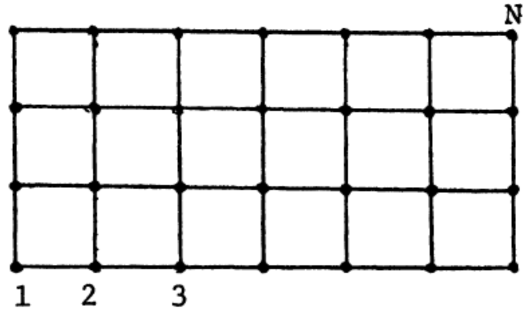
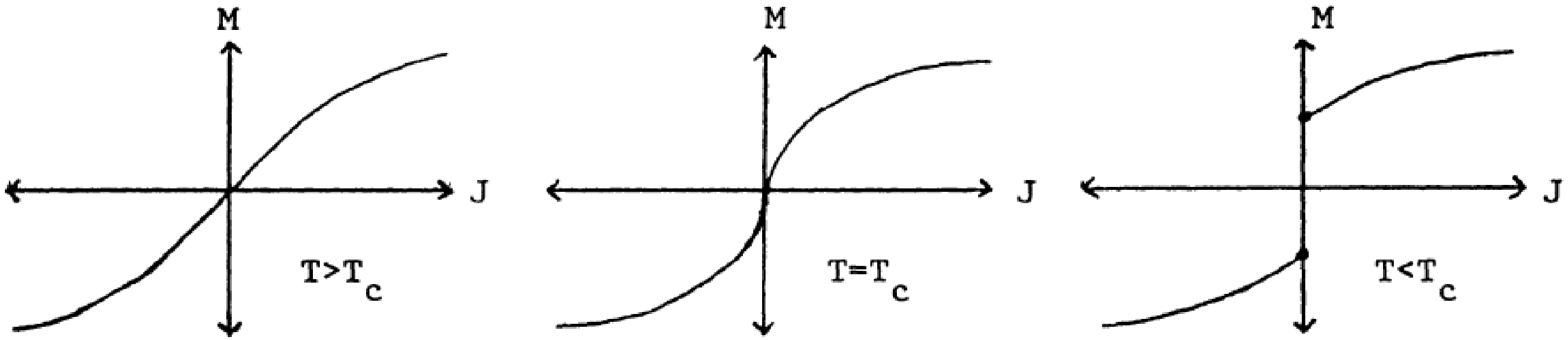
相变问题：

- 经典统计物理关注的相变问题一般是针对具有平移对称性的物理对象，在空间上具有整数维。典型的是**Eden**模型和**Ising**模型。

- **Ising**模型在***d*****=1**时无相变，***d*****=2**和**3**时有有限温度相变。模型哈密顿可以写为：

$$H = H(\sigma) = -\sum_{<i,j>} J\sigma_i\sigma_j - h\sum_{<i>}\sigma_i, \quad \sigma = \pm 1$$





- 在h=0时，如果d=1，T_c=0；如果d=2，T_c满足白银解：

$$For\ d=2:\quad exp(-2K_c)=\sqrt{2}-1,\quad K_c=J/kT_c$$

- 在h=0时，如果d=2，还没有严格解，有人声称T_c满足黄金解：

$$For\ d=3:\quad exp(-2K_c)=\frac{\sqrt{5}-1}{2},\quad K_c=J/kT_c$$

- 在T_c附近，系统热力学量满足幂指数律，且有有限尺度标度：

$$\begin{aligned} \xi(T) &\sim |T-T_c|^{-\nu} \\ M(T) &\sim (T_c-T)^{\beta} \\ C &\sim |T-T_c|^{-\alpha} \\ \chi &\sim |T-T_c|^{-\gamma} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \xi(T) &\sim |T-T_c|^{-\nu} \to L \\ M(T) &\sim (T_c-T)^{\beta} \to L^{-\beta/\nu} \\ C(T) &\sim |T-T_c|^{-\alpha} \to L^{\alpha/\nu} \\ \chi &\sim |T-T_c|^{-\gamma} \to L^{\gamma/\nu} \end{aligned}$$

非线性物理：分形物理

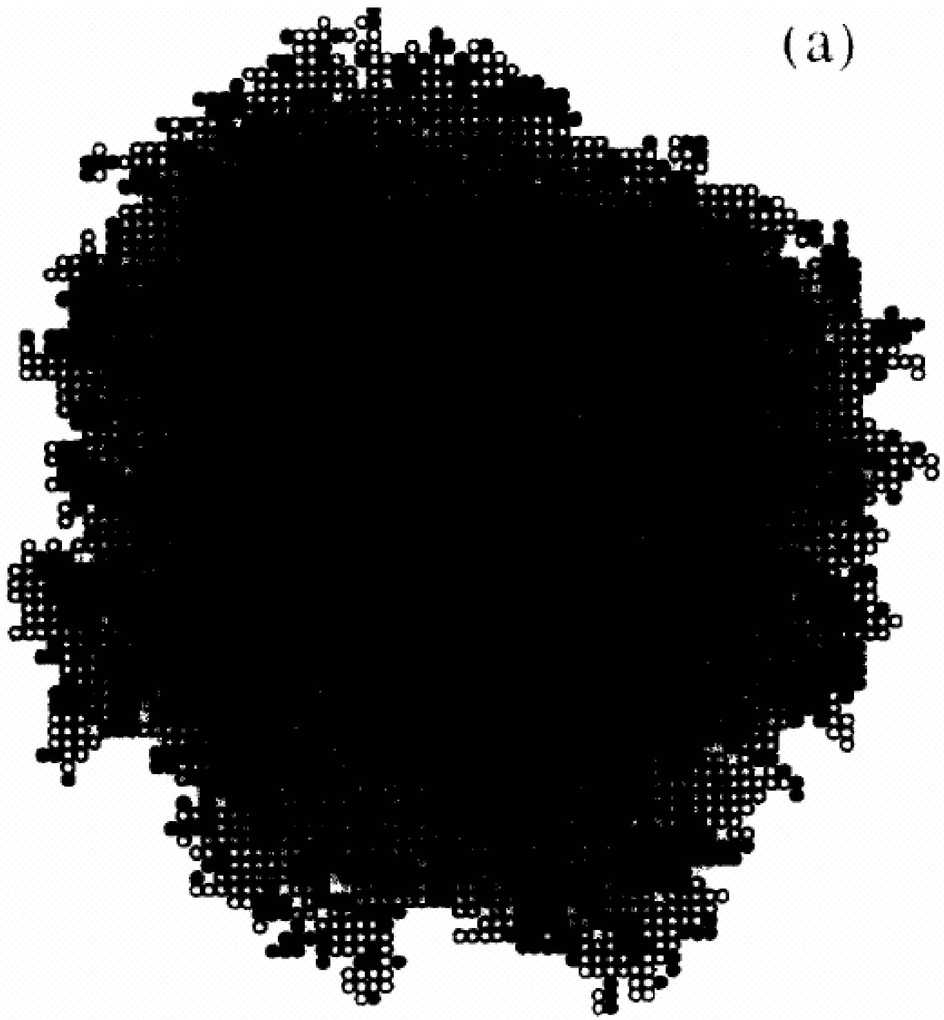
- 这些临界指数对于二级相变都有确定的数值：
- **d=2时：α=0, β=1/8, γ=7/4, δ=15, η=1/4, ν=1；**
- **d=3时：有人猜测α=0, β=3/8, γ=5/4, δ=13/3, η=1/8, ν=2/3**
- 二级相变有所谓如下普适关系：

