

Numerische und analytische Untersuchung  
magnetischer Systeme im Rahmen einer  
verallgemeinerten statistischen Mechanik

Als Diplomarbeit vorgelegt von  
Eicke Ruthotto

Januar 2001

Institut für Theoretische Physik  
der Westfälischen Wilhelms–Universität Münster



Numerische und analytische Untersuchung  
magnetischer Systeme im Rahmen einer  
verallgemeinerten statistischen Mechanik

Als Diplomarbeit vorgelegt von  
Eicke Ruthotto

Januar 2001

Institut für Theoretische Physik  
der Westfälischen Wilhelms–Universität Münster



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Tsallis–Statistik</b>	<b>5</b>
1.1 Eigenschaften der Tsallis–Entropie . . . . .	5
1.2 Zusammenhang mit der Thermodynamik . . . . .	11
1.2.1 Kanonisches Ensemble . . . . .	11
1.2.2 Thermodynamische Stabilität . . . . .	19
<b>2 Monte–Carlo–Methoden</b>	<b>23</b>
2.1 Metropolis–artige Methoden . . . . .	23
2.1.1 Verallgemeinertes Importance Sampling: Die AS–Methode	24
2.1.2 Daten–Recycling: Die Histogramm–Methode . . . . .	25
2.1.3 Numerische $\beta$ – $\beta'$ –Transformation: Die Salazar–Methode .	26
2.2 Bestimmung der Zustandsdichte . . . . .	27
2.2.1 Mikrokanonische Methoden: Creutz und HOW . . . . .	27
2.2.2 Die Broad–Histogram–Methode (BHMC) . . . . .	29
<b>3 Das Ising–Modell in einer Dimension</b>	<b>35</b>
3.1 Test der Monte–Carlo–Methoden . . . . .	35
3.2 Eigenschaften des Systems . . . . .	47
3.2.1 Die Cut–off–Bedingung . . . . .	47
3.2.2 Die $\beta$ – $\beta'$ –Transformation . . . . .	49
3.2.3 Der Energie–Offset . . . . .	54
3.3 Vergleich mit der Literatur . . . . .	58
3.3.1 Äquivalenz der ersten und dritten $p_i$ –Verteilung . . . . .	59
3.3.2 Diskussion der veröffentlichten Ergebnisse . . . . .	64
<b>4 Das Ising–Modell in zwei Dimensionen</b>	<b>71</b>
4.1 Eigenschaften des Systems . . . . .	72
4.2 Vergleich mit der Literatur . . . . .	77
<b>5 Das XY–Modell in zwei Dimensionen</b>	<b>79</b>
5.1 Test der Monte–Carlo–Methoden . . . . .	79

5.1.1	Vergleich der AS– und BHMC–Ergebnisse . . . . .	79
5.1.2	Einfluß der Diskretisierung . . . . .	82
5.2	Eigenschaften des Systems . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
6.1	Ergänzung . . . . .	93
6.2	Zusammenfassung . . . . .	96
6.3	Diskussion . . . . .	98
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>101</b>

# Einleitung

Die statistische Mechanik nach Boltzmann und Gibbs und die klassische Thermodynamik liefern eine hervorragende Beschreibung für viele physikalische Systeme. Es gibt allerdings Beschränkungen der Anwendbarkeit dieser Formalismen. So treten Schwierigkeiten auf, wenn i) die auftretenden mikroskopischen Wechselwirkungen langreichweitig sind, ii) Systeme bzw. Prozesse mit langem Gedächtnis involviert sind (nicht-markovsche Prozesse) oder iii) die Raum–Zeit, in der sich das System entwickelt, eine (multi)fraktale Struktur besitzt. Diese Schwierigkeiten reichen von kleineren Abweichungen über physikalische Anomalien bis hin zu vollständigem Versagen der Theorie. Es existiert eine lange Liste solcher Systeme wie z. B. anomale Diffusion vom Lévy–Typ,  $D = 2$ –Turbulenz in Elektronen–Plasmen, Sonnen–Neutrinos, kosmische Hintergrundstrahlung, etc. Eine gute Übersicht über die Vielfalt der betroffenen Systeme liefert [4].

Es ist daher wünschenswert, einen Formalismus zu haben, der einerseits die genannten Systeme richtig beschreibt, andererseits jedoch auch die bewährte Boltzmann–Gibbs(BG)–Thermostatistik umfaßt. Ein Versuch zu einer solchermaßen erweiterten oder verallgemeinerten Theorie wurde 1988 von Constantino Tsallis unternommen. Inspiriert von der Theorie der Multifraktale wurde ein Ausdruck für die Entropie eingeführt, der von einem einzelnen reellen Parameter  $q$  abhängt und die Boltzmann–Gibbs–Entropie als Grenzfall  $q \rightarrow 1$  enthält. Ausgehend von diesem Ausdruck wurde formal eine nichtextensive Thermostatistik etabliert, die erfolgreich auf eine Reihe von statistischen Systemen angewandt worden ist. Für eine regelmäßig aktualisierte Liste siehe [tsallis.cat.cbpf.br/biblio.html](http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.html).

An dieser Stelle sei ein kurzes Beispiel dafür angeführt, in welcher Weise die Tsallis–Statistik die Probleme lösen kann, die bei der Benutzung der extensiven BG–Theorie auftreten. Ein selbst–gravitierendes  $N$ –Körper–System fällt aufgrund der langreichweiten Gravitationswechselwirkung in die Klasse der Systeme, für die die verallgemeinerte Statistik eingeführt worden ist. Galaxien können als Beispiele solcher Systeme angesehen werden. Die Thermodynamik einfacher Modelle für sphärische Galaxien wird durch Polytropengleichungen beschrieben. Die heutige Konfiguration einer Galaxie kann als Gleichgewichtskonfiguration betrachtet werden, die im Verlauf eines Relaxationsprozesses angenommen worden ist. Bei der Bestimmung der Gleichgewichtsverteilungsfunktion im Phasenraum durch Maximierung der Entropie unter Nebenbedingungen für die Massen– und

Energieerhaltung tritt dann jedoch eine Anomalie auf. Diese äußert sich darin, daß die Gesamtmasse unendlich wird. Dieses unphysikalische Resultat kann umgangen werden, indem die Boltzmann–Gibbs–Shannon–Entropie durch die Tsallis–Entropie  $S_q$  mit  $q \neq 1$  ersetzt wird [51]. Es kann dadurch eine untere Grenze für den Parameter  $q$  angegeben werden, bei dem die Gesamtmasse des Systems endlich bleibt. Darüber hinaus kann ein Zusammenhang zwischen  $q$  und dem Polytropenindex  $n$  hergestellt werden.

