	3984
321111	411	11904	11136	323212		5616	
312111	411	13920	13440	322321		4176	

DESIGNATION	XYZ	V	A	DESIGNATION	XYZ	V	A
322231		2976	2736	313121		28368	
333211	213	33552	33120	312121	321	8352	
333121		36016	37728	312211		5280	5184
332311		36864	36576	321112		6240	6048
332131		41280	41184	321121		6816	6530
331321		42528	42240	321211		7296	7200
323131		45792		322111		4272	4032
322211	231	1632	1440	Type AABBC			
322121		2592		332211	222	7944	7752
322112		2592		332121		11088	11064
321221		2592		332112		9288	8880
321212		3744		331221		9288	9216
312221		1632	1440	323211		10824	10776
332111	312	18480	18000	323121		12888	12698
331211		22272	22032	322311		9024	8952
323111		21888	21456	322131		9864	9768
321311		25728	25440	321321		13512	13272
321131		25680	25488	321312		13968	13920

เอนโทรปีและสมการสถานะของแบบจำลองไอซิงที่มีอันตรกิริยา
ระหว่างโมเลกุลที่อยู่ใกล้กันที่สุด อันที่หนึ่ง สอง
และสามตามลำดับบนเพชเชนเคอร์คิวบิกแลตทิซ

บทที่ ๒

สอง

เอกชัย สวัสดิ์สิงห์

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาดมหลักสูตร

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

กรกฎาคม 2528

เอนโทรปีและสมการสถานะของแบบจำลองไอซิงชนิดสามมิติบนเฟซเซนเตอร์คิวบิก
แลตทิซสามารถหาได้จากการคำนวณหาค่าแรกในการกระจายอนุกรมของพลังงานอิสระ
เฮล์มโฮลทซ์ เอมเหล่านี้จะอยู่ในรูปแบบของความหนาแน่น อนุกรมและอันตรกิริยาที่มี
ความเข้มสัมพัทธ์เท่ากัน สัมประสิทธิ์ของความหนาแน่นและอนุกรมหาได้จากการใช้
คอมพิวเตอร์ช่วยในการหาจำนวนวิธีที่เฉพาะที่นำไปให้สามารถบรรจุในแลตทิซกาซ โดย
วิธีการประมาณเอกซ์ตราโปลेटกับอนุกรมของเอนโทรปีที่มีความหนาแน่นวิกฤต ทำให้สามารถ
หาอนุกรมวิกฤตได้ ผลการวิจัยสรุปได้ดังต่อไปนี้

1. ถ้าพิจารณาอันตรกิริยาความเข้มสัมพัทธ์มากขึ้น เอนโทรปี ณ บริเวณวิกฤตจะ
ลดลง
2. จากกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความดันกับความหนาแน่นจะเห็นว่า
ในขณะที่อนุกรมสูงขึ้นสู่อนุกรมวิกฤต ความหนาแน่นของของเหลว-กาซจะเข้าใกล้
ความหนาแน่นวิกฤต

ENTROPY AND EQUATION OF STATE OF ISING MODEL WITH FIRST
SECOND AND THIRD NEAREST NEIGHBOUR INTERACTIONS
ON FACE-CENTERED CUBIC LATTICE

AN ABSTRACT

BY

EKACHAI SAVADISING

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

July 1985

The entropy and equation of state of the three dimensional Ising model on face-centered cubic lattice are investigated through extensive calculation of the first six terms in high temperature expansion of Helmholtz free energy. These terms are expressed in terms of density, temperature and three interactions of equal potential strength. The coefficients of density and temperature are determined through the sorting of all possible topological distinct diagrams with the help of a computer. These results in entropy series expansion are arranged and analysed by extrapolation method at critical density to yield the critical temperature.

Final conclusions can be made as follows:

I If higher interaction potential strengths are taken in to consideration the critical entropy will be decreasing.

II From pressure-density plot it will be seen that as the temperature increases to critical temperature the density of liquid and gas will approach the critical density.