渝渗理论

2022年2月18日 星期五　　下午8:12

参考资料：Stauffer Phys. Rep. 54:1(1979)

Critical Phenomen...

2021年的专著(贡献者包括 D. Stauffer, A. Coniglio, R. Ziff等)：

M. Sahimi and A. Hunt (eds.) (2021), Complex Media and Percolation Theory, Springer.

1. 渝渗是连续相变

△ 考虑一套网格，每个格子要么是空的，要么被占据。记 p 为格子被占据的概率，并设每个格子的 p 都相等 这是Stauffer的引入方式，也可视 p 为被占据格子数与总格子数之比。在某 p 值下，我们随机地选择哪些格子被占据，给出一种构象。

△ 团簇： a group of occupied sites connected by nearest-neighbor distances.

△ 记 n_s 为 s-团簇(含 s 个格子的团簇)的个数与总格子数之比，n_s 是 p 的函数 在这里 n_s 好像是系综平均，即在 p 取某值下所有可能构象的平均？还是说只考虑偶然的某构象？在此没有能量概念，只要满足 p 取值，一切构象都等概率？ n_s 满足 $\sum_s n_s = n_c$，n_c 是所有团簇占据格子数与总格子数之比。

△ 考虑无限大网格，随着 p 值增加 (p 值是浓度，就算网格无穷大也良好定义)，到某值时会有一个无限大团簇。已知这种“无限大团簇”总是只有一个的。(Shante and Kirkpatrick(1971) Adv. Phys. 20:325) 这个无限大网络称渝渗网络(percolating network)

△ 无限大团簇出现时的 p 是临界点 p_c，当 $p<p_c$，无无限大团簇，当 $p>p_c$，有无限大团簇，$p=p_c$ 处发生了一个相变，称渝渗转变。

△ 渝渗转变是一种连续相变。记 P_∞ 为属于无限团簇的格子数与总格子数之比(又可作为某已占格子属于无限大团簇的概率，这种把概率等同于浓度的做法默认了遍历性)，则 P_∞ 是渝渗转变的序参量。因为

$$P_\infty \begin{cases} =0, & p<p_c \\ >0, & p\geq p_c \end{cases}$$

$P_\infty(p)$ 是连续函数，故为连续相变。

2. 渝渗转变的临界指数

△ 设体系的某性质 f 作为 $\varepsilon \equiv (p-p_c)/p_c$ 的函数 $f=f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon\to 0$ ($p\to p_c$) 的渐近行为

$$f(\varepsilon)=A\varepsilon^k\underbrace{(1+B\varepsilon^{k_1}+\cdots)}_{\text{其实是某一般函数 }\tilde f(\varepsilon)},\quad k \overset{\text{def}}{=} \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\ln|f(\varepsilon)|}{\ln|\varepsilon|}$$

称 f 的临界指数(critical exponent)

△ 一般地，我们不假定 $\varepsilon\to 0^+$ 和 $\varepsilon\to 0^-$ 的临界指数(记为 k', k)相等，它们仅需满足一系列不等式(见相变基础知识)，但标度律假设下，$\varepsilon\to 0^+$ 和 $\varepsilon\to 0^-$ 的临界指数相等。→关于这个不等式→等式的问题要看相变的书

△ k 值可能是非有理实数，f 可能是非解析函数。例如
这是相变常见特点

f 非解析的 ε 是相边界

$$f(\varepsilon)=A_0+A_1\varepsilon+A_2\varepsilon^{1.355}+A_3\varepsilon^{1.855}+A_4\varepsilon^2+\cdots$$

则 $f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon=0$ 邻近是光滑的但是非解析的，奇异项是 $A_2\varepsilon^{1.355}$ 和 $A_3\varepsilon^{1.855}$，$A_0+A_1\varepsilon+A_4\varepsilon^2$ 则为解析“背景”。 这里的意思是说 $f(\varepsilon)$ 其实不是完全纯幂律 $f(\varepsilon)\sim\varepsilon^\lambda$，而是一个调和函数 $f(\varepsilon)=\varepsilon^\lambda\tilde f(\varepsilon)$。其中 $\tilde f(\varepsilon)$ 可展开成 $(1+\cdots$ 但我们经常简写成 “$f(\varepsilon)\sim\varepsilon^\lambda$, $\varepsilon\to 0$”

