Ю. Е. Шелудяк, В. А. Рабинович, О значениях критических показателей трехмерной модели Изинга. Учет поправочных членов, *ТВТ*, 1980, том 18, выпуск 1, 63–67

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Том 18 1980 № 1

УДК 536.444

О ЗНАЧЕНИЯХ КРИТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА. УЧЕТ ПОПРАВОЧНЫХ ЧЛЕНОВ

Шелудяк Ю. Е., Рабинович В. А.

Получены новые значения критических показателй из анализа рядов трехмерной модели Изинга (независимо от выбора критической температуры с учетом поправочных членов к асимптотическим зависимостям), согласующиеся с лучшими оценками значений критических показателей теоретико-полевыми методами в пределах $\alpha=0{,}112\pm0{,}002$; $\gamma=1{,}240\pm0{,}002$.

Современная теория критических явлений [1] предсказывает универсальность критических показателей (к.п.). Однако существуют небольшие различия между оценками значений к.п. трехмерной модели Изинга из анализа рядов [2] и теоретико-полевыми методами [3, 4]. Основными причинами, вызывающими искажение оценок значений к.п. из анализа рядов, являются неопределенность выбора критической температуры и наличие поправочных членов к асимптотическим зависимостям.

Ранее нами получены [5] значения к.п. трехмерной модели Изинга из анализа высокотемпературных рядов независимо от выбора критической температуры. Значения к.п. $\gamma=1{,}244$ и $\alpha=0{,}111$ значительно ближе к оценкам к.п. теоретико-полевыми методами $\gamma=1{,}238\div1{,}240$ и $\alpha=0{,}110-0{,}113$, чем к старым оценкам к.п. из анализа рядов $\gamma=1{,}25$ и $\alpha=0{,}125$.

В данной работе получены новые значения к.п. из анализа рядов трехмерной модели Изинга с учетом поправочных членов к асимптотическим зависимостям, согласующиеся с оценками значений к.п. теоретико-полевыми методами в пределах $\alpha=0{,}112\pm0{,}002$ и $\gamma=1{,}240\pm0{,}002$, а также объяснено различие оценок значений к.п. из анализа высоко- и низкотемпературных рядов.

Если функция $f(x)$, заданная в виде степенного ряда

$$f(x)=\sum_n a_n x^n, \tag{1}$$

имеет поправочный член к асимптотической зависимости

$$f(x)=E(1-yx)^{-\varepsilon}[1+e(1-yx)^{\Delta}], \tag{2}$$

то оценки к.п. ε методом отношений

$$\varepsilon_n=n[(a_n/a_{n-1})y^{-1}-1]+1 \tag{3}$$

зависят от числа членов ряда

$$\varepsilon_n=\varepsilon-\Delta[e\varphi_{n-1}/(1+e\varphi_{n-1})], \tag{4}$$

$$\varphi_n=\frac{\varepsilon-\Delta}{\varepsilon}\,\frac{\varepsilon-\Delta+1}{\varepsilon+1}\cdots\frac{\varepsilon-\Delta+n-1}{\varepsilon+n-1}. \tag{5}$$

В пределе при $n \to \infty$ последовательность оценок ε_n стремится к значению к.п. ε, однако сходимость последовательности очень медленная. Линейная экстраполяция последовательности (4) к $1/n=0$

$$\varepsilon_n^{(1)} = n\varepsilon_n - (n-1)\varepsilon_{n-1}$$

дает

$$\varepsilon_n^{(1)} \approx \varepsilon + (\varepsilon_n - \varepsilon)(1-\Delta), \qquad (6)$$

а экстраполянты более высоких порядков изменяются очень слабо.

По существующим оценкам [4, 6, 7] значение показателя первого поправочного члена $\Delta \sim 0{,}5$. Поэтому анализ ряда (1) методом отношений даже при точном значении критической температуры y дает систематическую ошибку при определении значений ε.

