homework-12

2024 fall

1 问题描述

推导正方格子点阵上键逾渗的重整化群变换表达式 $p' = R(p)$ 求临界点 p_c 与临界指数 ν, 与正确值比较.

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 1: 正确值

2 分析推导

2.1 逾渗过程

键逾渗过程可以看成是某种广义的流体流过一种由许多相互连接的水管组成的介质, 其中有些水管的阀门被随机地关上了. 座逾渗也可用这样一种水管系统类比, 只是现在阀门是放在水管网路的接头处, 而键逾渗的阀门是在管子中间

2.2 重整化

重整化的基本思想就是对体系的长度尺度连续不断地做变换, 将体系元胞尺度由 a 变换成 ba (ba 应小于体系的相关长度 ξ)

一般来说, 重整化后的格子点阵占据几率 $p^{'} = R(p)$ 相异于原格子点阵的占据几率 p . 对于我们特别关心的临界点 p^* , 它必须满足关系式

$$p^* = R(p^*) \tag{1}$$

2.3 临界点 p_c

本题要讨论的是正方形点阵上的键逾渗, 每条键有 6 条相邻的键, 但实际上这个结构与三角形的座逾渗结构十分相似, 三角形每个座有 6 个相邻的座. 为了方便问题的讨论, 可以把问题转化成：讨论三角格子点阵上座逾渗, 如下图所示.

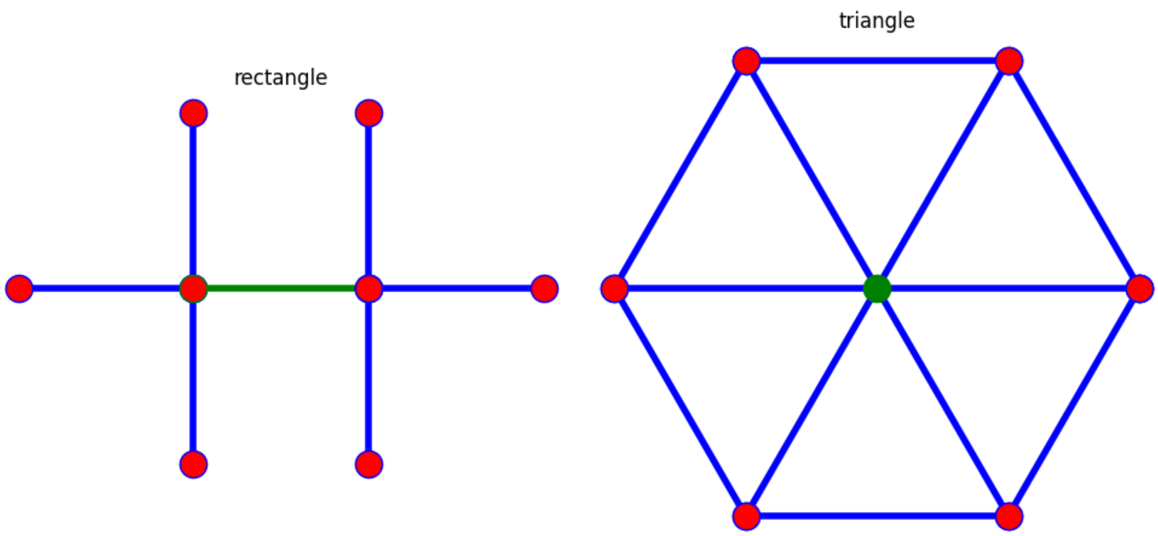

图 2: 正方键逾渗与三角座逾渗等效

如图构造尺度放大因子为 b=$\sqrt{3}$ 的元胞:

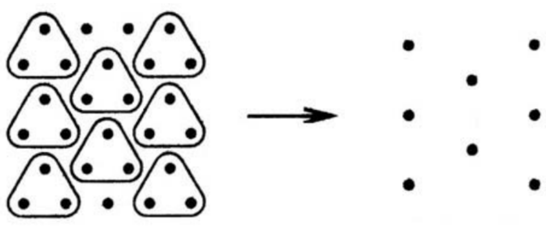

图 3: 重整化

要根据是否形成逾渗通路作为判断标准. 对于 $b = \sqrt{3}$, 形成通路的图形有 4 个, 分别为

三个顶点全部导通 (一种情形), 和两个导通一个不通 (3 种情形) 其变换表达式为：

$$R(p) = p^3 + 3p^2(1-p) \tag{2}$$

解

$$f(p) = p^3 + 3p^2(1-p) - p = 0 \text{可得：} p^* = \frac{1}{2}$$

就是正确值

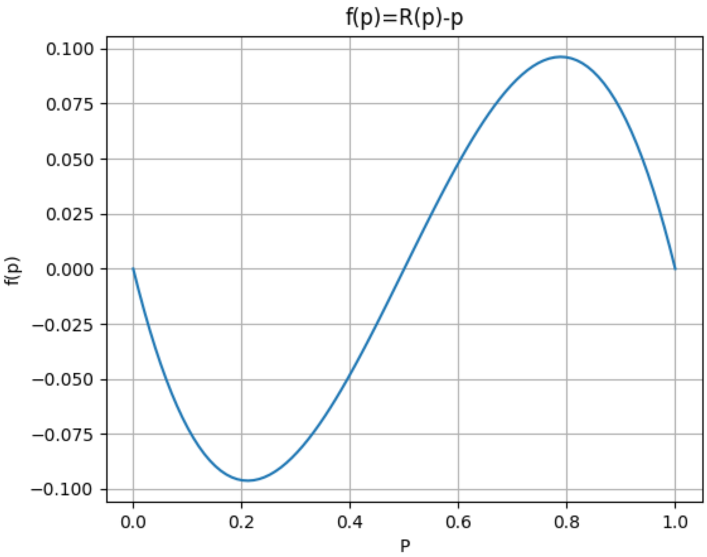

图 4: 解 p_c

2.4 临界指数 ν

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, $\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$, 故得:

$$|p' - p^*|^{-\nu} = b^{-1} |p - p^*|^{-\nu} \tag{3}$$

对 $p^{'} = R(p)$ 泰勒展开：

$$p' - p^* = R(p) - R(p^*) \approx \frac{dR(p)}{dp}|_{p=p^*}(p - p^*) \tag{4}$$

比较上述两式：

$$\nu = \frac{ln(b)}{ln(\frac{dR(p)}{dp}|_{p=p^*})} \tag{5}$$

带入 $R(p)=p^3+3p^2(1-p), p*=\frac{1}{2}$ 计算可得：

$$\nu=\frac{ln(\sqrt{3})}{6p-6p^2}|_{p=p^*=\frac{1}{2}}=\frac{ln(\sqrt{3})}{ln(1.5)}=1.35$$

而正确值为 $\nu=\frac{4}{3}\approx 1.33$

3 结果讨论

可见, 对于 $b=\sqrt{3}$ 的简单计算, 可得到十分接近的近似结果. 但边界效应不可忽略, 这就影响了计算的精度. 这是因为, 这个方法中假定元胞的占据态与其他元胞无关, 这个假定对原始格子点阵是成立的, 但是即使进行一次重整化群变换, 也有可能破坏原来的占据态连接路径, 原来是连接的变成是不连接的, 或不连接的成为连接的, 该边界效应对于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.