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad \gamma = \beta(\delta - 1)$$

- 对分形物理来说，当空间维度$d \rightarrow d \pm \varepsilon$时，相变行为如何？
- 当空间本身就是一个确定的分形体(d_f)时，相变行为如何？

Eden模型：

- Eden模型的要点是一个点阵中颗粒随机加在一个已存在颗粒的周边近邻位置上。
- 这种生长是平衡的，产生的团簇cluster形态比较密实，具有不很严格的拓扑形态。
- 右图就是一个在二维正方格点产生的Eden团簇。



所谓的 ε-expansion 物理

- 这一模型很简单，比较有意义的两个问题是：

  (1) 是不是有严格的拓扑关系：分形维D_H=2.0？

  (2) 团簇周边形态或者说几何涨落有多大？与团簇回转半径有什么关系？

$$N(r) \propto R^{D_H}$$

$$\Delta R \propto R^{D_R}$$

- 式中R为团簇以中心为原点定义的半径，ΔR是团簇边缘形状相对于回转半径R的涨落，这里两个R有不同，后一个R是回转半径。

- 后面会证明：在团簇足够大时，D_H~2.0，D_R~0.0。

- 看看一个具有内部自由度的Eden模型，所谓magnetic Eden model (MEM)。D=2时，模型将颗粒分成两类：向上spin和向下spin ($\sigma_i=\pm 1$)，其哈密顿为：

$$\beta E = -\frac{\beta J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - \beta H\sum_i \sigma_i,$$

- 式中$\beta=1/kT$、J是spin之间的交互作用、H是外场，$<i,j>$表示对最近临求和。
- 这个模型事实上就是Ising模型，将其放在一个Eden集团上来研究。

- 当$\beta \cdot J=0$时，上述模型就回到了标准的Eden模型。它的内涵比Eden模型要丰富得多。
- MEM模型在一维情况下有严格解，那是统计物理的任务，我们这里就懒得麻烦了，后面看看基本结论。这里先看看二维情况。
- 该模型二维模拟的基本步骤是：
- 构造一个二维正方点阵，在中心点设置一个颗粒$\sigma=1$。
- 在中心点四周四个最近临位置任选一个，然后假定加上一个$\sigma=1$或者$\sigma=-1$的颗粒，也是随机选择。

非线性物理：分形物理

- 计算$\Delta(\beta E)=(\beta E)_{after}-(\beta E)_{before}$，计算：

$$p=exp[-\Delta(\beta E)]\Rightarrow\begin{cases}p=1 \ \ if \ \ \Delta(\beta E)<0\\ p=p \ \ if \ \ \Delta(\beta E)\geq 0\end{cases}$$

- 这个颗粒是否稳定停留决定于概率p的大小，随机决定。
- 上述过程是**Monte Carlo**方法的基本步骤。
- 上述模拟也可以沿另外一个路径进行：
- 对中心点四周四个最近临位置的每一个都进行上述步骤，即假定加上一个$\sigma=1$或者$\sigma=-1$的颗粒，随机选择。

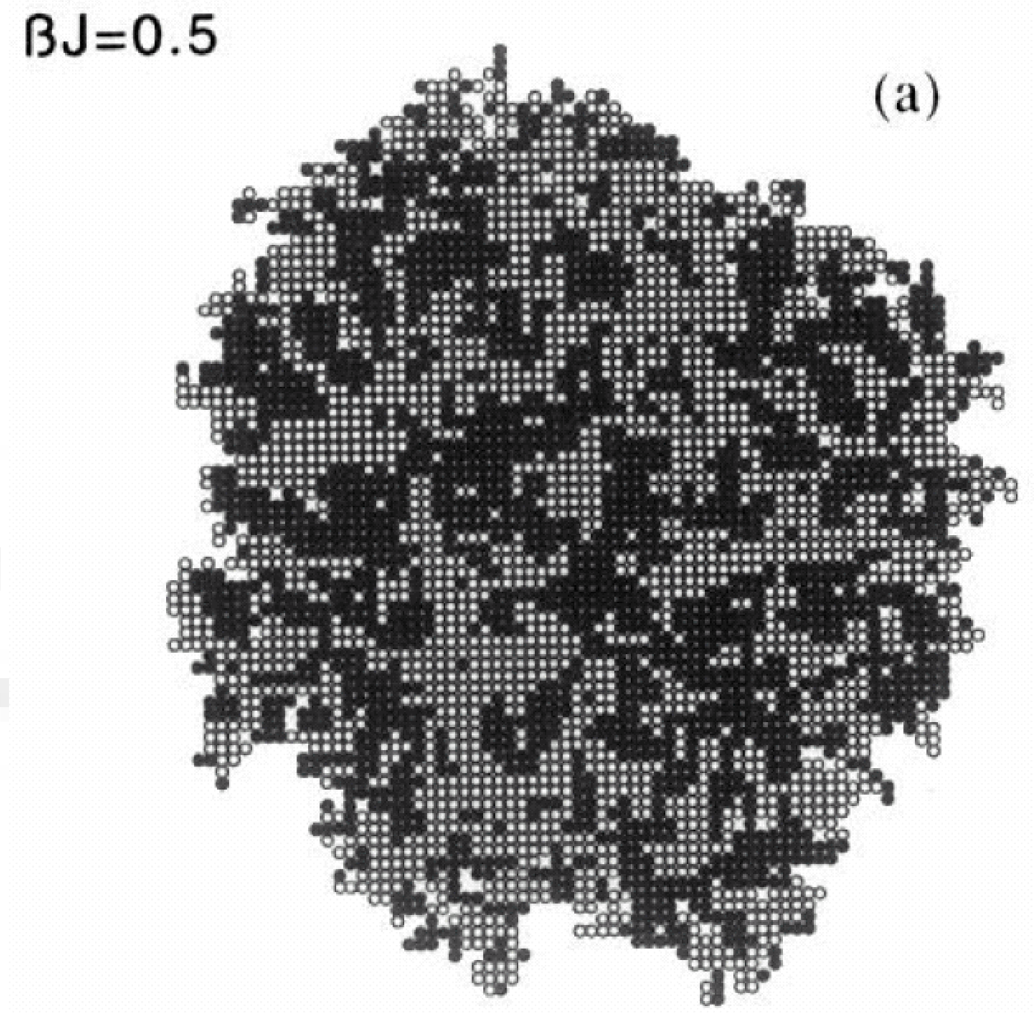
非线性物理：分形物理

$$p_i = \frac{exp\left[-\Delta(\beta E)_i\right]}{\sum_{<i>} exp\left[-\Delta(\beta E)_i\right]} \Rightarrow \{R \in [p_1, p_2, p_3, p_4]$$