Kürzlich wurde als mögliches weiteres Anwendungsgebiet die Beschreibung von Systemen vorgeschlagen, für die entweder nicht alle physikalisch möglichen Zustände angegeben werden können oder nicht alle mikroskopischen Wechselwirkungen bekannt sind. Für solche Systeme wurde von Q. A. Wang [52, 53, 54] auf der Grundlage einer „unvollständigen Informationstheorie“ durch Einführung einer „unvollständigen Normierung“ die Tsallis–Entropie als Informationsentropie erhalten.

Einige Wissenschaftler, die an der Entwicklung dieser nichtextensiven, verallgemeinerten Statistik beteiligt waren, gehen sogar so weit zu behaupten, die Tsallis–Statistik sei in demselben Sinne eine Verallgemeinerung der klassischen BG–Statistik wie die Quantenmechanik und die Relativitätstheorie Verallgemeinerungen der klassischen Physik sind, die dann zum Tragen kommen, wenn die Wechselwirkungsabstände sehr klein, die Geschwindigkeiten oder die Massen sehr groß sind, oder eben—im Fall der Tsallis–Statistik—mindestens eine der drei obigen Bedingungen erfüllt ist.

In dieser Arbeit wird das Verhalten dreier statistischer Systeme, die durch die klassische, extensive statistische Mechanik hervorragend beschrieben werden, in der nichtextensiven Tsallis–Statistik untersucht. Dafür gibt es verschiedene Gründe:

- Die hier betrachtete nichtextensive Thermostatistik wurde unter Beibehaltung der Legendre–Struktur der Boltzmann–Gibbs–Theorie entwickelt. Trotz der formalen Analogien der beiden Formalismen ist die Tsallis–Statistik zunächst nur ein theoretisches Konstrukt, und selbst für grundlegende Fragen wie die angemessene Definition eines Erwartungswertes gibt es keine offensichtliche Lösung. So wurden insgesamt drei verschiedene Definitionen des Erwartungswertes der inneren Energie vorgeschlagen und mit ihnen drei verschiedene Formen der kanonischen Gleichgewichtsverteilung erhalten. Eine zentrale Rolle bei der Unterscheidung und insbesondere bei der Herstellung eines Zusammenhangs dieser Verteilungen spielt die Temperatur. In dieser Arbeit wird dieser Zusammenhang hergestellt und anhand von Modellsystemen untersucht, deren Verhalten (zumindest im BG–Grenzfall) gut bekannt ist.
- Es werden in dieser Arbeit einige bisher wenig erprobte Monte–Carlo–Methoden auf ihre Zuverlässigkeit und Anwendbarkeit getestet. Da für zwei der betrachteten Systeme im Grenzfall  $q \rightarrow 1$  eine exakte Lösung existiert,

können die Ergebnisse der Monte–Carlo–Rechnungen mit exakten Ergebnissen verglichen werden.

- Zwei der drei hier betrachteten Systeme sind in der Vergangenheit bereits untersucht worden. Allerdings widersprechen sich die Ergebnisse insbesondere hinsichtlich der Frage, ob das zweidimensionale Ising–Modell im nichtextensiven Fall einen Phasenübergang aufweist. Die hier erhaltenen Ergebnisse sollen dazu beitragen, diese Frage zu klären.

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert: Im ersten Kapitel wird die Tsallis–Statistik eingeführt. Dabei werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften der verallgemeinerten Entropie diskutiert und dann der Zusammenhang mit der Thermodynamik hergestellt. Im zweiten Kapitel werden die in der Arbeit benutzten Monte–Carlo–Verfahren vorgestellt und im dritten Kapitel am Beispiel des eindimensionalen Ising–Modells ausgiebig getestet, bevor durch exakte Rechnung erhaltene Ergebnisse mit bereits veröffentlichten Resultaten verglichen werden. Es schließen sich zwei Kapitel an, in denen magnetische Systeme in zwei Dimensionen untersucht werden (das zweidimensionale Ising–Modell in Kapitel 4 und das  $XY$ –Modell in Kapitel 5). Das Augenmerk liegt dabei auf der Fragestellung, ob die im Boltzmann–Gibbs–Grenzfall auftretenden Phasenübergänge auch im nichtextensiven Fall auftreten. Die Arbeit schließt mit einer Diskussion der erhaltenen Ergebnisse.



# Kapitel 1

## Tsallis–Statistik

Vor mittlerweile 12 Jahren hat der brasilianische Physiker Constantino Tsallis—inspiriert von der Theorie der Multifraktale—den Standard–Ausdruck für die Entropie  $S$  der Informationstheorie verallgemeinert, um zu einer angemessenen statistischen Beschreibung nichtextensiver Systeme zu gelangen.

Dazu wurde die folgende Form für die Entropie postuliert [1]—ein Ausdruck, der in anderem Zusammenhang früher schon von Havrda, Charvat und Daróczy eingeführt worden war:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1}. \quad (1.1)$$

Dabei ist  $k$  eine positive Konstante, deren Wert von den benutzten Einheiten abhängt,  $q$  ein reeller Parameter, der in einem noch zu spezifizierenden Sinne den Grad der Nichtextensivität bestimmt, und  $W$  die Gesamtzahl der mikroskopischen Konfigurationen des betrachteten Systems mit den zugehörigen Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$ . Für die Wahrscheinlichkeiten ist zu fordern, daß  $\sum_{i=1}^W p_i = 1$ , und es ist darauf zu achten, daß im Fall  $q < 0$  alle Mikrozustände ausgeschlossen werden, deren Wahrscheinlichkeiten nicht strikt positiv sind.

In den folgenden Abschnitten werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften der Tsallis–Entropie  $S_q$  untersucht und dann der Zusammenhang mit der Thermodynamik hergestellt.

