计算物理作业十二

于浩然 PB19020634 2021.11.30

1 作业题目

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 (表 1.6.1.3-1) 相比较.

2 方法简介

2.1 逾渗阈值

逾渗 (percolation) 是一种用于描述流体在无序介质中作随机扩展和流动的模型,可以用来阐明相变和临界现象的一些重要物理概念.

我们研究逾渗采用最基础的形式:在呈现某种几何构型的点阵上进行逾渗.一个点阵由点 (键之间的交点) 和键 (点之间的连线) 组成,点阵上的逾渗过程有两种类型:座 (site) 逾渗和键 (bond) 逾渗.在这里我们仅说明键逾渗:每条键是连通的或非连通的,连通的概率为 p,非连通的概率为 1-p.

当 p = 0 时,没有通路连通;随着 p 增大,总会达到一个临界浓度 p_c ,当 $p > p_c$ 时总存在跨越集团 (从顶到底或从左到右), p_c 即为所谓逾渗阈值.

2.2 临界指数

首先定义集团的平均跨越长度 ξ . 采用最简单的方法,将集团中的两条键的中心的最大间距取作 ξ , 即

$$\xi = \langle \max\{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|\}_{(i,j) \in cluster}\rangle \tag{1}$$

对于跨越长度 $\xi(p)$, 当 $p < p_c$ 时,它是 p 的增函数;当 $p > p_c$ 时,它趋于系统的尺度 ∞ (对于排除了无穷大集团的定义式,当 $p > p_c$ 时,它是 p 的减函数),因此用幂指数 ν 来刻画 ξ 在临界区域的发散性:

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu} \tag{2}$$

我们真正关心的是 $p < p_c$ 时的指数.

2.3 实空间重整化群

实空间重整化群是一种忽略细节从而减少自由度、简化物理问题的方法. 将点阵分为一个个尺度放大因子为 b 的元胞,考虑单个元胞能够连通的几率为 p' ,则有重整化群变换表达式:

$$p' = R(p, b) \tag{3}$$

一般来说,重整化后的点阵占据几率 p' 与原格子点阵占据几率 p 不同. 经过不断地变换,结果要么趋向于完全不占据的不动点 p=0,要么趋向于完全占据的不动点 p=1. 除去上面两个平凡的不动点之外,存在一个非平凡的不动点即 $p^*=p_c$,它应满足方程

$$p^* = R(p^*) \tag{4}$$

为了计算临界指数,考虑重整化格子点阵中所有长度量应比原来缩小 b 倍,以保证系统在标度变换下不变,即关联长度 $\xi' = \xi/b$. 由上一小节中 (2) 式,有

$$|p' - p^{\star}|^{-\nu} = b^{-1}|p - p^{\star}|^{-\nu} \tag{5}$$

取一阶近似

$$p' - p^* = \frac{\mathrm{d}R(p^*)}{\mathrm{d}p} \tag{6}$$

上式两端取 ν 次幂

$$|p' - p^{\star}|^{\nu} = \left| \frac{\mathrm{d}R(p^{\star})}{\mathrm{d}p} \right|^{\nu} \tag{7}$$

与(5)式比较,取对数可得

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \frac{\mathrm{d}R(p^*)}{\mathrm{d}p}} \tag{8}$$

即所求临界指数.

3 推导过程

首先推导正方格子上键逾渗的重整化群变换表达式.

由于研究逾渗时关心的是临界点附近从点阵的一侧到另一侧存在连接的通路,只需考虑单个元胞能否实现从一端到另一端的连通. 与座逾渗所考虑的正方形元胞不同,研究键逾渗时我们考虑"工"形的元胞. 每个元胞形成一个方向为从左到右的"巨键 (super bonds)",每个"巨键"只有连通和不连通两种状态,展示如下图.

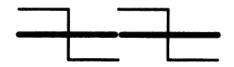


图 1: "工"形元胞重整化为一个"巨键"

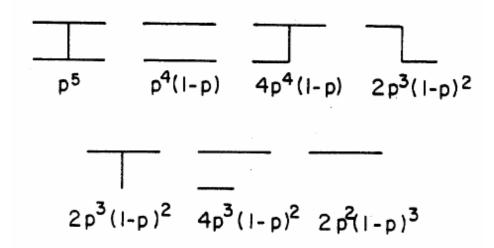


图 2: 元胞左右连通的情形与相应概率

考虑所有能够使元胞从左到右连通的情形,以及其概率如图二(上式中考虑了同一种元胞形式的各种对称形式,体现为系数). 重整化群变换即为一个"巨键"连通的概率,亦即上面的概率相加,得

$$p' = R(p)$$

$$= p^{5} + P^{4}(1-p) + 4p^{4}(1-p) + 2p^{3}(1-p)^{2} + 2p^{3}(1-p)^{2} + 4p^{3}(1-p)^{2} + 2p^{2}(1-p)^{3}$$

$$= 2p^{5} - 5p^{4} + 2p^{3} + 2p^{2}$$
(9)

临界点 p* 满足不动点方程

$$R(p^*) = 2p^{*5} - 5p^{*4} + 2p^{*3} + 2p^{*2} = p^*$$
(10)

有三个解

$$p^* = \begin{cases} 0\\1\\0.5 \end{cases} \tag{11}$$

 $p^* = 0.1$ 均为平凡解,非平凡的不动点 $p^* = 0.5$ 即为临界点 p_c .

对 (9) 式求导:

$$\frac{\mathrm{d}p'}{\mathrm{d}p} = 10p^4 - 20p^3 + 6p^2 + 4p \tag{12}$$

由图 1 所示重整化群机制易得尺度放大因子 b=2, 由 (8) 式可得临界指数:

$$\nu = \frac{\ln 2}{\ln \frac{dp'}{dp}\Big|_{p=0.5}} = \frac{\ln 2}{\ln \frac{13}{8}} \approx 1.4277 \tag{13}$$

4 结果分析与结论

查阅表 1.6.1.3-1 可得,正方格子点阵上键逾渗的标准值为 $p_c=0.5, \nu=4/3\approx 1.6667$. 可见,推导的临界点与标准值完全符合,临界指数有一定偏差但已经达到了较好的精度.

通过做本次作业,对于研究逾渗和实空间重整化群的方法有了一定的认识.