- **MEM模型可以应用到磁学之外的很多系统：**
- **(1) spin可以是元素种类X和Y，这样可以应用到二元化学系统。因此spin up和spin down的比例可以外部定义。**
- **(2) 材料中杂质与缺陷与晶格有很强的交互作用，可以研究材料中杂质或者缺陷效应。**
- **(3) Salmonella细菌细胞也呈现两态行为：其中一些基因可以被“开”和“关”。**

非线性物理：分形物理

- (4) 外场项可以表示外磁场、外电场或者化学势、压力等等，只要互作用的形式是一样的就行。
- 我们略去外场项，只是研究双态和交互作用行为。



$$\beta E = -\frac{\beta J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \beta H\sum_i \sigma_i,$$

- 粗略一看，**MEM**在形态上与**Eden**标准模型没有什么不同：密实形态，但是因为内部存在**spin up**和**spin down**，其内部具有新自由度：内部团簇结构。
- ***βJ<0***意味着负的耦合效应，团簇内自旋趋向于反铁磁分布，虽然不是十分严格。
- ***βJ>0***意味着正的耦合效应，团簇内自旋趋向于铁磁分布，是十分严格的，决定于***βJ***的大小。

- 在MEM生长过程中存在着spin之间的竞争，这在Eden模型中是没有的。
- 有意思的问题是什么情况下一种spin会占主导地位而另一种自旋作用变弱或者消失？
- 可以定义体系磁化强度来表征：所有正负spin的代数和，其中<>代表组态平均：

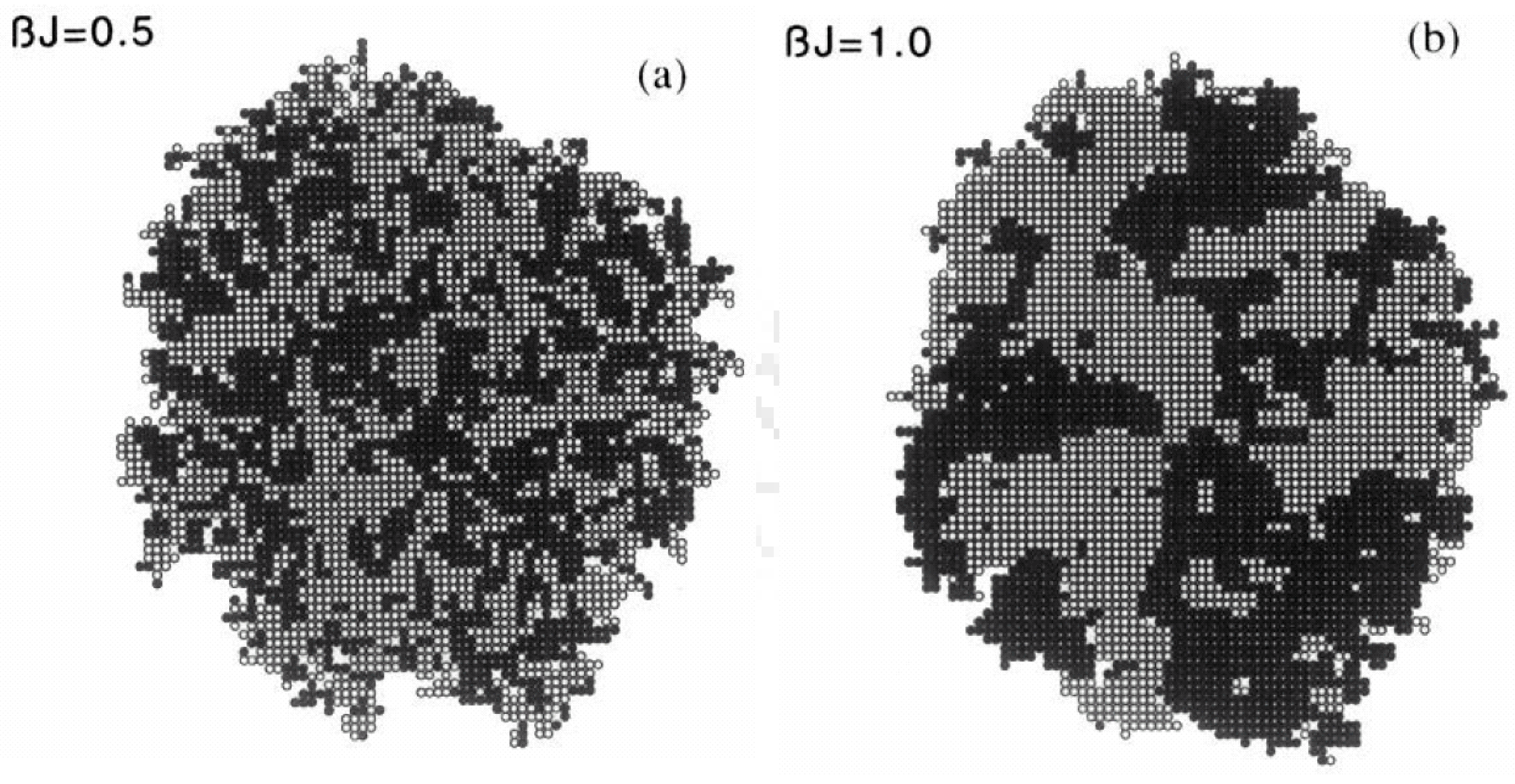
$$M = \left\langle \frac{1}{N} \left| \sum_{<i>} \sigma_i \right| \right\rangle_{\beta J}$$

- 一维MEM模型的严格解见：M. Ausloos, N. Vandewalle, and R. Cloots, Europhys. Lett. 24, 629 (1993).
- 基本结论是存在一个临界$(\beta J)_c$，在$(\beta J)<(\beta J)_c$，体系的$M=0$。
- 在$(\beta J)_c$处，体系发生一个相变，$M>0$。体系的主导spin状态由第一个颗粒的spin来决定。
- 这个$(\beta J)_c$与系统大小N有如下标度关系：