△ 具体地：

记 $[\sum_s s^k n_s]_{sing}$ 为团簇的 k-阶矩对 ε 展开的首个奇异项。$[\sum_s s^k n_s]_{sing}\propto|\varepsilon|^{exponent}$

k	物理量	临界指数
0	n_c	$2-\alpha$
1	P_∞	β
2	团簇平均质量	$-\gamma$

n_c 在 $\varepsilon=0$ 处是连续的，只有其3次导数发散，即 $n_c\propto A+B\varepsilon+C\varepsilon^2+D\varepsilon^{2-\alpha}$

这里跟液体或自旋的对比不太直接。

另，记 ξ 为相关长度，

$$\xi^2\equiv\frac{\sum_s s^2 n_s R_s^2}{\sum_s s^2 n_s}$$

其中 R_s 是 s 团簇的半径。常假设满足分形关系 $s\sim R_s^{d_f}$

这里的 ξ 就是团簇的平均半径

其临界指数是 ν，即 $\xi\propto\varepsilon^{-\nu}$, $\varepsilon\to 0$

记“典型团簇质量” S_ξ 为半径等于相关长度的团簇大小，或

$$S_\xi\equiv\frac{\sum_s s^3 n_s}{\sum_s s^2 n_s},$$

其临界指数是 $-1/\sigma$，即 $S_\xi\propto\varepsilon^{-1/\sigma}$, $\varepsilon\to 0$

总之我们引入了 $\alpha,\beta,\gamma,\nu,\sigma$。

3. 体系在临界点处的性质(分形假设)

所以这部分应该放在 $S(q)$ 的部分。

△ 如前面提到，我们常假设团簇取统一个分形维数，$R_s^{d_f}\propto s$，我们可以考虑 d_f 随 p 变化，在这种情况下我们以下只考虑 $p=p_c$ 时的团簇分形维数，仍记为 d_f。

△ 网格所在空间的维数记为 d。

△ d_f 与二点相关函数 $g(r)$ 直接关联。$g(r)$ 是相隔 r 的两已占格子同属一个团簇的概率，它随 r 的衰减(在 $\varepsilon=0$ 时)满足(由于分形假设)

其中 $\xi\propto\varepsilon^{-\nu}$，即

这里的知识包括：$g(r)$ 到 $S(q)$ 到散射光强 $I(q)$ 的关联(最后

△ d_f 与二点相关函数 $g(r)$ 直接关联。$g(r)$ 是相隔 r 的两已占格子同属一个团簇的概率，它随 r 的衰减（在 $\varepsilon=0$ 时）满足（由于分形假设）

$$g(r) \propto r^{-(d-d_f)}$$

$$g(r,\varepsilon) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}} F_G\left(r\varepsilon^{\nu}\right)$$ 其中 $\xi \propto \varepsilon^{-\nu}$，即 $F_G(r\xi^{-1})$

常引入指数 η，满足 $g(r) \propto r^{2-d-\eta}$ 故 $\eta \equiv 2-d_f$

$d-2+\eta$ 这个是相关函数问题，η 是 Fisher 在 OZ 的基础上加的

这里的知识包括：$g(r)$ 到 $S(q)$ 到散射光强 $I(q)$ 的关联（最后这个只有依赖假设才具体化。比如 Ornstein-Zernike 理论，给出 $G(r) \sim R^{-2}(e^{-\kappa r}/r)$，$\kappa \equiv \xi^{-1}$，correlation length.

Fisher 的搞法就是 scaling hypothesis 了

△在后续讨论还常考虑在团簇上的无规行走轨迹的分形维数 d_w。以及这种无规行走中，经历的不同格子数与步数 N 的标度律指数 d_s（经历的不同格子数 $\propto N^{d_s}$），称为谱维数（spectral dimension）。

