计算物理 homework12

李明达 PB18020616[1]*

摘要

这是计算物理第 12 次作业，作业题目是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。

关键词

座逾渗、重整化群

[1] 中国科学技术大学物理学院 * 作者: dslmd@mail.ustc.edu.cn

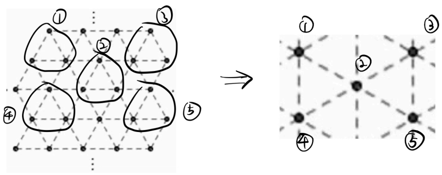

图 1. 对座逾渗点阵重整化（用 Notability 软件手画）

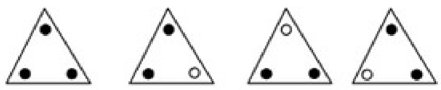

图 2. 四种构型（用 Notability 软件手画）

1. 理论推导

将三个点缩并为一个点，缩放尺度 $b = \sqrt{3}$，如图1所示

假设占据单个点的概率为 p，三个格点中占据两个及以上的概率可以通过图2所示。

可以得出：

$$R(p) = p^3 + 3p^2(1-p) = 3p^2 - 2p^3$$

临界点满足以下方程

$$R(p) = p = p_c$$

可得

$$p_c = 0.5$$

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，这样才能保持系统在标度变换下是不变的，即关联长度的变换是 $\xi' = \xi/b$，由于在 $p' \sim p_c$ 处，$\xi(p) \propto |p-p_c|^{-\nu}$，所以有

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

而在 p_c 附近做泰勒展开可得

$$p' - p_c = R(p) - R(p_c) = \lambda(p-p_c), \lambda = \frac{dR(p_c)}{dp}$$

对比两个式子可以得到

$$\nu = \frac{lnb}{ln\lambda}$$

在此题中

$$\lambda = 6p(1-p) = \frac{3}{2}$$

$$\nu = \frac{ln\sqrt{3}}{ln(\frac{3}{2})} = 1.355$$

2. 结果对比

与正确值（图3）对比一下，有 $p_{c,theo} = 0.5$ 相符，非常精确。而临界指数的值为 $\nu_{theo} = \frac{4}{3} < \nu = 1.355$，略有不同，但是比较不错的近似。

不过，这种方法总体上当 b 很小时说还是比较不严谨，b 趋于正无穷时才能得到严格解，仍需要考虑的元胞边界效应不可忽略，取相对较大的 b 计算可能才能得到更加精确的值。

3. 总结

在完成本次作业时，我通过简单的实空间重整化的推导，得出了三角形块的精确座逾渗阈值概率，也得到了临界指数的估计值，都与准确结果十分接近，几乎相等。本次实验圆满完成，也说明了重整化群方法的方便和准确。

表1.6.1.3-1 各种点阵下座逾渗与键逾渗的逾渗阈值 p_c

维数	点 阵	座逾渗 p_c	键逾渗 p_c	配位数
2	三角形	0.500000	0.34729	6
2	正方形	0.592746	0.50000	4
2	Kagome	0.6527	0.45	4
2	蜂房形	0.6962	0.65271	3
3	面心立方	0.198	0.119	12
3	体心立方	0.246	0.1803	8
3	简立方	0.3116	0.2488	6
3	金刚石	0.428	0.388	4
3	无规密堆积	0.27(实验值)		
4	简立方	0.197	0.160	8
5	简立方	0.141	0.118	10
6	简立方	0.107	0.094	12

图 3. 讲义 1.6.1.3-1