计算物理A第十二次作业

王铠泽 PB18020766

1 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 $p' = R(p)$，其中端一端连接的条件是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。

2 实现方法和原理

- 重整化群方法

  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)，相继标度变换的结果产生出一个流向图，空间流向场趋向于若干特殊的不动点，这些点在标度变换下保持不变。

- 三角格子的重整化

  对于二维的三角格子，$b = (N)^{1/d} = \sqrt{3}$。具体尺度变化如下图：

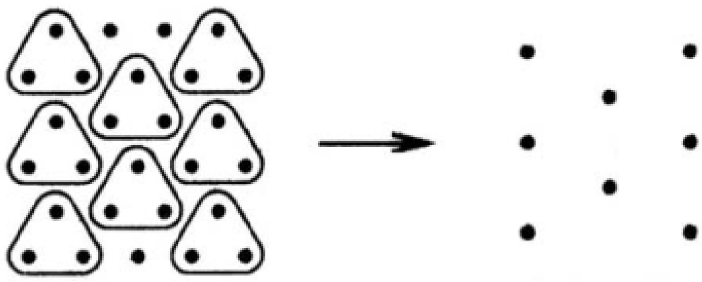

图 1: 重整化尺度变换

根据题目描述，某个重整化后的个点导通对应的条件为至少两个原格点被占据，如下图的四种情况：

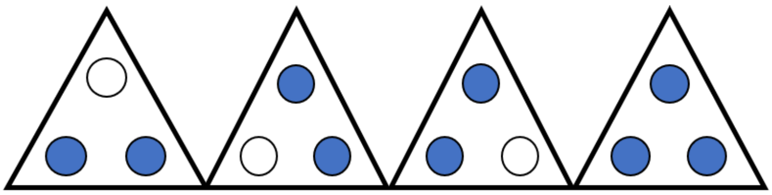

图 2: 导通条件(蓝色填充表示被占据)

- 临界点p_c计算

  由上面导通条件，可以得到重整化后每一个格点导通的概率为：

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

临界点(不动点)p_c满足：

$$p_c = -2p_c^3 + 3p_c^2$$

求解这个方程，得到:

$$p_c = 0.5, p_0 = 0, p_1 = 1$$

0和1是平凡解，我们所关注的是$p_c = 0.5$，这才是临界点。

- 临界指数ν计算

  重整化下的格子为了保持标度律不变，应当选择重整化后的关联长度$\xi' = \frac{\xi}{b}$。在接近p_c时，有$\xi(p) = |p - p_c|^{-\nu}$。所以：

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

  而在p_c附近，有：

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

  其中$\lambda = \frac{dR(p)}{dp}|_{p=p_c}$

$$\Rightarrow |p' - p_c|^{-\nu} = \lambda^{-\nu}|p - p_c|^{-\nu}$$

$$\Rightarrow b = \lambda^{\nu}$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{ln(b)}{ln(\lambda)}$$

  带入上面计算的数据$p_c = 0.5$，可以得到：

$$\nu = \frac{ln\sqrt{3}}{ln(\frac{3}{2})} \approx 1.354755646$$

  最后，将重整化计算得到的临界值和正确值进行比较：

图1.6.1.3-3 四种二维点阵的构型和配位数为3的 Bethe 点阵。

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: 正确值表

可见p_c的座逾渗准确值为0.5，和我们用重整化的方法做出来的完全一致。

3 总结

- 粗粒化近似，重整化群这一套方法是物理中重要的抓住本质的思想。对于相变理论，重整化往往能很好地计算出临界指数。本次作业就算一次很好的验证。
- 本次没有数值模拟环节，缺少对准确值的计算验证。等时间充裕，不失为一个很好的计算物理编程练习。