Точное значение ε для последовательности оценок (3) можно определить из соотношения

$$\varepsilon_n - \varepsilon = (\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n)(\varepsilon - \Delta + n - 2)/(\Delta + \varepsilon_{n-1} - \varepsilon). \qquad (7)$$

Для последовательностей оценок, полученных в [5] независимо от выбора критической температуры, соотношение (7) имеет вид

$$\varepsilon_n - \varepsilon - c_n \frac{1-\varepsilon}{n-\Delta-1} \approx \frac{\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n}{\Delta + \varepsilon_{n-1} - \varepsilon} (\varepsilon - \Delta + n - 2), \qquad (8)$$

где c_n — отклонение от единицы последовательности оценок методом отношений для ряда логарифмической производной восприимчивости $d \ln \varkappa / dx$.

В табл. 1 приведены оценки к.п. теплоемкости α и восприимчивости γ по соотношению (8) и результаты экстраполяции оценок $\alpha_{\text{экст}}$ и $\gamma_{\text{экст}}$ при $1/(n-\Delta-1) = 0$ для последних членов высокотемпературных рядов гранецентрированной кубической решетки при значениях $\Delta = 0{,}5 \pm 0{,}05$. Результаты экстраполяции $\gamma_{\text{экст}} = 1{,}2416 \pm 0{,}0003$ и $\alpha_{\text{экст}} = 0{,}112 \pm 0{,}0001$ практически совпадают с оценками к.п. теоретико-полевыми методами. Однако действительные значения к.п. могут быть несколько иными. Погрешность определения к.п., вызванная неопределенностью значения показателя $\Delta = 0{,}5 \pm 0{,}05$, составляет $\pm 0{,}0003$ для γ и $\pm 0{,}003$ для α, и дальнейшее увеличение числа членов ряда не приведет к существенному уменьшению этой погрешности.

Последние оценки показателя γ для гранецентрированной кубической решетки, полученные в [5], можно воспроизвести с помощью зависимости (2) при $e \sim -0{,}05$. В этом случае $c_n \sim -1{,}5 \cdot 10^{-3}$ и различие между последними оценками и результатами экстраполяции, приведенными в табл. 1, должно составлять $3 \cdot 10^{-5}$ для γ и $1{,}1 \cdot 10^{-4}$ для α. В действительности различие составляет $(1 \div 1{,}2) \cdot 10^{-3}$ для γ и $(1 \div 1{,}5) \cdot 10^{-2}$ для α, что свидетельствует о существенном вкладе в оценки к.п. второго поправочного члена. Поправочные члены к асимптотической зависимости теплоемкости имеют противоположные знаки. Из-за частичной компенсации вклада поправочных членов результаты экстраполяции последовательностей оценок, полученных методом отношений [5] и по соотношению (8), близки друг к другу. Поэтому можно ожидать, что истинное значение к.п. теплоемкости лежит в пределах $\alpha = 0{,}112 \pm 0{,}003$. Поправки к асимптотической зависимости восприимчивости имеют один знак, и оценка $\gamma = 1{,}2416 \pm 0{,}0003$ может быть несколько выше истинного значения к.п.

Анализ низкотемпературных рядов трехмерной модели Изинга дает результаты, противоречащие теории подобия: $\gamma = 1{,}26 \div 1{,}31$, $\beta = 0{,}313 \pm 0{,}001$ [8], анализ рядов теплоемкости не позволяет различить логарифмическую и степенную зависимость [9, 10]. Большинство оценок к. п. из анализа низкотемпературных рядов получено методом аппроксимантов Паде, который не позволяет провести экстраполяцию оценок на бесконечное число членов ряда. Поэтому рассмотрим оценки к. п. алмазной решетки модели

Таблица 1

Оценки значений показателей γ и α гранецентрированной кубической решетки

Показатели	Значения		
Δ	0,45	0,50	0,55
γ	1,2423	1,2427	1,2431
$\gamma_{\text{экст}}$	1,2413	1,2416	1,2419
α	0,0969	0,0994	0,1014
$\alpha_{\text{экст}}$	0,1121	0,1120	0,1120

Таблица 2

Сопоставление значений к.п. для низкотемпературных рядов алмазной решетки модели Изинга и зависимости (2) при $e=-1$, $\varepsilon=1{,}242$ и $\varepsilon=0{,}113$

n	Метод отношений				Метод логарифмической производной			
	α_n	ε_n	γ_n	ε_n	α_n	ε_n	γ_n	ε_n
13	−0,301	−0,085	1,345	1,374	0,204	0,154	1,254	1,326
14	−0,218	−0,080	1,341	1,367	0,205	0,133	1,293	1,328
15	−0,132	−0,076	1,343	1,362	0,205	0,145	1,282	1,323

Изинга, для которой можно провести анализ низкотемпературных рядов методом отношений и логарифмической производной.

