Math-Net.Ru
Общероссийский математический портал

Ю. Е. Шелудяк, В. А. Рабинович, О значениях критических показателей трехмерной модели Изинга, *ТВТ*, 1979, том 17, выпуск 1, 45–49

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки:
IP: 100.28.231.85
8 ноября 2024 г., 17:16:45

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Том 17 1979 № 1

УДК 536.444

О ЗНАЧЕНИЯХ КРИТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Шелудяк Ю. Е., Рабинович В. А.

Получены новые, более точные оценки значений критических показателей из анализа высокотемпературных рядов трехмерной модели Изинга. Значения критических показателей трехмерной модели Изинга можно использовать для построения уравнений состояния однокомпонентных систем в критической области.

Получены новые оценки критических показателей $\alpha=0{,}111\pm0{,}001$ и $\gamma=1{,}244\pm0{,}0005$ из анализа высокотемпературных рядов трехмерной модели Изинга независимо от выбора критической температуры. Результаты хорошо согласуются с оценками критических показателей, теоретико-полевыми методами и подтверждают справедливость гипотезы универсальности критических явлений.

Современная теория критических явлений позволяет выделить группы подобных физических систем. В пределах каждой группы физические системы характеризуются одними и теми же критическими показателями и скэйлинговыми функциями [1]. Чистые жидкости и модель Изинга для магнетиков относятся к одной и той же группе. Последние экспериментальные исследования p, v, T-свойств ксенона, углекислоты и шестифтористой серы [2] подтверждают близость критических показателей чистых жидкостей к теоретическим оценкам.

Однако существует небольшое различие между оценками критических показателей трехмерной модели Изинга из анализа рядов и оценками критических показателей методом ренормализационной группы для трехмерных магнитных систем с однокомпонентным спином. Оценки критических показателей различными методами приведены в табл. 1.

В данной работе проведен новый анализ высокотемпературных рядов восприимчивости $\varkappa$ [7—9] и теплоемкости C_H [10] трехмерной модели Изинга. Новые оценки $\gamma=1{,}244\pm0{,}0005$ и $\alpha=0{,}111\pm0{,}001$ близки к результатам, полученным методом ренормализационной группы.

Одной из основных причин, затрудняющих надежные оценки критических показателей из анализа рядов, является неопределенность выбора критической температуры. Чтобы получить надежные оценки критического показателя ε из ряда, для которого известно n первых членов, следует обеспечить экстраполяцию последовательности оценок ε_n к $1/n=0$

$$\varepsilon_n^{(m)}=\frac{1}{m}\left[n\varepsilon_n^{(m-1)}-(n-m)\varepsilon_{n-1}^{(m-1)}\right]. \tag{1}$$

Обычно различие между последними оценками ε_n и ε_{n-1} сравнимо по величине с доверительным интервалом оценок из-за неопределенности выбора критической температуры, и экстраполяция невозможна. Например, анализ ряда высокотемпературной восприимчивости гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки методом отношений при $v_k^{-1}=9{,}829$ ($v=\operatorname{th} J/kT$) дает возрастающую последовательность оценок γ_n, и экстраполяция по-

Таблица 1

Оценки критических показателей трехмерных систем с однокомпонентным спином

Метод	α	β	γ	δ	ν	η
Анализ рядов [3], вероятные значения	0,125	0,3125	1,25	5	0,643	0,056
ε-разложение с точностью до ε^2 [4]	0,077	0,340	1,244	4,46	0,626	0,037
Вариационное приближение [5]	0,1132	0,3243	1,238	4,818	0,6289	0,0313
Пертурбационное разложение [6]	0,110	0,325	1,2402	4,816	0,6300	0,0315

следовательности приводит к результату $\gamma \geqslant 1{,}250$. Анализ ряда при $v_k^{-1} = 9{,}83$ дает убывающую последовательность оценок и $\gamma \leqslant 1{,}246$.

Процедура ренормализации критической точки [11] дает возможность получить несколько упорядоченных последовательностей оценок для одного и того же критического показателя независимо от выбора критической температуры.