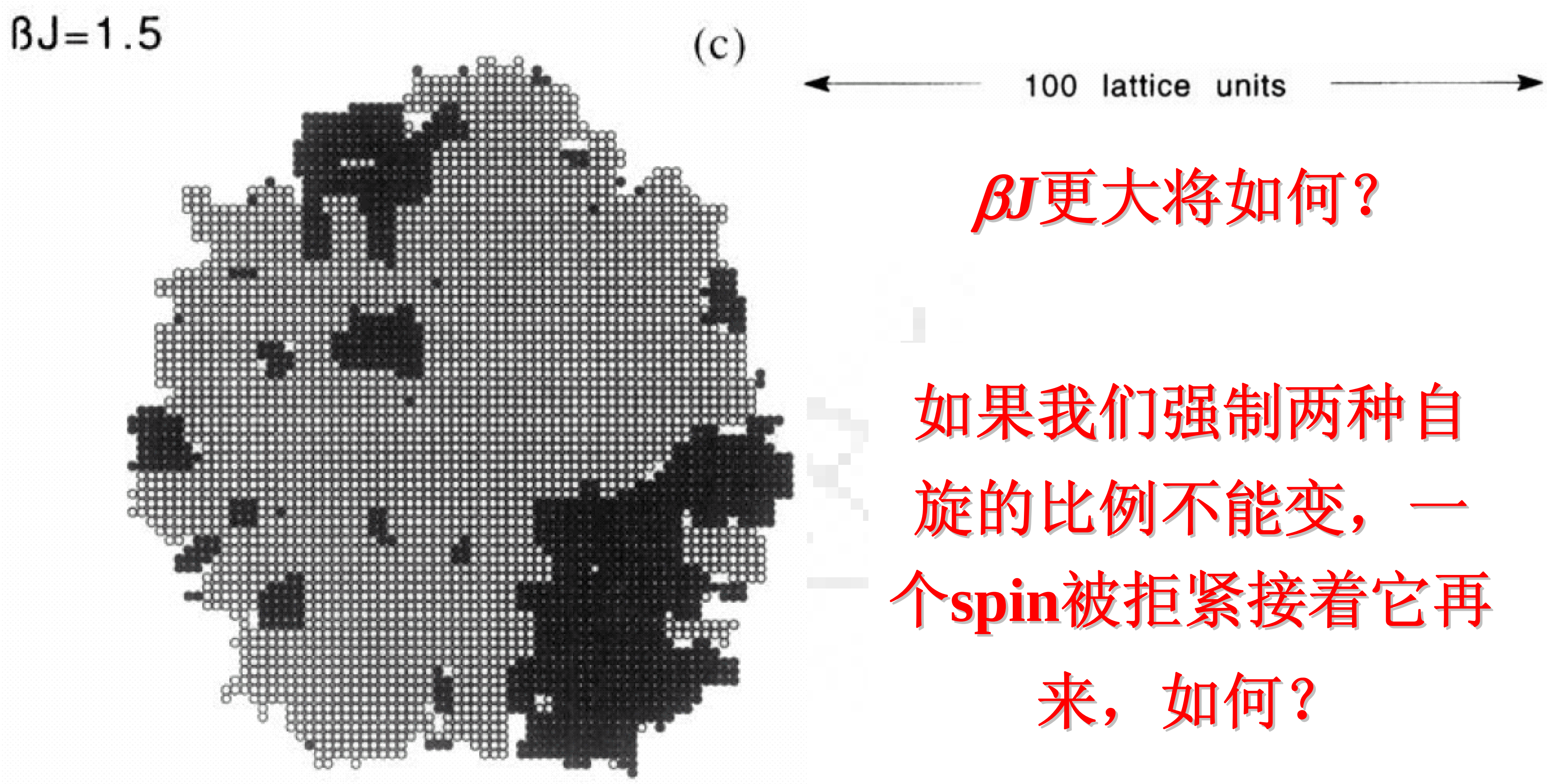
$$(\beta J)_c \approx \ln N$$

- 二维MEM动力学比一位MEM有趣得多！^_^

非线性物理：分形物理



非线性物理：分形物理



***βJ*更大将如何？**

如果我们强制两种自旋的比例不能变，一个spin被拒紧接着它再来，如何？

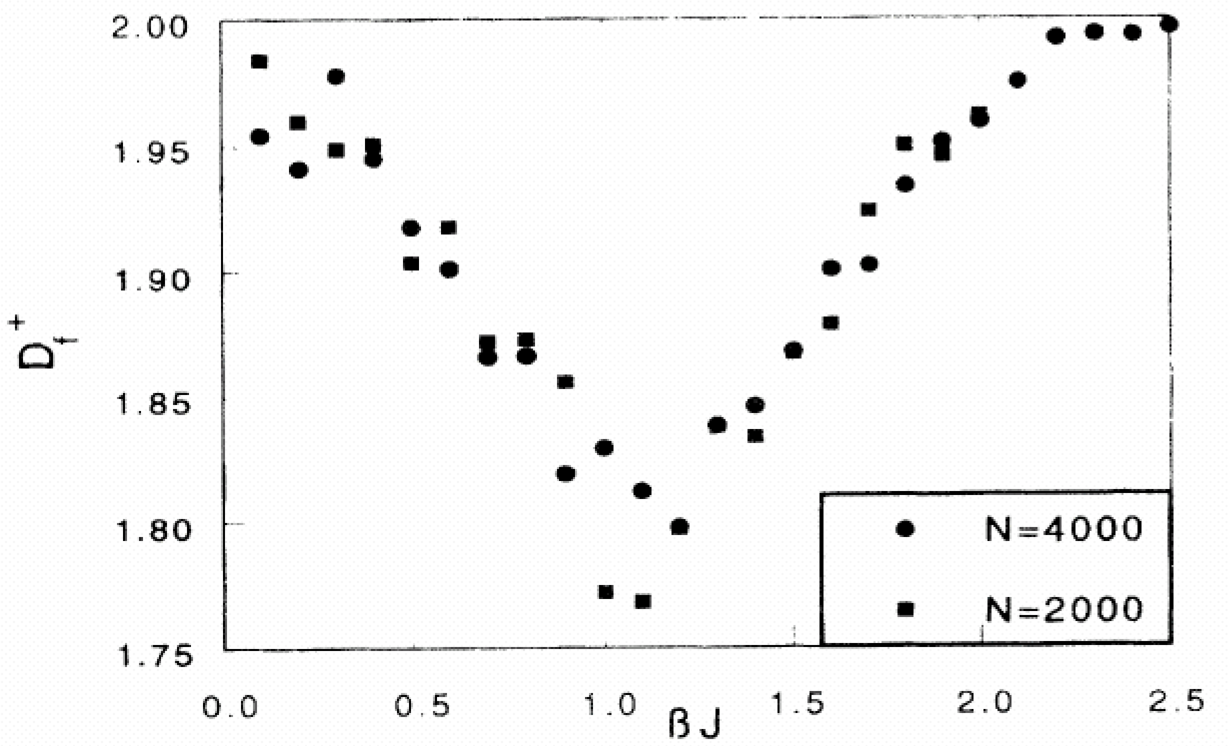
- 随*βJ*不断增大的结果！^_^注意所谓**granular**特征。

- 第一个有趣的模拟事实如下：
- **(1)** 随着***βJ***的增加，存在一个所谓密实形态向分形形态再向颗粒状形态转变：**compact-fractal-granular transition**，转变发生在***(βJ)***$_c$处。
- **(2)** 我们就**spin up**颗粒和**spin down**颗粒分别定义分形维：