### 1.1 Eigenschaften der Tsallis–Entropie

Die wichtigsten Eigenschaften der von Tsallis postulierten verallgemeinerten Entropie sind die folgenden [1, 2]:

## Boltzmann–Gibbs–Grenzfall

Die Tsallis–Entropie (1.1) enthält die bekannte Shannonsche Informationsentropie als Grenzfall  $q \rightarrow 1$ :

$$\begin{aligned} S_1 \equiv \lim_{q \rightarrow 1} S_q &= k \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i \exp[(q-1) \ln p_i]}{q-1} \\ &= -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \end{aligned} \quad (1.2)$$

Dies sieht man auch durch einmalige Anwendung der L'Hospitalschen Regel für die Bildung von Grenzwerten.

Somit erhält man im Grenzfall  $q \rightarrow 1$  die gesamte Boltzmann–Gibbs–Thermostatistik zurück.

## Positivität

Nach Umschreiben von Gleichung (1.1) in die Form

$$S_q = \frac{k}{q-1} \sum_{i=1}^W p_i (1 - p_i^{q-1}) \quad (1.3)$$

erkennt man unmittelbar, daß  $S_q \geq 0$  für alle  $\{p_i\}$  und alle  $q$ . Das Gleichheitszeichen gilt, wenn  $W > 1$ ,  $q > 0$  und  $p_i = 1$  ( $p_{j \neq i} = 0$ ), oder wenn  $W = 1$  für alle  $q$ .

## Konkavität/Konvexität

Für die Entropie bei Mischung zweier Zustände—repräsentiert durch die Mengen von Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$  und  $\{p'_i\}$  bezüglich derselben Menge von  $W$  möglichen Ereignissen oder Mikrozuständen—zu einem Zustand, charakterisiert durch die Wahrscheinlichkeiten

$$p''_i \equiv \lambda p_i + (1 - \lambda)p'_i \quad (i = 1, \dots, W), \quad (1.4)$$

gilt

$$S_q(\{p''_i\}) = [\lambda S_q(\{p_i\}) + (1 - \lambda)S_q(\{p'_i\})] + \Delta_q. \quad (1.5)$$

Es ergibt sich für die Größe  $\Delta_q$ :

$$\Delta_q \text{ ist } \begin{cases} \leq 0 & q < 0 \Rightarrow S_q \text{ ist konvex} \\ = 0 & \text{für } q = 0 \Rightarrow S_q \text{ ist konstant} \\ \geq 0 & q > 0 \Rightarrow S_q \text{ ist konkav} \end{cases}.$$

Gleichheit gilt außerdem für  $q \neq 0$ , wenn  $p_i = p'_i$  für alle  $i$ .

Konvex ist hier in Analogie zu einer konvexen Kurve zu verstehen, bei der jeder Punkt der Kurve in einem Intervall unterhalb der Verbindungsgeraden der Kurvenpunkte an den Intervallenden liegt. In der Literatur werden die Begriffe „konvex“ und „konkav“ nicht einheitlich gehandhabt.

Abbildung 1.1 illustriert dieses Verhalten der verallgemeinerten Tsallis-Entropie für den Fall  $W = 2$  und verschiedene Werte von  $q$ .

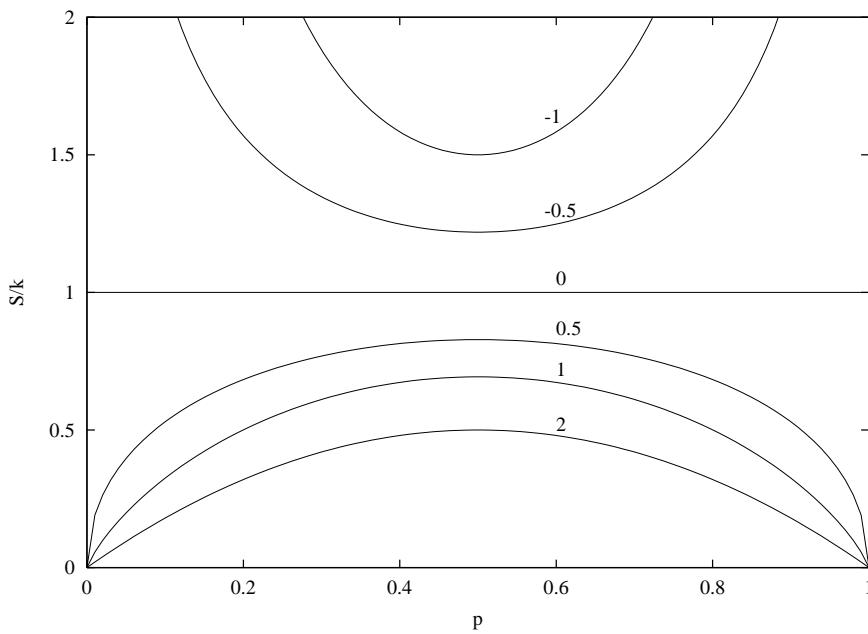


Abb. 1.1:  $S_q(\{p_i\})$  für  $W = 2$  und typische Werte von  $q$  (Zahlen an den Kurven)

## Mikrokanonisches Ensemble

Die Optimierung der Tsallis-Entropie  $S_q$  unter der einzigen Nebenbedingung

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1 \quad (1.6)$$

liefert für alle Werte von  $q$  die extreme Entropie

$$S_q^{\text{MC}} = k \frac{W^{1-q} - 1}{1 - q} \quad (1.7)$$

im Falle, daß  $p_i = 1/W$  für alle  $i$ .

BEWEIS. Nach Einführung eines Lagrange–Parameters  $\lambda$  ergibt sich als zu optimierender Ausdruck:

$$\phi_q \equiv S_q - \lambda \sum_{i=1}^W p_i = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1} - \lambda \sum_{i=1}^W p_i.$$

Es muß also gelten:

$$\frac{\partial \phi_q}{\partial p_i} = k \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \lambda \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall i.$$

Hieraus erhält man für die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  ( $i = 1, \dots, W$ ):

$$p_i = \left( \frac{kq}{\lambda(1-q)} \right)^{\frac{1}{1-q}}. \quad (1.8)$$

Einsetzen in Gleichung (1.6) liefert zunächst

$$\sum_{i=1}^W p_i = \sum_{i=1}^W \left( \frac{kq}{\lambda(1-q)} \right)^{\frac{1}{1-q}} = W \left( \frac{kq}{\lambda(1-q)} \right)^{\frac{1}{1-q}} = 1,$$

woraus dann der Lagrange–Parameter  $\lambda$  bestimmt werden kann:

$$\lambda = \frac{kq}{1-q} W^{1-q}.$$

Hiermit können nun durch Einsetzen in Gleichung (1.8) die Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$  bestimmt werden, für die die Entropie ein Extremum annimmt:

$$p_i = \left( \frac{kq}{1-q} \frac{1-q}{kq} \frac{1}{W^{1-q}} \right)^{\frac{1}{1-q}} = \frac{1}{W} \quad (i = 1, \dots, W).$$