Если две функции $f_1(x) \sim (1-yx)^{-\varepsilon_1}$ и $f_2(x) \sim (1-yx)^{-\varepsilon_2}$ разлагаются в ряды $f_1(x) = \sum\limits_n a_n x^n$ и $f_2(x) = \sum\limits_n b_n x^n$, то ряд, образованный отношением коэффициентов $c_n = a_n/b_n$, представляет собой разложение функции

$$F(x) = \sum_n c_n x^n \sim (1-x)^{-(\varepsilon_1-\varepsilon_2+1)}. \qquad (2)$$

В дальнейшем функцию $F(x)$ будем обозначать $[f_1(x)\,|\,f_2(x)]$. Соотношение (2) справедливо при условии $0 \leqslant \varepsilon \leqslant 2$.

Анализ ряда (2) методом отношений дает последовательность оценок разности показателей $\varepsilon_1-\varepsilon_2$ независимо от выбора критической температуры (радиус сходимости ряда (2) $y = x_k^{-1} = 1$)

$$(\varepsilon_1-\varepsilon_2)_n = n(r_n - 1), \quad r_n = c_n/c_{n-1}. \qquad (3)$$

Коэффициенты ряда логарифмической производной функции $F(x)$

$$d \ln F(x)/dx = \sum_n d_n x^n$$

образуют последовательность оценок

$$d_n = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + 1)_n. \qquad (4)$$

Если $f_2(x) = d \ln f_1(x)/dx \sim (1-yx)^{-1}$, то анализ ряда (2) методами отношений (3) и логарифмической производной (4) дает две последовательности оценок показателя ε_1. Анализ ряда $[f_2(x)\,|\,f_1(x)]$ дает две другие последовательности оценок показателя ε_1.

В табл. 2 приведены оценки показателя восприимчивости γ, в табл. 3 — оценки показателя теплоемкости α из анализа высокотемпературных рядов ГЦК-решетки. В качестве функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ использованы $\varkappa$, $d \ln \varkappa/dv$, C_H и dC_H/dv. В этих же таблицах приведены результаты экстраполяции последовательностей оценок к $1/n = 0$ по соотношению (1). Для показателей γ и α получены возрастающие и убывающие последовательности оценок. Поэтому последние оценки γ_n и α_n дают нижний и верхний пределы истинных значений критических показателей $1{,}2372 < \gamma < 1{,}2464$ и $0{,}0643 < \alpha < 0{,}1231$. Экстраполяция последовательностей оценок дает вероятные значения критических показателей $\gamma = 1{,}2440 \pm 0{,}0005$ и $\alpha = 0{,}111 \pm$

Таблица 2

Оценки показателя γ ГЦК-решетки

n	Метод отношений		$d \ln F(x)/dx$	
	$[\varkappa[d \ln \varkappa/dv]$	$[d \ln \varkappa/dv\|\varkappa]$	$[\varkappa[d \ln \varkappa/dv]$	$[d \ln \varkappa/dv\|\varkappa]$
10	1,24689	1,24094	1,24739	1,23572
11	1,24673	1,24131	1,24701	1,23631
12	1,24655	1,24159	1,24671	1,23681
13	1,24640	1,24182	1,24645	1,23724
14	1,24626	1,24201		
$\gamma_n^{(1)}$	1,2445	1,2445	1,2436	1,2424
$\gamma_n^{(2)}$	1,2440	1,2440	1,2443	1,2429
$\gamma_n^{(3)}$	1,2441	1,2441	1,2440	1,2438

Таблица 3

Оценки показателя α ГЦК-решетки методом отношений

n	$\left[C_H\middle\|\frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	$\left[\frac{d\ln\varkappa}{dv}\middle\|C_H\right]$	$\left[\frac{dC_H}{dv}\middle\|\frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	$\left[\frac{d\ln\varkappa}{dv}\middle\|\frac{dC_H}{dv}\right]$
10	0,1269	0,0434	0,1268	0,1252
11	0,1266	0,0513	0,1255	0,1241
12	0,1253	0,0565	0,1242	0,1229
13	0,1240	0,0607	0,1231	0,1219
14	0,1229	0,0643		
$\alpha_n^{(1)}$	0,1091	0,1113	0,1101	0,1103
$\alpha_n^{(2)}$	0 1117	0.1120	0,1116	0,1116