Проведенный выше анализ высокотемпературных рядов восприимчивости и теплоемкости показывает, что наличие поправочного члена к асимптотической зависимости при $|e|\sim 0{,}1$ приводит к систематическому завышению оценок к. п. γ и α примерно на 0,01. Можно предположить, что завышение оценок γ из анализа низкотемпературных рядов вызвано большим значением коэффициента e при поправочном члене к асимптотической зависимости. В табл. 2 сопоставлены значения показателей γ и α для алмазной решетки модели Изинга, полученные методом отношений и логарифмической производной, с оценками для зависимости (2) при $e=-1$, $\Delta=0{,}5$, $\varepsilon=1{,}242$ и $\varepsilon=0{,}113$. Несмотря на значительные различия, обусловленные приблизительным выбором коэффициента e, а также наличием дополнительных поправочных членов и посторонних сингулярностей, качественное соответствие оценок из анализа рядов алмазной решетки и для зависимостей (2) очевидно: оценки показателя α_n методами отношений и логарифмической производной имеют противоположные знаки, оценки показателя γ_n обоими методами выше предполагаемого значения $\gamma=1{,}242$. Аналогичные оценки получены для зависимостей (2) при $\varepsilon=0{,}113$ (предполагаемое значение α) и $\varepsilon=1{,}242$ (предполагаемое значение γ).

В табл. 3 сопоставлены значения показателя β, полученные методом отношений и логарифмической производной, для алмазной решетки модели Изинга с оценками для зависимости

$$M=\frac{E(1-x)^{\varepsilon}}{1+e_1(1-x)^{\Delta_1}+e_2(1-x)^{\Delta_2}} \tag{9}$$

при $\varepsilon=0{,}3225$, $\Delta_1=0{,}5$, $\Delta_2=1$, $E=1{,}6$, $e_1=0{,}168$, $e_2=0{,}432$. Зависимость с одним поправочным членом не способна правильно воспроизвести последовательности оценок показателя β, полученные различными методами. Из табл. 3 видно, что оценки показателя β методом отношений выше предполагаемого значения к. п., а методом логарифмической производной — ниже. Для зависимости с одним поправочным членом разность $\varepsilon_n-\varepsilon$ будет иметь знак для обоих методов.

Таблица 3

Сопоставление оценок показателя β_n для алмазной решетки модели Изинга с оценками для зависимости (9) при $\varepsilon=0{,}3225$

n	Метод отношений		Метод логарифмической производной	
	β_n	ε_n	β_n	ε_n
13	0,365	0,355	0,3097	0,3081
14	0,353	0,352	0,3103	0,3088
15	0,336	0,349	0,3109	0,3093

Таблица 4

Оценки показателя для зависимости (9) методом аппроксимантов Паде при $\varepsilon=0{,}3225$

l	m				
	3	4	5	6	7
3	0,3097	0,3111	0,3121	0,3131	0,3135
4	0,3111	0,3125	0,3141	0,3137	
5	0,3121	0,3141	0,3137		
6	0,3130	0,3137			
7	0,3115				

В табл. 4 приведены оценки показателя ε для зависимости (9) методом аппроксимантов Паде

$$\varepsilon\left(\frac{m}{l}\right)=\lim_{x\to1}(1-x)\frac{d\ln M}{dx}=\lim_{x\to1}\sum_n(a_n-a_{n-1})x^n=$$

$$=\frac{p_0+p_1x+\cdots+p_mx^m}{1+q_1x+\cdots+q_lx^l},\quad l+m+1=n. \tag{10}$$

Табл. 4 наглядно иллюстрирует возможность систематической ошибки при анализе рядов методом аппроксимантов Паде: при фиксированном значении показателя $\varepsilon=0{,}3225$ среднее значение оценок $\varepsilon(m/l)=0{,}3126$, среднее квадратичное отклонение $\pm0{,}0013$.

