

计算物理第12题

PB18000039 徐祺云

一 作业题目

推导三角格子点阵上座逾渗的重整化群变换表达式 $p' = R(p)$, 其中端-端连接的条件是3个格点中的2个是占据态, 求临界点 p_c 与临界指数 ν , 与正确值(表 1.6.1.3 - 1)相比较。

二 推导及主要公式

对三角格子点阵重整化, 由离散标度变换对称性(如下图,图源讲义), 变换后晶格常数放大了 $b = N^{1/d}$ 倍, 其中 N 为重整化变换时一个元胞中所包含的初始格点数, d 是维数, 即 $b = \sqrt{3}$ 。

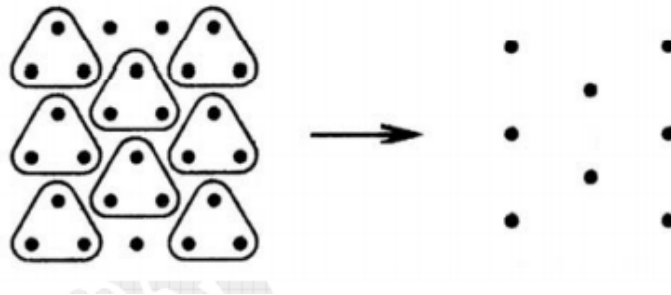


图 1: 三角格子点阵的重整化

其中端-端连接的条件是3个格点中的2个是占据态, 共四种情况:

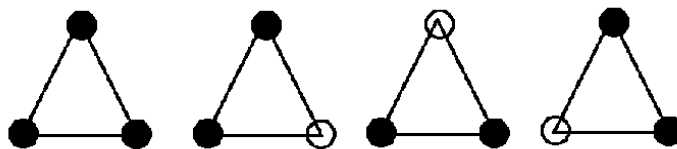


图 2: $b = \sqrt{3}$ 三角格子有至少2个占据的构型

其重整化群变换表达式为：

$$p' = R(p|b = \sqrt{3}) = p^3 + 3 \times (1 - p)p^2 = 3p^2 - 2p^3$$

对于我们关心的临界点 p_c ，它必须满足关系式

$$p_c = R(p_c)$$

除去得到两个平凡解 $p = 0$ 和 $p = 1$ ，得到临界点解为 $p_c = \frac{1}{2}$

为了计算临界指数，我们考虑到重整化的格子点阵中所有的长度量应比原来格子点阵中的长度量缩小 b 倍，即关联长度 $\xi' = \xi/b$ ，由于在 $p \sim p_c$ 处 $\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$ ，故得

$$|p' - p_c|^{-\nu} = b^{-1}|p - p_c|^{-\nu}$$

在临界点 p_c 附近作Taylor展开，取一级近似有

$$p' - p_c = R(p) - R(p_c) \approx \lambda(p - p_c)$$

其中 $\lambda = (\frac{dp'}{dp})_{p=p_c} = \frac{dR(p_c)}{dp}$ ，将上式两边取 ν 次幂，

$$|p' - p_c|^\nu = \lambda^\nu |p - p_c|^\nu$$

与式子

$$|p' - p_c|^{-\nu} = b^{-1}|p - p_c|^{-\nu}$$

比较有： $b = \lambda^\nu$ ，取对数后得临界指数，

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} = \frac{\ln b}{\ln (dp'/dp)_{p=p_c}}$$

代入数值计算得到

$$\lambda = \frac{dR(p_c)}{dp} = (6p - 6p^2)_{p=\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}$$

临界指数

$$\nu = \frac{\ln \sqrt{3}}{\ln \frac{3}{2}} \approx 1.354756$$

三 计算结果与分析

查表(1.6.1.3-1)知, 正确值为 $p_c = \frac{1}{2}, \nu = \frac{4}{3} \approx 1.333333$, 这与我们的计算结果 $p_c = \frac{1}{2}, \nu \approx 1.354756$ 相近, 可以认为已经得到近似程度相当好的结果了。

四 结论

本题推导了三角格子点阵上的重整化群变换 $p' = R(p)$ 表达式, 求得了临界点 p_c 和临界指数 ν 并与正确值做比较, 发现结果相近。这种误差可能来源于元胞的边界效应, 即元胞的占据态与其他元胞无关的假定对重整化群变换后的大的元胞不是严格的, 不过该边界效应对大的元胞尺度来说影响要小, 因此取大的 b 值可以改善计算结果。