Таблица 4

Оценки показателя γ ОЦК- и ПК-решеток методом отношений

Решетка	$F(x)$	n	γ_n	$\gamma_n^{(1)}$	$\gamma_n^{(2)}$
ОЦК	$\left[\varkappa\middle\|\frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	Четные	1,27246	1,2460	1,2419
		Нечетные	1,24186	1,2413	1,2422
	$\left[\frac{d\ln\varkappa}{dv}\middle\|\varkappa\right]$	Четные	1,26225	1,2478	1,2423
		Нечетные	1,23318	1,2410	1,2421
ПК	$\left[\varkappa\middle\|\frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	Четные	1,27454	1,2468	1,2455
		Нечетные	1,24359	1,2438	1,2306
	$\left[\frac{d\ln\varkappa}{dv}\middle\|\varkappa\right]$	Четные	1,26543	1,2486	1,2456
		Нечетные	1,23592	1,2435	1,2317

$\pm 0{,}001$. Анализ рядов объемноцентрированной кубической (ОЦК) и простой кубической (ПК) решеток методом отношений дает две последовательности оценок: отдельно для нечетных и четных членов ряда.

В табл. 4 приведены оценки показателя γ_n для последних членов ряда ОЦК- и ПК-решеток и результаты экстраполяции последовательностей оценок к $1/n=0$.

В табл. 5 приведены оценки показателя α для ПК- и ОЦК-решеток. Результаты экстраполяции последовательностей оценок показателя γ

Таблица 5

Оценки показателя α ОЦК- и ПК-решеток методом отношений

Решетка	$F(x)$	α_n	$\alpha_n^{(1)}$	$\alpha_n^{(2)}$
ОЦК	$\left[C_H \middle\vert \frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	0,1356	0,1170	0,0417
	$\left[\frac{dC_H}{dv} \middle\vert \frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	0,1183	0,1071	0,0480
ПК	$\left[C_H \middle\vert \frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	0,1360	0,1097	0,1057
	$\left[\frac{dC_H}{dv} \middle\vert \frac{d\ln\varkappa}{dv}\right]$	0,1164	0,1022	0,0917

Таблица 6

Оценки разности показателей $\gamma-\alpha$ методом отношений

Решетка	$F(x)$	$(\gamma-\alpha-1)_n$	$(\gamma-\alpha-1)_n^{(1)}$	$(\gamma-\alpha-1)_n^{(2)}$
ГЦК	$[C_H/\varkappa]$	0,1039	0,1349	0,1322
	$[\varkappa/C_H]$	0,1984	0,1322	0,1317
	$\left[\frac{dC_H}{dv} \middle\vert \varkappa\right]$	0,1210	0,1342	0,1325
	$\left[\varkappa \middle\vert \frac{dC_H}{dv}\right]$	0,1222	0,1345	0,1305
ПК	$[C_H/\varkappa]$	0,1008	0,1399	0,1402
	$\left[\frac{dC_H}{dv} \middle\vert \varkappa\right]$	0,1248	0,1367	0,1232
ОЦК	$[C_H/\varkappa]$	0,0942	0,1320	0,1976
	$\left[\frac{dC_H}{dv} \middle\vert \varkappa\right]$	0,1213	0,1350	0,1387

ОЦК-решетки лежат в пределах $\gamma=1,244\pm0,004$. Последовательности оценок показателя γ для ПК-решетки менее упорядочены, и экстраполянты второго порядка для нечетных членов ряда дают явно заниженное значение $\gamma=1,231$. Недостаточно упорядочены и последовательности оценок показателя теплоемкости для ПК- и ОЦК-решеток. Экстраполянты первого порядка лежат в пределах $\alpha=0,109\pm0,008$, а экстраполянты второго и более высоких порядков расходятся.