4. 标度律假设

△在相变基础中，标度律假设下临界指数之间持有特定的等式关系，在教科书中是基于 Ising 模型的自由能的广义调和假设推导的。在渝渗问题中标度律假设：

在渝渗临界点邻近，体系的性质主要由典型团簇：S_ξ-团簇所决定（因为这些团簇在 p_c 附近处是很大的，否则它们的尺寸，即 ξ，不会发散。）

典型团簇的概念在 Stauffer 原文是定义松散的，使得该作者还要假设不同具体定义的 S_ξ 均以 $S_\xi \propto \varepsilon^{-1/\sigma}$ 发散。作者的意图是，S_ξ 是 $\Sigma_s S^k n_s$ 的奇异项的主要贡献而非 $\Sigma_s S^k n_s$ 的主要贡献，矩阶 k 不重要因为假设不同矩阶上述定义的 S_ξ 均按 $S_\xi \propto \varepsilon^{-1/\sigma}$ 发展。

△按此假设，体系性质均应只依赖比值 S/S_ξ。然而直接写"$n_s(p) = f(S/S_\xi)$"过于简单，这时当 $p=p_c$ $S_\xi \to \infty$，n_s 就成了常数，这不符合渝渗过程。我们更倾向于令比值 $n(s)/n(S_\xi)$ 仅依赖 S/S_ξ，得到下式

$$n_s / n_{S_\xi} = \mathcal{F}(S/S_\xi)$$

△为了实用性改考虑比值 $n_s(p)/n_s(p_c)$，并把上述假设改写为：

假设比值 $V(p) \equiv n_s(p)/n_s(p_c)$ 以及其他团簇性质的类似比值都只依赖比值 S/S_ξ：

$$V(p) = \mathcal{F}(S/S_\xi)$$

这就是渝渗理论中的标度律假设。按此假设，不同 ε 的 n_s 分布曲线可通过重整化横坐标为 S/S_ξ 纵坐标为 $n_s/n_s(p_c)$ 而得到一条主曲线 $\mathcal{F}(S/S_\xi)$

△进一步，$n_s(p_c)$ 满足 $n_s \propto S^{-\tau}$，$p=p_c$。这有两个支持，一是蒙特卡罗模拟结果，二是考虑到任何更复杂的分布 $n_s \propto S^{-\tau}\exp(-S/S_0)$ 都会给出截断团簇 S_0，作为典型团簇，不满足典型团簇发散的模型设定。因此有

$$n_s(p) \propto \underbrace{S^{-\tau}}_{n_s(p_c)} \mathcal{F}(S/S_\xi)$$

△由 $S_\xi \propto \varepsilon^{-1/\sigma}$，$S/S_\xi \propto S\varepsilon^{1/\sigma} \propto (S^\sigma \varepsilon)^{1/\sigma}$，我们可将 $\mathcal{F}$ 换成另一个函数 f 使得

$$n_s(p) \propto S^{-\tau} f(\varepsilon S^\sigma)$$，其中 $f(x)$ 满足 $f(0)=1$

5. 临界指数之间的关系

△基于标度律假设，指数 τ 和 σ 与 $\alpha, \beta, \gamma \cdots$ 的关系还需要多推导。$\alpha, \beta, \gamma \cdots$ 定义中的

$$\Sigma_s S^k n_s$$

要联系到 $\Sigma_{S_\xi} S_\xi^k n_{S_\xi}$，才能完成这个任务。这时可用 $n_{S_\xi} \propto S^{-\tau} f(\text{const}) \propto S^{-\tau}$

$$\Sigma_s S^k n_s \longrightarrow \int_0^\infty S^k n(s)\, dS = q_0 \int_0^\infty S^{k-\tau} f(\varepsilon S^\sigma)\, ds$$
$$= \frac{q_0}{\sigma} \int_0^{\pm\infty} S^{1+k-\tau} z^{-1} f(z)\, dz$$

上式是令 $z=\varepsilon S^\sigma$，$dz = \varepsilon\sigma S^{\sigma-1} ds$，$ds = \varepsilon^{-1}\sigma^{-1}S^{1-\sigma}dz = s z^{-1}\sigma^{-1} dz$ 得到的。当 $p<p_c$ 时 z 积分从 $0 \sim -\infty$，$p>p_c$ 时积分从 $0 \sim +\infty$。