Mit diesen Wahrscheinlichkeiten nimmt die Entropie schließlich die Form (1.7) an.  $\square$

Im BG–Grenzfall  $q \rightarrow 1$  erhält man wieder die bekannte Beziehung

$$S_1^{\text{MC}} = k \ln W. \quad (1.9)$$

Im Grenzfall unendlich vieler Ereignisse  $W \rightarrow \infty$  divergiert  $S_q^{\text{MC}}$  für  $q \leq 1$  und strebt für  $q > 1$  gegen den konstanten Wert  $S_q^{\text{MC}}(W \rightarrow \infty) = k/(q-1)$ . Dieses Verhalten illustriert Abbildung 1.2.

Das in (1.7) gegebene Extremum von  $S_q$  ist ein Maximum für  $q > 0$  und ein Minimum für  $q < 0$ . Für  $q = 0$  ist  $S_q(\{p_i\}) = k(W-1)$  für alle  $\{p_i\}$ .

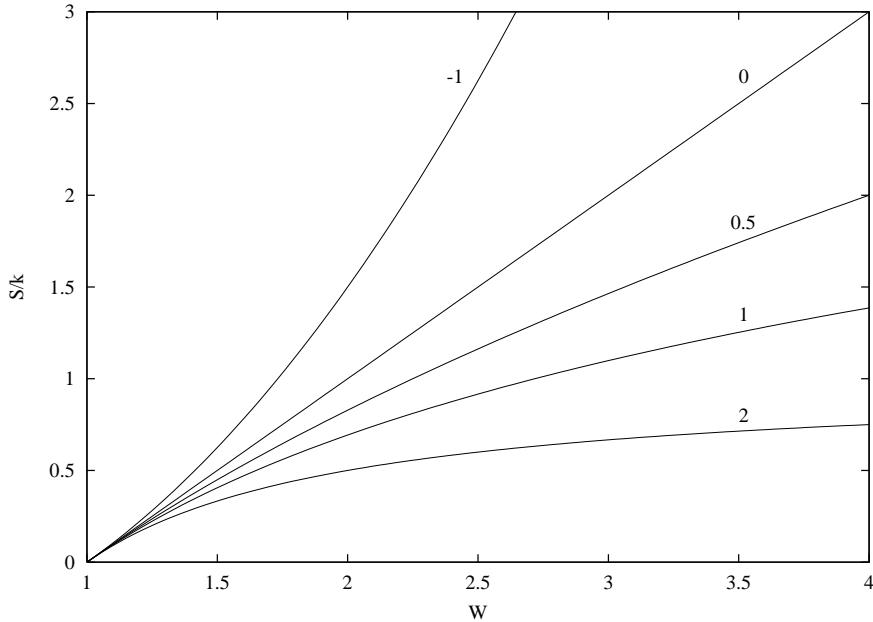


Abb. 1.2: Extremalwert der Entropie für typische Werte von  $q$  (Zahlen an den Kurven)

### Irreversibilität ( $H$ -Theorem)

Für die Entropie  $S_q$  gilt:

$$\frac{dS_q}{dt} \text{ ist } \begin{cases} \leq 0 & q < 0 \\ = 0 & \text{für } q = 0 \\ \geq 0 & q > 0 \end{cases}. \quad (1.10)$$

Dieses Ergebnis wurde von Mariz in [5] durch Anwendung einer Master-Gleichung unter Annahme der Gültigkeit eines detaillierten Gleichgewichts bewiesen. Rams-haw [6, 7] hat gezeigt, daß obige Relationen auch in Abwesenheit des detaillierten Gleichgewichts Bestand haben.

### Additivität

Seien zwei Systeme  $A$  und  $B$  mit Mikrozuständen  $\Omega^A = \{1, \dots, i, \dots, W_A\}$  und  $\Omega^B = \{1, \dots, j, \dots, W_B\}$  und den zugehörigen Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i^A\}$  bzw.  $\{p_j^B\}$  unabhängig in dem Sinne, daß für das zusammengesetzte System  $A \cup B$  mit den möglichen Konfigurationen  $\Omega^{A \cup B} = \{(1, 1), (1, 2), \dots, (i, j), \dots, (W_A, W_B)\}$  die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten  $p_{ij}^{A \cup B}$  faktorisieren, also  $p_{ij}^{A \cup B} = p_i^A p_j^B$ . Dann gilt für die Entropie des zusammengesetzten Systems die (Pseudo-)Addi-

tivitätsregel

$$\frac{S_q^{A \cup B}}{k} = \frac{S_q^A}{k} + \frac{S_q^B}{k} + (1 - q) \frac{S_q^A S_q^B}{k}. \quad (1.11)$$

**BEWEIS.** Setze vorübergehend  $k = 1$ . Dann gilt für die Entropie des zusammengesetzten Systems

$$\begin{aligned} S_q^{A \cup B} &= S_q^A + S_q^B + (1 - q) S_q^A S_q^B \\ &= \frac{1}{q - 1} \left\{ \left( 1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right) + \left( 1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right) \right. \\ &\quad \left. - \left( 1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right) \left( 1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right) \right\} \\ &= \frac{1}{q - 1} \left\{ 1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right\} \\ &= \frac{1}{q - 1} \left\{ 1 - \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} (p_i^A)^q (p_j^B)^q \right\} \\ &= \frac{1}{q - 1} \left\{ 1 - \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} (p_{ij}^{A \cup B})^q \right\} \\ &= S_q^{A \cup B} \end{aligned}$$

□

Gleichung (1.11) zeigt, in welcher Weise der Parameter  $q$  den Grad der Nichtextensivität beeinflusst: Da in jedem Fall  $S_q \geq 0$  ist, entsprechen die Fälle  $q < 1$ ,  $q = 1$  und  $q > 1$  jeweils einer superadditiven (superextensiven), additiven (extensiven) bzw. subadditiven (subextensiven) Entropie, d.h. die Entropie des zusammengesetzten Systems ist jeweils größer, gleich oder kleiner als die Summe der Entropien der das Gesamtsystem konstituierenden Teilsysteme.