$$n^+ \sim R^{D_f^+}$$

$$n^- \sim R^{D_f^-}$$

- 其中n^+和n^-分别是**spin up**和**spin down**颗粒的数目。计算时以中心点为原点测算。

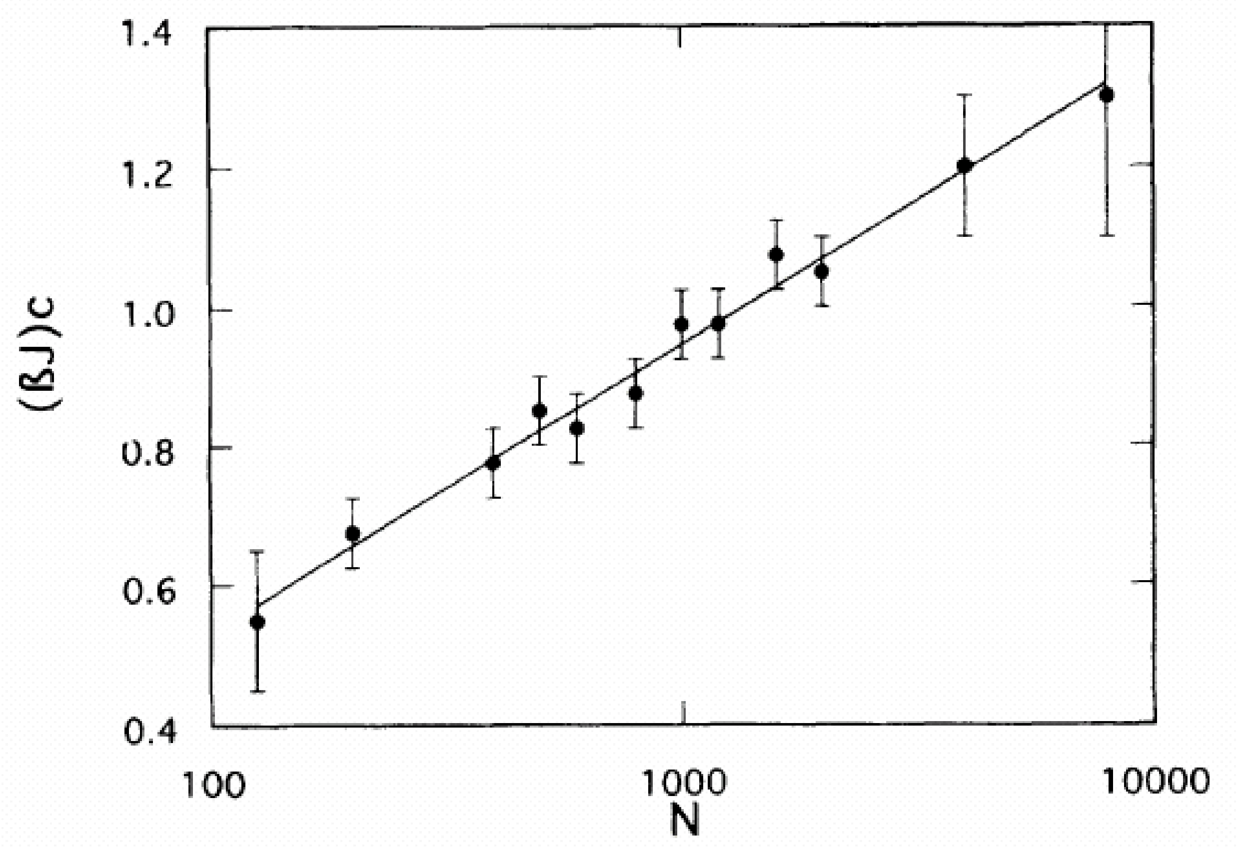


- **(3)** 上图是中心颗粒**spin up**的**100**次模拟平均结果，D_f^-具有很大的统计误差，与βJ的关系难以确定。当中心颗粒是**spin down**时，上面的结果刚好相反。

- (4) 在βJ很小和很大时，D_f^+均接近2.0，是欧基里德维度。
- (5) 随βJ的增大，D_f^+的变化呈现一个V形，在$\beta J=(\beta J)_c=1.2\pm0.1$时达到最小值$(D_f^+)_{min}=1.79\pm0.03$。说明spin up的颗粒团簇是一个分形，而spin down的团簇不是。
- (6) 在$\beta J<0$时，D_f^+和D_f^-都等于2.0，因为up和down都是均匀分布的，不存在聚集特征。
- 第二个有趣的事实：对应于$(D_f^+)_{min}$的$(\beta J)_c$与体系大小N有对数关系，与一维情况一样。

$$(\beta J)_c \approx \ln N$$

非线性物理：分形物理



能不能验证一下这个关系有没有饱和的趋势？

- 第三个有趣的模拟事实是表面形态：
- **(1)** 所谓“缺顶”位置就是体系表面位置最近临的空位置数目，被体系颗粒总数目归一化：体系内平均每个**spin**的缺顶位数目***l***。
- **(2)** ***l***与***N***的关系指数称为 “缺顶”幂指数**(lacunarity power law exponent)**，用λ来表示。

$$l \propto N^{\lambda-1} \Rightarrow \begin{cases} \lambda = 0.56 \pm 0.01 \quad \text{for Eden model} \\ \lambda = 0.56 \Rightarrow 1.00 \quad \text{for MEM clusters} \end{cases}$$

- **(3)** 在$(\beta J)_c$处我们观测到缺顶幂指数λ从**0.56**开始增大，在$\beta J=2(\beta J)_c$处达到**1.0**。记住 λ非常接近**0.5**。