В табл. 6 приведены оценки разности показателей $\gamma-\alpha$ для всех трех решеток. Экстраполянты первого и второго порядков для ГЦК-решетки лежат в пределах $\gamma-\alpha-1=0,133\pm0,002$ и хорошо согласуются с оценками $\gamma=1,244$ и $\alpha=0,111$. Для ПК- и ОЦК-решеток удовлетворительные результаты дают только экстраполянты первого порядка $\gamma-\alpha-1=0,136\pm0,004$. Экстраполянты второго и более высоких порядков расходятся.

Из приведенных в табл. 2—6 результатов следует, что оценки $\gamma=5/4$ и $\alpha=1/8$ лежат за пределами вероятных значений критических показателей и получены в результате занижения v_k^{-1}. В связи с этим следует пересмотреть все оценки критических амплитуд трехмерной модели Изинга, так как оценки критических амплитуд сильно зависят от выбора значений критических показателей и критической температуры.

Наиболее упорядоченные последовательности оценок получены из анализа рядов ГЦК-решетки. Экстраполяция последовательностей оценок к $1/n=0$ дает вероятные значения критических показателей $\alpha=0{,}111\pm\pm0{,}001$ и $\gamma=1{,}2440\pm0{,}0005$. Можно ожидать, что дополнительные два-три члена в высокотемпературных рядах ГЦК-решетки позволят уменьшить погрешность определения критических показателей до 10^{-4} для α и до 10^{-5} для γ.

Используя известные соотношения [12], получим оценки остальных критических показателей: $\beta=0{,}3225\pm0{,}001$; $\delta=4{,}86\pm0{,}02$; $\nu=0{,}6297\pm\pm0{,}0003$; $\eta=0{,}0244\pm0{,}002$. Полученные результаты практически совпадают с оценками критических показателей теоретико-полевыми методами, что подтверждает справедливость гипотезы универсальности критических явлений.

Подтверждение гипотезы универсальности дает дополнительные основания представлять околокритическую область чистых жидкостей и газов скэйлинговым уравнением состояния с фиксированными критическими показателями. Это позволяет использовать полученные значения критических показателей трехмерной модели Изинга для построения уравнения состояния однокомпонентных систем в критической области.

Всесоюзный научно-исследовательский
институт метрологической службы

Поступила в редакцию
3 IV 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. *L. P. Kadanoff.* Phase Transitions and Critical Phenomena, *5A*, 1. Academ. Press, N. Y., 1976.
2. *R. Hocken, M. R. Moldover.* Phys. Rev. Lett., *37*, № 1, 29, 1976.
3. *C. Domb.* Phase Transition and Critical Phenomena, *3*, p. 357. Academ. Press, L.– N. Y., 1974.
4. *К. Вильсон, Дж. Когут.* Ренормализационная группа и ε-разложение. «Мир», 1975.
5. *L. P. Kadanoff, A. Houghton, M. C. Yalabic.* J. Statist. Phys., *14*, № 2, 171, 1976.
6. *J. C. Le Guillou, J. Zinn-Justin.* Phys. Rev. Lett., *39*, № 2, 95, 1977.
7. *M. F. Sykes, D. S. Gaunt, P. D. Roberts, J. A. Wyles.* J. Phys., *5A*, № 5, 640, 1972.
8. *D. C. Rapoport.* J. Phys., *7A*, № 15, 1918, 1974.
9. *S. McKenzie.* J. Phys., *8A*, № 10, 102, 1975.
10. *M. F. Sykes, D. L. Hunter, D. C. McKenzie, B. R. Heap.* J. Phys., *5A*, № 5, 667, 1972.
11. *D. L. Hunter, J. A. Baker.* Phys. Rev., *7B*, № 7, 3346, 1973.
12. *А. З. Паташинский, В. Л. Покровский.* Флуктуационная теория фазовых переходов. «Мир», 1975.