## Shannon–Additivität

Bei Aufteilung der Menge von  $W$  mikroskopischen Konfigurationen eines Systems in zwei beliebige Teilmengen  $\Omega^A$  und  $\Omega^B$  mit  $W_A$  bzw.  $W_B$  Konfigurationen ( $W_A + W_B = W$ ) und Definition der Größen

$$p_A \equiv \sum_{i=1}^{W_A} p_i \quad \text{und} \quad p_B \equiv \sum_{i=W_A+1}^W p_i$$

gilt für die Entropie des Gesamtsystems die Beziehung

$$\begin{aligned} S_q(p_1, \dots, p_W) &= S_q(p_A, p_B) + p_A^q S_q(p_1/p_A, \dots, p_{W_A}/p_A) \\ &\quad + p_B^q S_q(p_{W_A+1}/p_B, \dots, p_W/p_B). \end{aligned} \quad (1.12)$$

BEWEIS. Durch einfaches Nachrechnen sieht man

$$\begin{aligned}
& S_q(p_A, p_B) + p_A^q S_q\left(\frac{p_1}{p_A}, \dots, \frac{p_{W_A}}{p_A}\right) + p_B^q S_q\left(\frac{p_{W_A+1}}{p_B}, \dots, \frac{p_W}{p_B}\right) \\
&= \frac{k}{q-1} \left\{ 1 - p_A^q - p_B^q + p_A^q \left[ 1 - \sum_{i=1}^{W_A} \left( \frac{p_i}{p_A} \right)^q \right] + p_B^q \left[ 1 - \sum_{i=W_A+1}^W \left( \frac{p_i}{p_B} \right)^q \right] \right\} \\
&= \frac{k}{q-1} \left\{ 1 - p_A^q \sum_{i=1}^{W_A} \left( \frac{p_i}{p_A} \right)^q - p_B^q \sum_{i=W_A+1}^W \left( \frac{p_i}{p_B} \right)^q \right\} \\
&= \frac{k}{q-1} \left\{ 1 - \left( \sum_{i=1}^{W_A} p_i^q + \sum_{i=W_A+1}^W p_i^q \right) \right\} \\
&= \frac{k}{q-1} \left\{ 1 - \sum_{i=1}^W p_i^q \right\} \\
&= S_q(p_1, \dots, p_W)
\end{aligned}$$

□

Gleichung (1.12) ist bis auf die Faktoren  $p_A^q$  und  $p_B^q$  (statt  $p_A$  und  $p_B$ ) vor den Summanden mit den bedingten Wahrscheinlichkeiten  $p_i/p_{A,B}$  die bekannte Shannonsche Additivitätsregel.

Da die Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$  Zahlen zwischen Null und Eins sind, ist  $p_i^q \geq p_i$ , wenn  $q < 1$  und  $p_i^q \leq p_i$ , wenn  $q > 1$ . Das heißt, die Fälle  $q < 1$  und  $q > 1$  bevorzugen die seltenen bzw. häufigen Ereignisse. Dies ist eine fundamentale Eigenschaft des gesamten Konzeptes.

Santos [8] hat vollständig analog zur Shannonschen Herleitung [9] der Informationsentropie (1.2) unter den Annahmen, daß die Entropie

- (i) kontinuierlich ist,
- (ii) eine monoton wachsende Funktion von  $W$  im mikrokanonischen Fall ist,
- (iii) die Gleichung (1.11) erfüllt,
- (iv) die Gleichung (1.12) erfüllt,

gezeigt, daß die Entropie nur eine Form haben kann, nämlich die in Gleichung (1.1) gegebene.

## 1.2 Zusammenhang mit der Thermodynamik

### 1.2.1 Kanonisches Ensemble

Im Verlauf der letzten zehn Jahre sind im ganzen drei verschiedene Versuche unternommen worden, die Tsallis-Entropie unter der Nebenbedingung der Normierung  $\sum_i p_i = 1$  einerseits und der Vorgabe des Erwartungswertes der inneren

Energie  $\langle U \rangle_q$  andererseits zu optimieren. Diese Versuche unterscheiden sich in der Art und Weise, wie die Erwartungswerte von beobachtbaren Größen definiert sind.

Obwohl heute klar zu sein scheint, daß die zuletzt eingeführte Definition die angemessenste ist, werden in diesem Abschnitt auch die mittlerweile verworfenen Versionen kurz eingeführt, da eine große Anzahl physikalischer Probleme unter Verwendung speziell der zweiten Formulierung behandelt worden ist. Wie sich später zeigen wird, kann man Transformationen zwischen den verschiedenen Formulierungen angeben und die alten Ergebnisse auf die heute gebräuchliche Form übertragen. Außerdem haben Plastino und Plastino [12] gezeigt, daß die mathematische Struktur der verallgemeinerten Thermostatistik unabhängig von der speziellen Wahl der Erwartungswertbildung ist.

### Erste Wahl der Erwartungswertbildung

Die erste Wahl der Definition von Erwartungswerten bei Verwendung der verallgemeinerten Statistik ist von Tsallis in [1] eingeführt worden. Zur Bildung von Erwartungswerten wird einfach die übliche Definition beibehalten:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{i=1}^W p_i O_i .$$

Bei dieser Wahl wird die Entropie (1.1) also unter der Normierungsbedingung (1.6) und der Nebenbedingung

$$\sum_{i=1}^W p_i \varepsilon_i = U^{(1)} \quad (1.13)$$

maximiert, wobei der hochgestellte Index (1) für „erste“ Wahl der  $U$ -Nebenbedingung steht und die  $\{\varepsilon_i\}$  die möglichen Energiewerte des Systems sind.

Man erhält die kanonische Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p_i^{(1)} = \frac{[1 - (q - 1)\beta^* \varepsilon_i]^{\frac{1}{q-1}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (q - 1)\beta^* \varepsilon_j]^{\frac{1}{q-1}}} , \quad (1.14)$$

wobei zu beachten ist, daß  $\beta^*$  nicht der Lagrange-Parameter zur Nebenbedingung (1.13), sondern die Parameterkombination  $\beta^* = \beta/(\alpha(q-1))$  ist, und daß im Falle  $q > 1$  solche Zustände ausgeschlossen werden müssen, deren Energien groß genug sind, daß der Inhalt der eckigen Klammer negativ wird (Cut-off-Bedingung).