- (4) λ具有关于$\beta J=0$的对称性，在$(\beta J)_c$=-1.2处开始增大到1.0。

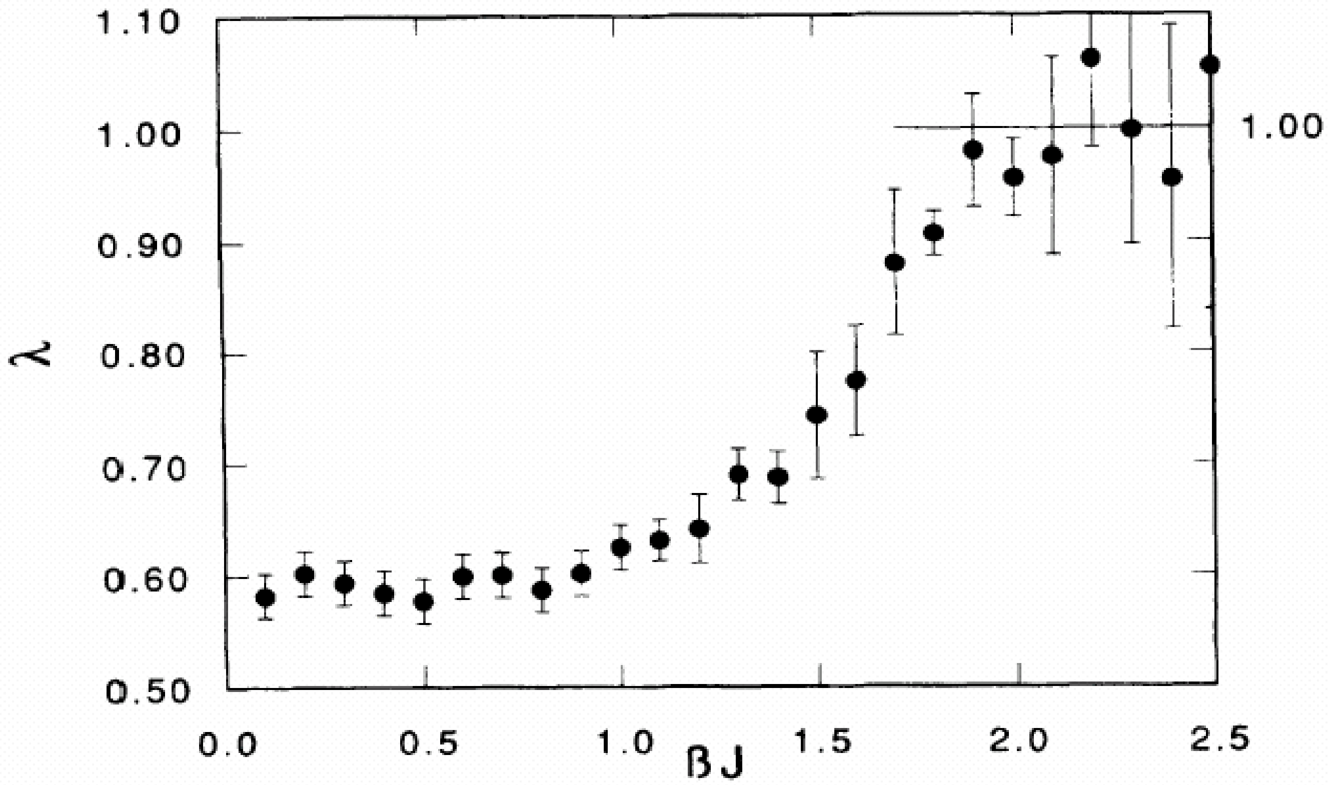
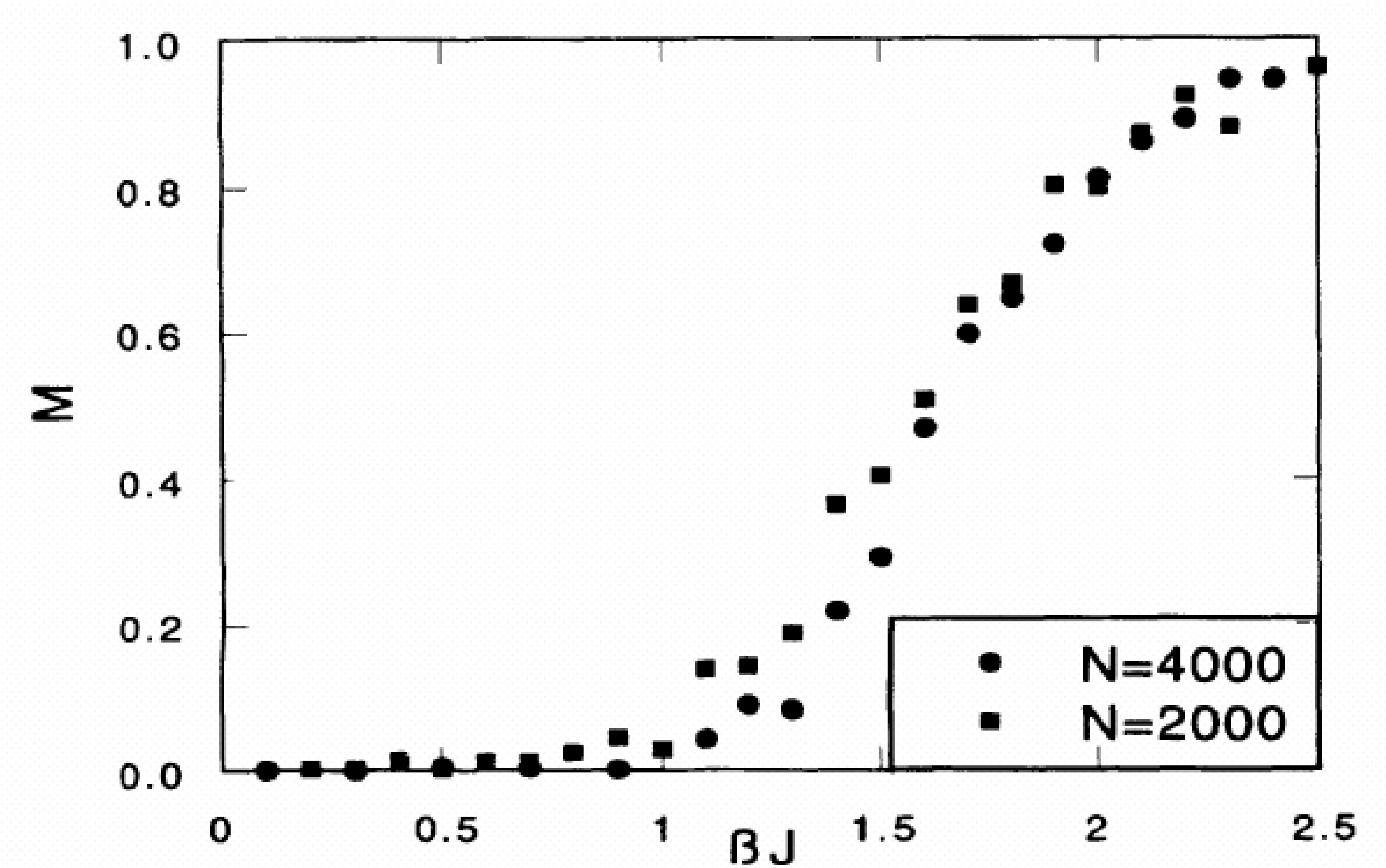


FIG. 3. The βJ dependence of the lacunarity exponent λ. Each dot results from an average over 100 clusters of $N=8000$ spins.

- 第四个有趣的模拟事实是磁化强度或者磁矩：铁磁转变在$(\beta J)_c$处开始发生。



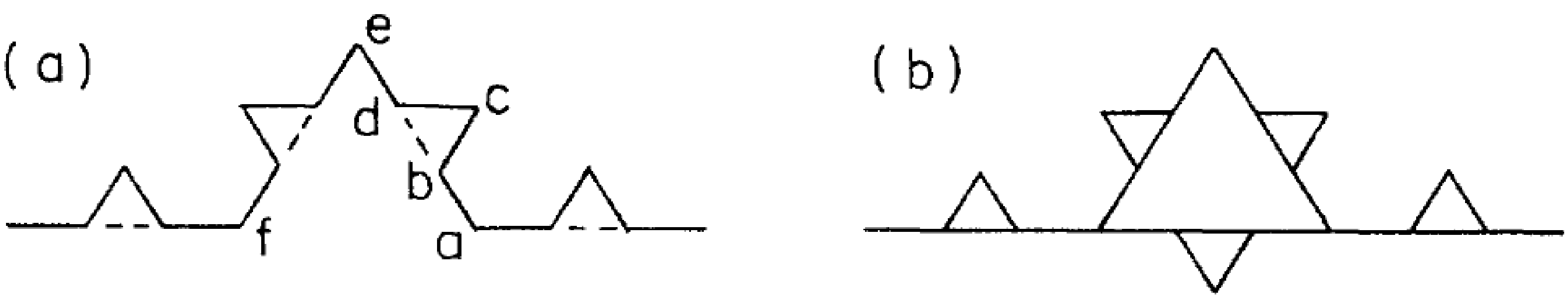
非线性物理：分形物理

- 更多有趣的行为可以作：
- (1) 从相关函数的角度处理上述问题该是如何？
- (2) 如果有微小外场作用，上述行为该如何？如果是交变外场该是如何？**NEW！！**
- (3) 在 βJ 与空间相关时上述性质仍然存在吗？**New!**
- (4) 如果βJ 是随机场会如何？
- (5) 在什么情况下体系内部spin团簇会发生渗流？**Percolation**
- (6) 如果存在表面扩散该是如何？

