

计算物理A作业12

吕邀 PB19030789

1.作业题目

推导正方形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 和临界指数 ν ，与正确值相比较。

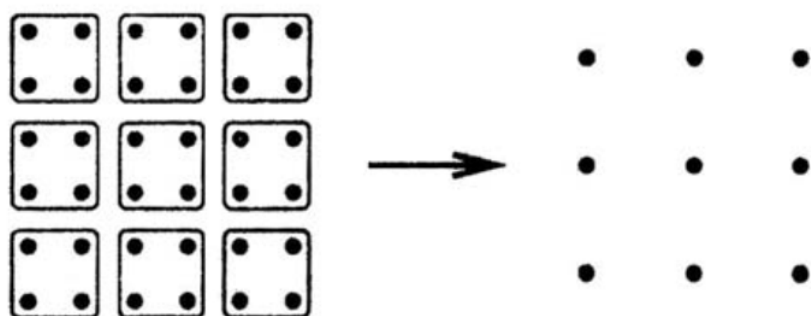
2.结果推导

2.1 重整化群方法

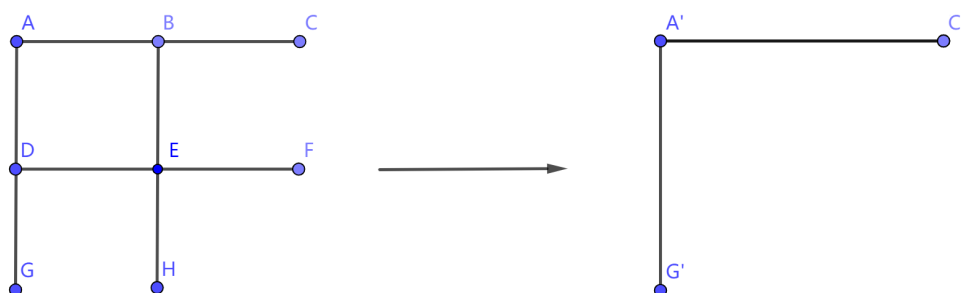
重整化的基本思想就是对体系的长度尺度连续不断地做变换，将体系元胞尺度由 a 变换成 ba (ba 应小于体系的相关长度 ξ)，相继标度变换的结果产生出一个流向图，空间流向场趋向于若干特殊的不动点，这些点在标度变换下保持不变。

2.2 正方形格子的重整化

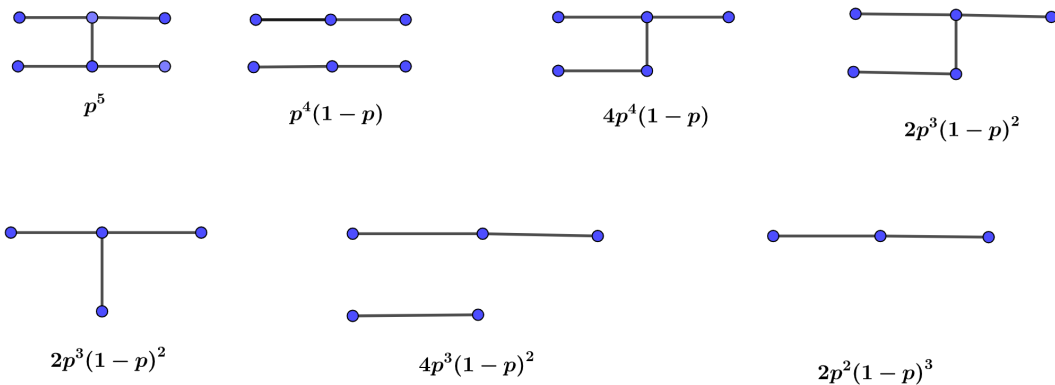
对于二维的正方形格子， $b = N^{1/d} = 2$ 。



重整化群变化的基本思路是：



对于键逾渗，重整化之后各个格点导通的条件如下图所示



则

$$\begin{aligned}
 p' &= R(p) \\
 &= p^5 + p^4(1-p)^2 + 4p^4(1-p) + 2p^3(1-p)^2 + 2p^3(1-p)^2 + 4p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3 \\
 &= p^5 + 5p^4(1-p) + 8p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3
 \end{aligned}$$

临界点 p_c 满足

$$p_c = p_c^5 + 5p_c^4(1-p_c) + 8p_c^3(1-p_c)^2 + 2p_c^2(1-p_c)^3$$

解得

$$p_c = 0, p_c = 1, p_c = 0.5, p_c = -0.618034, p_c = 1.61803$$

其中只有 $p_c = 0.5$ 是符合实际的非凡解。这正是正方形格子键逾渗的临界点，其数值与下表里的模拟值完全一致。

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

2.3 临界指数 ν

关联长度的变换 $\xi' = \xi/b$, 由于在 $p \sim p_c$ 处, $\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$, 故有

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

将 $p^* = R(p^*)$ 在 p^* 附近作Taylor展开, 取一阶近似有

$$p' - p^* = R(p) - R(p^*) \approx \lambda(p - p^*)$$

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

则

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

所以

$$\begin{aligned} b &= \lambda^\nu \\ \nu &= \frac{\ln b}{\ln \lambda} \end{aligned}$$

在本题中 $\lambda = \left.\frac{dR(p)}{dp}\right|_{p=p_c} = 1.625$

故 $\nu = \frac{\ln 2}{\ln 1.625} = 1.428$

计算结果与准确值 $\frac{4}{3}$ 很接近。

模型	物理量	函数	临界指数	$d = 2$	$d = 3$	$d \geq 6$
逾渗模型	逾渗概率	$P_\infty(p) \sim (p - p_c)^\beta$	β	5/36	0.4	1
	集团平均大小	$S(p) \sim p - p_c ^{-\gamma}$	γ	43/18	1.8	1
	平均跨越长度	$\xi(p) \sim p - p_c ^{-\nu}$	ν	4/3	0.9	1/2
	电导率	$\sigma(p) \sim (p - p_c)^t$	t	1.1	1.65	3

3.总结

本题用二维正方形格子的键逾渗模型就准确地算出了临界点的数值, 说明这一模型是比较特殊的。

临界指数 ν 的计算值与理论值也很接近, 误差应该与所取元胞的边界效应有关。当 b 增大时计算精度应该可以提高。