**BEWEIS.** Nach Einführung der Lagrange-Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  ergibt sich als zu maximierender Ausdruck

$$\phi_q \equiv \frac{S_q}{k} - \alpha \sum_{i=1}^W p_i - \alpha \beta^* (1 - q) \sum_{i=1}^W p_i \varepsilon_i .$$

Aus der Bedingung

$$\frac{\partial \phi_q}{\partial p_i} = \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \alpha \beta^* (1-q) \varepsilon_i \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall i$$

ergibt sich für die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  ( $i = 1, \dots, W$ ) zunächst

$$p_i = \left( \frac{1-q}{q} \alpha [1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_i] \right)^{\frac{1}{q-1}}.$$

Nach Einsetzen in die Normierungsbedingung (1.6) folgt für den Lagrange-Parameter  $\alpha$

$$\alpha = \frac{q}{1-q} \left( \sum_{j=1}^W [1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_j]^{\frac{1}{q-1}} \right)^{1-q} \quad (1.15)$$

und damit schließlich

$$\begin{aligned} p_i &= \left( \frac{1-q}{q} \right)^{\frac{1}{q-1}} \alpha^{\frac{1}{q-1}} [1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_i]^{\frac{1}{q-1}} \\ &= \frac{[1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_i]^{\frac{1}{q-1}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_j]^{\frac{1}{q-1}}}. \end{aligned}$$

□

Mit (1.15) kann dann die inverse Temperatur  $\beta$  geschrieben werden als

$$\beta(\beta^*) = \beta^* q \left( \sum_{i=1}^W [1 - (q-1) \beta^* \varepsilon_i]^{\frac{1}{q-1}} \right)^{1-q} = \beta^* q Z_q^{1-q}(\beta^*).$$

Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung ist zunächst nur kurze Zeit benutzt worden, da sich sehr schnell herausgestellt hat, daß in der Anwendung auf physikalische Probleme ernsthafte mathematische Schwierigkeiten auftreten, die den Formalismus zweifelhaft erscheinen lassen. Diese Schwierigkeiten liegen in der Tatsache begründet, daß der Parameter  $\beta^*$  fälschlich als inverse Temperatur angesehen worden ist. In der jüngeren Vergangenheit hat diese erste Version der Tsallis-Verteilung wieder verstärkt Anwendung gefunden (vgl. auch Kapitel 3 und [29]).

### Zweite Wahl der Erwartungswertbildung

In [2] haben Tsallis und Curado eine alternative Formulierung der Nebenbedingung für die innere Energie gewählt:

$$\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i = U_q^{(2)}. \quad (1.16)$$

Der hochgestellte Index (2) steht für die „zweite“ Wahl der  $U_q$ -Nebenbedingung.  $q$ -Erwartungswerte anderer Größen werden in dieser Formulierung ganz analog gebildet:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_q = \sum_{i=1}^W p_i^q O_i. \quad (1.17)$$

Die Optimierung von  $S_q$  liefert in diesem Fall die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p_i^{(2)} = \frac{[1 - (1-q)\beta\varepsilon_i]^{\frac{1}{1-q}}}{Z_q^{(2)}} \quad (1.18)$$

mit der verallgemeinerten Zustandssumme

$$Z_q^{(2)} \equiv \sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta\varepsilon_j]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (1.19)$$

Auch in diesem Fall müssen diejenigen Zustände ausgeschlossen werden, deren Energien dazu führen, daß die eckigen Klammern negativ werden. Im Gegensatz zum vorigen Fall ist dies nun für  $q < 1$  notwendig.

**Beweis.** Es werden wieder zwei Lagrange-Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  eingeführt und der Ausdruck

$$\phi_q \equiv \frac{S_q}{k} - \alpha \sum_{i=1}^W p_i - \beta \sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i$$

optimiert. Aus der Forderung, daß  $\forall i$

$$\frac{\partial \phi_q}{\partial p_i} = \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta q p_i^{q-1} \varepsilon_i \stackrel{!}{=} 0$$

folgt zunächst

$$p_i = \left( \frac{q}{\alpha(1-q)} [1 - (1-q)\beta\varepsilon_i] \right)^{\frac{1}{1-q}},$$

daraus mit der Normierungsbedingung (1.6) für  $\alpha$  der Wert

$$\alpha = \frac{q}{1-q} \left( \sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta\varepsilon_j]^{\frac{1}{1-q}} \right)^{1-q}$$

und schließlich

$$\begin{aligned} p_i &= \left( \frac{q}{q-1} \right)^{\frac{1}{1-q}} \left( \frac{1}{\alpha} \right)^{\frac{1}{1-q}} [1 - (1-q)\beta\varepsilon_i]^{\frac{1}{1-q}} \\ &= \frac{[1 - (1-q)\beta\varepsilon_i]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta\varepsilon_j]^{\frac{1}{1-q}}}. \end{aligned}$$
□

Mit dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung ist eine Vielzahl von physikalischen Systemen untersucht worden (siehe [3, 4] und Referenzen darin). Trotz der offensichtlichen Nützlichkeit dieses Formalismus impliziert die zweite Wahl der  $U_q$ -Nebenbedingung drei ungewöhnliche Konsequenzen, die vom physikalischen Standpunkt bedenklich sind.

Die erste ungewöhnliche Konsequenz besteht darin, daß die Verteilung (1.18) nicht invariant unter Translation des Energiespektrums, d.h. abhängig von der Wahl des Energienullpunkts ist.