分形上的 **Ising** *模型* **(PRL 45, 855 (1980))**：

- 与**Eden**模型比较，一个**fractal**不再满足平移对称性，而具有标度不变性。描述一个**fractal**有不同变量d_f：**the topological dimensionality, the order of ramification, the connectivity, the lacunarity**等。

- 我们从最简单的**Koch**分形开始(左边不分叉，右边分叉)。



- 我们有d_f=ln4/ln3，即b=1/δ=3, N=4。再定义R (the order of ramification)为格点分叉数目，R=2表示不分叉，即连接每个格点都是左右两个键，无分叉发生。

- 上述Koch曲线每个格点赋一个spin，构成Ising模型。这里为了处理方便，我们给spin b-d之间，spin a-f之间加上交互作用。

- 利用重整化处理步骤，对Koch曲线上的spin交互作用进行计算，而b-d和a-f之间则在重整化计算之外。得到递推关系(recursion relation)为：

$$x' = x^4 \quad \begin{cases} x = \tau^3(1+\tau)/(1+\tau^3) \\ \tau = \tanh K, \quad K = J/kT \end{cases}$$

- 这个递推关系让我们可以进行稳定性分析。
- 定常态为 ***K*=0 (*T*→∞)**和 ***K*→∞ (*T*=0)**：没有***T* >0**相变，呵呵！
- 对***T*=0**附近作线性稳定性分析：

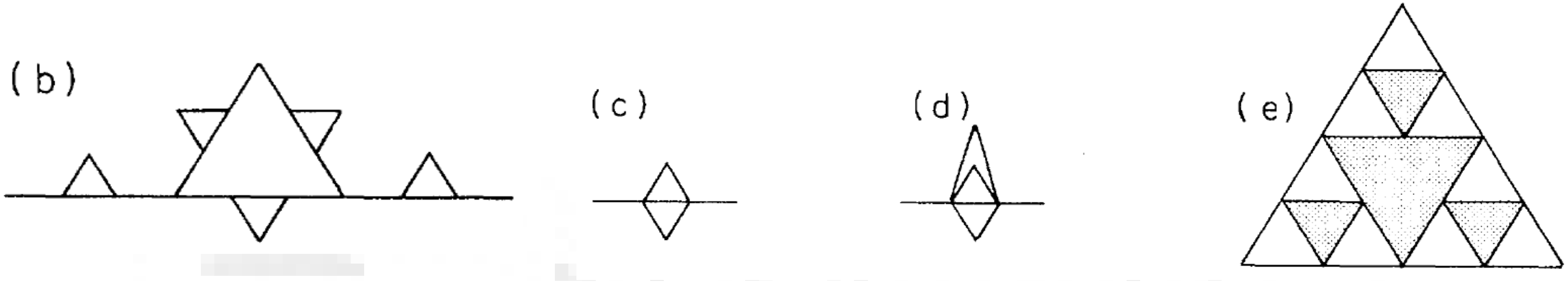
$$t' = b^y t \begin{cases} t = exp(-2K) \\ y = 1/\nu = ln4/ln3 = d_f \end{cases}$$

- 类似的递推关系可延伸到***N*>4**：***y*=ln*N*/ln*b***。对所有**R=2**的系统，都没有非零的相变。

$$x' = x^N \quad \begin{cases} x = \tau^3(1+\tau)/(1+\tau^3) \\ \tau = tanh\, K, \quad K = J/kT \end{cases}$$

非线性物理：分形物理

- 下面来看具有分叉行为的分形，如图所示。显然，分形从***R***变化的角度已经不再均匀：



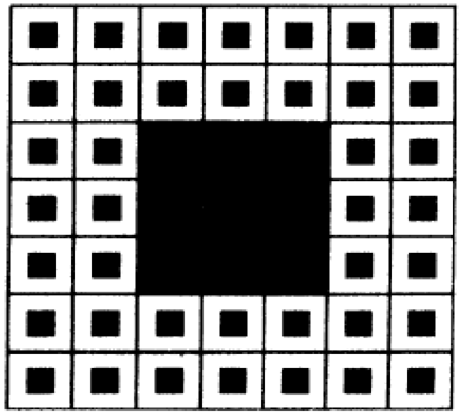
- d_f=ln5/ln3　　ln7/ln3　　2
- 对(b), (c), (d)均有y=1/ν=ln2/ln3~0.63。
- 以Sierpinski gasket为例分析：d_f=ln3/ln2~1.585, R=3 or 4，递推关系为：

$$\exp(4K')=\frac{\exp(12K)+3\exp(4K)+4}{\exp(8K)+\exp(4K)+3}$$

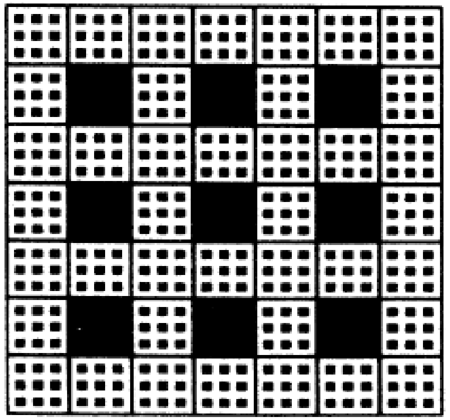
- 在T→0时有：

$$(t^2)' = t^2 + 4t^4 + \ldots \Rightarrow y = 0,\ \nu = \infty,\ \xi \sim exp(4exp(4K))$$

- 因此，对所有Koch分形，只要***R***是有限的，则T_c=0。
- 再看另类的分形**Sierpinski carpet**：***R***=∞, ***b***=7, ***l***=3，其构造方法是将正方形分为b^2个小正方形，然后挖去其中的l^2个小正方形。
- 维数$d_f=\ln(b^2-l^2)/\ln b$，关联度$Q=\ln(b-l)/\ln b$。