Таким образом, систематические различия между оценками значений к. п. трехмерной модели Изинга, полученными из анализа рядов и методом ренормализационной группы, вызваны наличием поправочных членов к асимптотическим зависимостям. Вклад поправочных членов различен в зависимости от пути подхода к критической точке: для высокотемпературных зависимостей коэффициент при первом поправочном члене составляет несколько процентов от коэффициента при основной сингулярности, а для низкотемпературных зависимостей коэффициенты при поправочном члене и основной сингулярности одного порядка. Проведенный анализ свидетельствует также о необходимости учета второго поправочного члена к асимптотическим зависимостям.

Учет поправочных членов к асимптотическим зависимостям позволил устранить различия между теоретическими оценками значений к. п. Значения к. п., полученные в этой работе, и лучшие оценки значений к. п. теоретико-полевыми методами [3, 4] согласуются в пределах $\alpha=0{,}112\pm0{,}002$ и $\gamma=1{,}240\pm0{,}002$.

Эти результаты свидетельствуют об универсальности к. п. трехмерных систем с однокомпонентным параметром порядка, к которым относятся чистые жидкости и бинарные жидкие смеси. В связи с этим при составлении уравнения состояния чистых жидкостей и газов вблизи критической точки целесообразно использовать теоретические значения критических показателей.

Когда работа была закончена, в [11] на основе обработки экспериментальных данных по аргону и бинарным растворам непроводящих жидкостей были получены следующие значения критических показателей: $\alpha = 0{,}108 \pm 0{,}010$; $\beta = 0{,}339 \pm 0{,}006$; $\gamma = 1{,}20 \pm 0{,}02$.

Сопоставление этих значений с данными, полученными нами из анализа рядов трехмерной модели Изинга, показало, что значения α практически совпадают. Значение γ, приведенное в [11], занижено по сравнению с нашим значением (а значение β соответственно несколько выше). Одним из возможных объяснений различия теоретических и опытных значений показателей γ и β является недостаточное приближение к критической точке в эксперименте. Так, например, в [12], где анализ экспериментальных данных проводился в непосредственной близости от критической точки, получены интервалы значений к. п. $\beta = 0{,}32 \div 33$ и $\gamma = 1{,}23 \div 1{,}27$, в которые попадают полученные нами значения.

Всесоюзный научно-исследовательский институт метрологической службы

Поступила в редакцию 20 IV 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. *L. P. Kadanoff.* Phase Transitions and Critical Phenomena, *5A*. Academ. Press, New York, 1976, p. 1.
2. *C. Domb.* Phase Transitions and Critical Phenomena. Academ. Press, London – New York, 1974, p. 357.
3. *L. P. Kadanoff, A. Houghton, M. C. Yalabic.* J. Statist. Phys., *14*, № 2, 171, 1976.
4. *J. C. Le Guillou, J. Zinn-Justin.* Phys. Rev. Lett., *39*, № 2, 95, 1977.
5. *Ю. Е. Шелудяк, В. А. Рабинович.* ТВТ, *17*, № 1, 1979.
6. *А. Т. Берестов.* ЖЭТФ, *72*, № 1, 348, 1977.
7. *W. J. Camp.* Phys. Rev., *14B*, № 9, 3990, 1976.
8. *P. H. E. Meiger, R. A. Farrell.* Phys. Rev., *12B*, № 1, 243, 1975.
9. *D. S. Gaunt, M. F. Sykes.* J. Phys., *6A*, № 10, 1517, 1973.
10. *C. J. Pearce, M. J. Buckingham.* J. Phys., *9A*, № 8, L81, 1976.
11. *М. А. Анисимов, А. Т. Берестов, В. П. Воронов и др.* ЖЭТФ, *76*, № 5, 1661, 1979.
12. *R. Hocken, M. R. Moldover.* Phys. Rev. Lett., *37*, № 1, 29, 1976.