Die zweite ungewöhnliche Konsequenz betrifft die Definition der Erwartungswerte (1.17); denn bei Benutzung dieser Definition ist der Erwartungswert  $\langle 1 \rangle_q$  im allgemeinen nicht gleich Eins. Es ist zwar von Plastino und Plastino [19] gezeigt worden, daß die  $q$ -Erwartungswerte ein verallgemeinertes Ehrenfest-Theorem erfüllen, d.h. daß die  $q$ -Erwartungswerte  $\langle \mathcal{O} \rangle_q$  immer dann Konstanten der Bewegung sind, wenn die Observablen  $\mathcal{O}$  mit dem Hamilton-Operator des Systems vertauschen, jedoch ist diese Nicht-Erhaltung der Norm zumindest befremdlich. Die dritte ungewöhnliche Konsequenz ist, daß für zwei Systeme  $A$  und  $B$ , für die

$$p_{ij}^{A \cup B} = p_i^A p_j^B \quad \text{und} \quad \varepsilon_{ij}^{A \cup B} = \varepsilon_i^A + \varepsilon_j^B$$

gilt, d.h. die statistisch unabhängig sind, die innere Energie des zusammengesetzten Systems

$$U_q^{(2)}(A \cup B) = U_q^{(2)}(A) + U_q^{(2)}(B) + (1 - q) \left[ U_q^{(2)} \frac{S_q(B)}{k} + U_q^{(2)}(B) \frac{S_q(A)}{k} \right]$$

im allgemeinen verschieden ist von  $U_q^{(2)}(A) + U_q^{(2)}(B)$ . Das heißt, daß die Energieerhaltung makroskopisch nicht dieselbe Form behält wie mikroskopisch.

Diese drei Schwierigkeiten führten dann dazu, daß Tsallis, Mendes und Plastino [3] die folgende alternative Formulierung eingeführt haben.

### Dritte Wahl der Erwartungswertbildung

Nach Einführung der *normierten*  $q$ -Erwartungswerte

$$\langle\langle \mathcal{O} \rangle\rangle_q = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q O_i}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \quad (1.20)$$

kann eine kanonische Wahrscheinlichkeitsverteilung berechnet werden durch die Extremierung der Entropie unter der  $U_q$ -Nebenbedingung

$$\frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^W p_j^q} = U_q^{(3)}. \quad (1.21)$$

Die Optimierung von  $S_q$  liefert

$$p_i^{(3)} = \frac{\left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q^{(3)}) / \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q\right]^{\frac{1}{1-q}}}{Z_q'^{(3)}} \quad (1.22)$$

mit der verallgemeinerten Zustandssumme

$$Z_q'^{(3)} \equiv \sum_{i=1}^W \left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q^{(3)}) / \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q\right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (1.23)$$

Auch in diesem Fall ist für  $q < 1$  eine Cut-off-Bedingung für bestimmte Zustände notwendig.

**Beweis.** Der Ausdruck, der nach Einführung der Lagrange-Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  zu extremieren ist, lautet in diesem Fall

$$\phi_q \equiv \frac{S_q}{k} - \alpha \sum_{i=1}^W p_i - \beta \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^W p_j^q}. \quad (1.24)$$

Damit ergibt sich zunächst  $\forall i$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_q}{\partial p_i} \stackrel{!}{=} 0 &= \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta q p_i^{q-1} \left\{ \frac{\varepsilon_i \sum_{j=1}^W p_j^q - \sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i}{\left(\sum_{j=1}^W p_j^q\right)^2} \right\} \\ &= p_i^{q-1} \left\{ \frac{q}{1-q} - \beta q \frac{\varepsilon_i - U_q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \right\} - \alpha \\ \Leftrightarrow p_i &= \left\{ \frac{q}{\alpha(q-1)} \left( 1 - (1-q)\beta \frac{\varepsilon_i - U_q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \right) \right\}^{\frac{1}{1-q}}. \end{aligned}$$

Mit der Normierungsbedingung (1.6) erhält man für den Lagrange-Parameter

$$\alpha = \left\{ \sum_{j=1}^W \left[ \frac{q}{1-q} \left( 1 - (1-q)\beta \frac{\varepsilon_j - U_q}{\sum_{i=1}^W p_i^q} \right) \right]^{\frac{1}{1-q}} \right\}^{1-q}$$

und damit schließlich für die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  den Ausdruck (1.22).  $\square$

Plastino und Plastino [12] haben gezeigt, daß diese dritte Wahl (ebenso wie die zweite) der  $U_q$ -Nebenbedingung die Legendre-Struktur der Thermodynamik erhält. Es gelten die folgenden Beziehungen [3]:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial U_q^{(3)}} \quad (T \equiv 1/(k\beta)) \quad (1.25)$$

und

$$F_q^{(3)} \equiv U_q^{(3)} - TS_q = U_q^{(3)} - \frac{1}{\beta} \ln_q Z_q'^{(3)}, \quad (1.26)$$

also

$$S_q = k \ln_q Z_q'^{(3)}. \quad (1.27)$$

Dabei ist  $\ln_q(x)$  die verallgemeinerte Logarithmus–Funktion, definiert durch

$$\ln_q(x) \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} \xrightarrow{q \rightarrow 1} \ln(x)$$

mit der Umkehrfunktion

$$e_q^x \equiv \exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{\frac{1}{1-q}} \xrightarrow{q \rightarrow 1} e^x.$$

Nach Definition von  $Z_q^{(3)}$  durch

$$\ln_q Z_q^{(3)} = \ln_q Z_q'^{(3)} - \beta U_q^{(3)},$$

d.h. durch Wahl von Null als Bezugspunkt für die Energiewerte an Stelle von  $U_q^{(3)} = \langle\langle U \rangle\rangle_q$ , nehmen die folgenden Beziehungen die aus dem Boltzmann–Gibbs–Grenzfall bekannte Gestalt an:

$$F_q^{(3)} = -\frac{1}{\beta} \ln_q Z_q^{(3)}$$

und

$$U_q^{(3)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln_q Z_q^{(3)}.$$

Schließlich gilt für die spezifische Wärme

$$C_q^{(3)} \equiv T \frac{\partial S_q}{\partial T} = \frac{\partial U_q^{(3)}}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F_q^{(3)}}{\partial T^2}.$$

Die Verteilung (1.22) ist frei von den drei ungewöhnlichen Eigenschaften, die bei der zweiten Wahl der  $U_q$ –Nebenbedingung aufgetreten sind.

Erstens: Wenn man zu allen Energiewerten  $\varepsilon_i$  einen konstanten Wert  $\Delta$  addiert, geht die innere Energie  $U_q^{(3)}$  über in  $U_q^{(3)} + \Delta$ , was die Differenzen  $(\varepsilon_i - U_q^{(3)})$  in (1.22) invariant lässt und damit die Menge von Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i^{(3)}\}$ . Di Sisto et al. haben gezeigt [11], daß alle Verteilungen über diese Invarianz unter Translation des Energiespektrums verfügen, die durch Maximierung der Entropie unter einer Nebenbedingung für die innere Energie, die linear in den Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$  ist, erhalten werden.