这时我们用

$$|\varepsilon S^\sigma|^{(1+k-\tau)/\sigma} = |\varepsilon|^{(1+k-\tau)/\sigma} S^{1+k-\tau}$$

$$\text{原式} = \frac{q_0}{\sigma} |\varepsilon|^{-(1+k-\tau)/\sigma} \int |z|^{(1+k-\tau)/\sigma} z^{-1} f(z)\, dz$$

$$\propto |\varepsilon|^{(\tau-1-k)/\sigma}$$

（见 D.Stauffer 原文有更多讨论）。

△ $k=1, 2, 3, \cdots$ 对应 $\alpha, \beta, \gamma, \cdots$，故有

$$\begin{cases} 2-\alpha = (\tau-1)/\sigma \\ \beta = (\tau-2)/\sigma \\ -\gamma = (\tau-3)/\sigma \end{cases} \quad , p=p_c$$

△ 关于渝渗模型中的指数δ，在渝渗图像中没有直观意义。在伊辛模型中除了温度T还有外场H，在渝渗模型中假想某外场h，则

$$\sum_s s\, n_s(p_c)\, e^{-hs} \propto h^{1/\delta}, \quad p=p_c \quad h\to 0$$，在标度律假设下 $1/\delta = \tau-2$，$p=p_c$，
（更多讨论和参考文献见Stauffer原文。）

△ $\alpha,\beta,\gamma,\delta$的式子可两两消去$\tau$，或两两消去$\sigma$得到更多等式。部分形式如下，

$$2-\alpha = 2\beta+\gamma = \beta(\delta+1) = \gamma\frac{\delta+1}{\delta-1}, \quad \beta\delta = 1/\sigma = \frac{1}{\beta+\gamma},$$

6. 强标度律假设

△ 由标度律假设的精神，团簇半径与相关长度的比值R_s/ξ在p_c临近应只依赖比值s/s_ξ。故可写

$$R_s = \xi\,\tilde{R}(z), \quad z=\epsilon s^\sigma$$，这仍是标度律假设.

由 $\xi \propto \epsilon^{-\nu} \propto s_\xi^{\sigma\nu}$，上式改写为

$$R_s = s_\xi^{\sigma\nu}\,\tilde{R}_1(z)$$

△为了考虑$\tilde{R}(z)$或$\tilde{R}_1(z)$的形式，需要一个新的假设：

在$p>p_c$但接近p_c时，一个很大但非无限大的团簇密度与无限大团簇很接近，因此这个很大的有限团簇密度可以用P_∞来计算，即pP_∞（视s为质量）

△在此假设下，记该团簇体积为V_s，$s = V_s\, p P_\infty$，当$p\to p_c$，$P_\infty \propto |\epsilon|^\beta$ 故

$$V_s \propto s|\epsilon|^{-\beta}$$ ⟵ 跟体积相关，就跟维数d相关

又由体积几何意义 $V_s \propto R_s^d$，故必需要有$R_s \propto \epsilon^{-\beta/d} s^{1/d}$，$p>p_c$，s是很大的有限值，

△我们首先注意到，R_s关于s的依赖关系是$R_s \propto s^{1/d}$，若$R_s \propto \xi\tilde{R}(z)$，则这一依赖关系全靠$\tilde{R}(z)$，因为z含s。具体地，一个出现$s^{1/d}$的z指数是$z^{1/(\sigma d)}$（由$z=\epsilon s^\sigma$），故$\tilde{R}(z)$在$p\to p_c^+$时的渐近应有$\tilde{R}(z)\sim z^{1/(\sigma d)}$

△进而，$R_s \propto \xi z^{1/(\sigma d)}$再由$\xi \propto \epsilon^{-\nu}$可得 $R_s \propto \epsilon^{-\nu}\epsilon^{1/(\sigma d)} s^{1/d} \propto \epsilon^{-\nu+1/(\sigma d)} s^{1/d}$，该式与上面得到的$R_s \propto \epsilon^{-\beta/d} s^{1/d}$比较得：$\beta/d = \nu - 1/(\sigma d)$，或

$$d\nu = \beta + 1/\sigma = \beta(\delta+1) = 2-\alpha$$

第一个等号是本节新增假设下才有的，称为强标度（hyperscaling）假设. ⟶ 定义为涉及维数d的标度假设.

△ 根据相变理论的更多研究（见Stauffer原文参考文献），强标度在$d>6$失效，平均场（就是）在$d>6$成立，在$d=6$两者等价。

△ 在$p=p_c$，R_s应是有限值. 故$\tilde{R}_1(z\to 0)\to \text{const}$，$R_s(p_c)\propto s^{\sigma\nu}$，故 $d_f = 1/(\sigma\nu)$