$SC_a(7, 3)$



$SC_b(7, 3)$

- 我们在这个点阵中每个格点上放入一个自旋，构成一分形点阵。
- 考虑最近邻交互作用的**Ising**模型。
- 在**T→0**时，通过重整化群计算，配分函数为：

$$Z = exp(-E_0)(1 + g_1 exp(-6K) + ...)$$

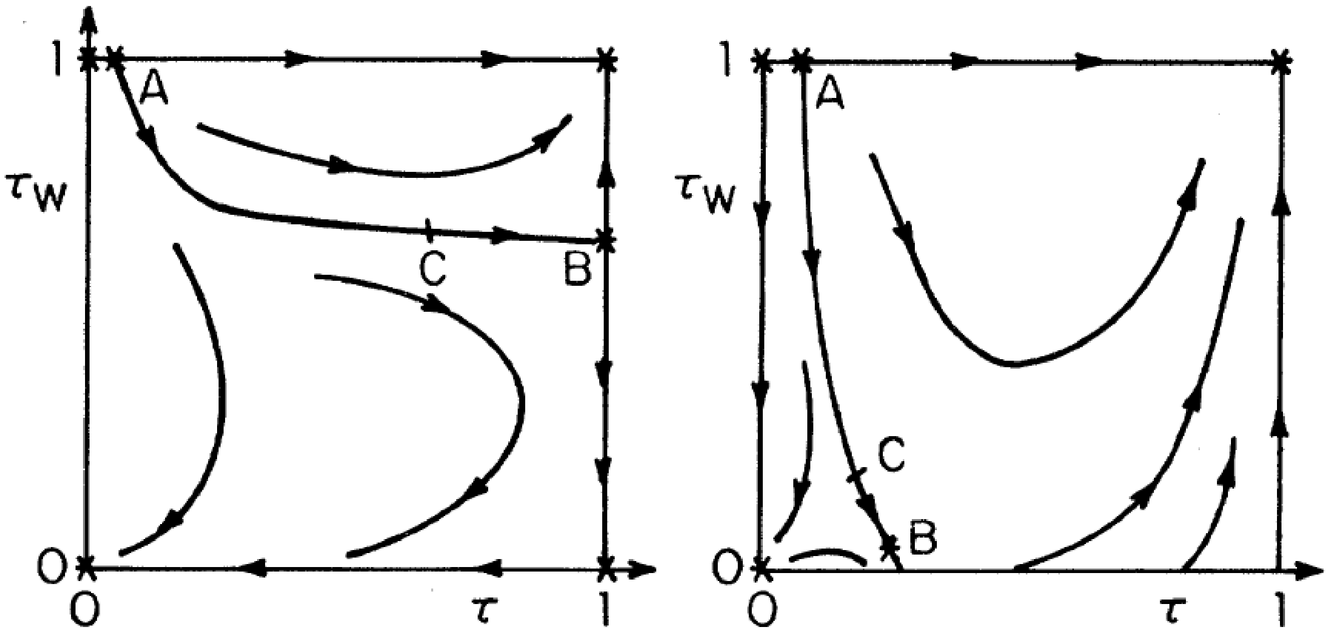
- 其中E_0是基态、而$6K$表示最低激发态，表征被挖区域**(**这里的格点的自旋只有**3**个近邻格点自旋**)**边界格点自旋发生翻转所需的能量。
- 所谓的多数规则**(majority rule)**重整化群分析得到新的配分函数：

$$Z = Z' = A\exp(-E_0')(1 + g_1'\exp(-mK') + \ldots)$$
$$at\ \ T \to 0,\ K' = (m/6)K$$

- 这里m>6。
- 同样，这里$T\to 0$和$T\to \infty$也都是稳定点。
- 但上述配分函数至少存在一个非稳定的非零定点：$T_c>0$，对应的著名迭代关系为：

$$\tanh K' = \tanh^l[(b-l-1)K + 2K_w]\tanh^{b-1}(bK)$$
$$\tanh K_w' = \tanh^l[(b-l-1)K/2 + 2K_w]\cdot$$
$$\cdot\tanh^{b-1}[(b-1)K/2 + K_w]$$

- 只要是$m>6$，必然有$T_c>0$。
- 结论：对于分形体，只要$R\to\infty$，必然有$T_c>0$。



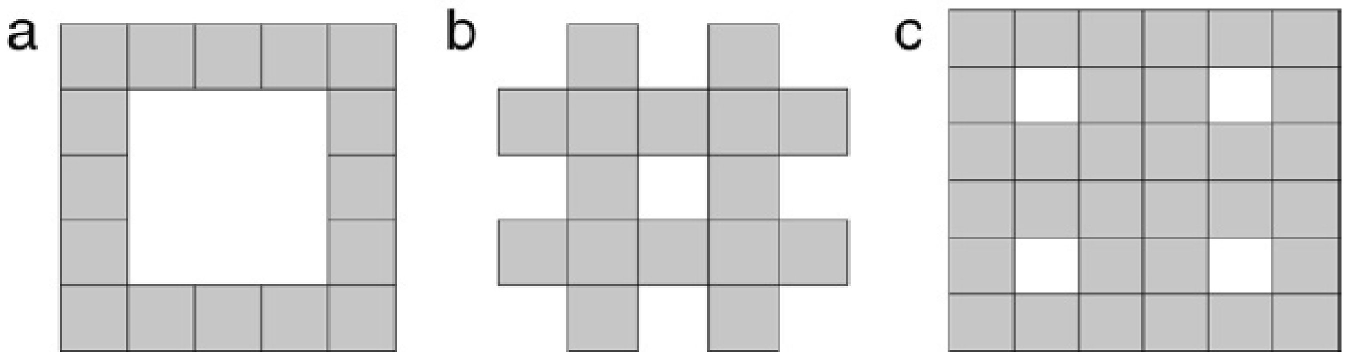
b=7 and l=5 **b=7 and l=3**

$\tau=\tanh K$, $\tau_w=\tanh K_w$

本节作业(选)：尝试模拟Sierpinski Carpet或者干脆在一个DLA上的Ising模型相变：

$$\beta E = -\frac{\beta J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - \beta H \sum_i \sigma_i,$$

- SC构造如下(举例)，而$d_f=\ln(b^2-c^2)/\ln b$，$d_f=\ln(l^2(b^2-c^2))/\ln(lb)$：



- $SC_a(b=5, c=3)$ $SC_b(5, 3)$ $SC_c(3, 1, l=2)$

非线性物理：分形物理

- 构造分形；
- 模拟其*M*、*χ*、*ξ*、*C*等与温度的关系，特别是在T_c附近；
- 尝试在Tc附近进行临界指数和有限尺寸效应的分析；
- 验证超级标度关系：$d_f=2\beta/\nu+\gamma/\nu$。

$$\xi(T) \sim |T-T_c|^{-\nu}$$
$$M(T) \sim (T_c-T)^{\beta}$$
$$C \sim |T-T_c|^{-\alpha}$$
$$\chi \sim |T-T_c|^{-\gamma}$$

$$\xi(T) \sim |T-T_c|^{-\nu} \to L$$
$$M(T) \sim (T_c-T)^{\beta} \to L^{-\beta/\nu}$$
$$C(T) \sim |T-T_c|^{-\alpha} \to L^{\alpha/\nu}$$
$$\chi \sim |T-T_c|^{-\gamma} \to L^{\gamma/\nu}$$