Dies gilt nicht für (1.16), wohl aber für (1.21), wie man durch Einführung der Größen (*escort probabilities*)

$$P_i \equiv \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \quad (1.28)$$

leicht sieht. Denn damit schreibt sich die  $U_q$ -Nebenbedingung

$$U_q^{(3)} = \sum_{i=1}^W P_i \varepsilon_i .$$

Die Größen  $\{P_i\}$  sind ein anders normiertes, aber völlig äquivalentes Wahrscheinlichkeitsmaß und erfüllen auch die Bedingung  $\sum_{i=1}^W P_i = 1$ . Die Entropie schreibt sich mit diesen Wahrscheinlichkeiten

$$S_q = k \frac{1 - \left[ \sum_{i=1}^W P_i^{1/q} \right]^{-q}}{q - 1} . \quad (1.29)$$

Zweitens ist mit den normierten  $q$ -Erwartungswerten (1.20)  $\langle\langle 1 \rangle\rangle_q = 1 \forall q$ . Und drittens gilt, wie man einfach nachrechnen kann, für zwei unabhängige Systeme  $A$  und  $B$

$$U_q^{(3)}(A \cup B) = U_q^{(3)}(A) + U_q^{(3)}(B) .$$

Nun ist aber Gleichung (1.22) eine *implizite* Gleichung für die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$ . Eine Möglichkeit zur Berechnung dieser Wahrscheinlichkeiten besteht darin, Gl. (1.22) ausgehend vom Boltzmann–Gibbs–Grenzfall zu iterieren. Man berechnet also die Wahrscheinlichkeiten für  $q = 1$ , bestimmt damit den Erwartungswert der inneren Energie und setzt in die Gleichung ein. Dieser Vorgang wird solange iteriert, bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. Die Methode konvergiert schnell für  $q < 1$ , aber umso schlechter, je weiter  $q$  über Eins ansteigt. Die zweite Möglichkeit ist die  $\beta$ - $\beta'$ -Transformation. Wenn man nämlich in Gleichung (1.22) in Zähler und Nenner die Größe

$$\left[ 1 + (1 - q)\beta U_q^{(3)} / \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q \right]$$

ausklammert und kürzt, erhält man zunächst

$$p_i^{(3)}(\beta) = \frac{\left[ 1 - (1 - q) \varepsilon_i \frac{\beta}{(1-q)\beta U_q^{(3)} + \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q} \right]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{i=1}^W \left[ 1 - (1 - q) \varepsilon_i \frac{\beta}{(1-q)\beta U_q^{(3)} + \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q} \right]^{\frac{1}{1-q}}} ,$$

woraus mit der Definition

$$\beta' \equiv \frac{\beta}{(1-q)\beta U_q^{(3)} + \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q} \quad (1.30)$$

die Beziehung folgt:

$$\begin{aligned} p_i^{(3)}(\beta) &= \frac{[1 - (1-q)\beta' \varepsilon_i]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta' \varepsilon_j]^{\frac{1}{1-q}}} \\ &= \frac{e_q^{-\beta' \varepsilon_i}}{\sum_{j=1}^W e_q^{-\beta' \varepsilon_j}}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Man kann nun also diese explizite Gleichung in Abhängigkeit von  $\beta'$  lösen, damit Erwartungswerte berechnen und schließlich durch Inversion von Gleichung (1.30) die inverse Temperatur  $\beta$  bestimmen.

Der Vergleich der letzten Gleichung mit (1.18) zeigt sofort die außerordentlich nützlichen Eigenschaften, daß

$$p_i^{(3)}(\beta) = p_i^{(2)}(\beta') \quad \text{und} \quad Z_q^{(3)}(\beta) = Z_q^{(2)}(\beta'). \quad (1.32)$$

Daß die Gleichgewichtswahrscheinlichkeiten der dritten Wahl die gleichen sind wie die der zweiten—nur mit einer renormierten Temperatur—, ist der Grund dafür, daß alle Ergebnisse, die bereits mit der zweiten Wahl (1.16) erarbeitet worden sind, auf den dritten Fall übertragen werden können.

## 1.2.2 Thermodynamische Stabilität

Ramshaw hat in [13] durch explizite Herleitung von Stabilitätskriterien gezeigt, daß Konkavität (Konvexität) der Entropie (als Funktion der Energie) für die erste Wahl der  $U_q$ -Nebenbedingung nicht ausreicht, um thermodynamische Stabilität zu garantieren, und daß die Entropie  $S_q$  daher im allgemeinen nicht thermodynamisch stabil ist. Dies hängt zum einen damit zusammen, daß sich die Energie bei der ersten Wahl der Erwartungswertbildung additiv verhält, während die Entropie dies nicht tut, zum anderen damit, daß die Tsallis-Entropie  $S_q^T$  in einem einfachen Zusammenhang mit der Rényi-Entropie  $S_q^R$  steht,

$$S_q^R = \frac{1}{1-q} \ln [1 + (1-q)S_q^T],$$

deren instabiles Verhalten [15] auf  $S_q^T$  zurückwirkt.

Für die zweite Wahl, die ja als Konsequenz der Erwartungswertbildung durch Gewichtung mit  $p_i^q$  eine Nicht-Additivität der Energie aufweist, wurde gezeigt (Tsallis [14]), daß die thermodynamischen Antwortfunktionen, insbesondere die mit der inneren Energie zusammenhängende spezifische Wärme  $C_q/q$ , für alle

Werte von  $q$  positiv und damit entsprechende thermodynamische Systeme stabil sind.

Für die dritte Wahl ist ein allgemeiner Beweis der Stabilität bisher nicht gelungen. Es ist jedoch von da Silva et al. [16] gezeigt worden, daß für  $q \notin [0, 1[$  die spezifische Wärme die folgende Bedingung erfüllt:

$$\frac{C_q}{T} = -\frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2} \geq 0 \quad \text{für } q \geq 1 \quad (\leq 0 \text{ für } q < 0). \quad (1.33)$$

Diese Gleichung zeigt, daß thermodynamische Stabilität dann gegeben ist, wenn die freie Energie  $F_q$  eine konkave (für  $q \geq 1$ ) bzw. konvexe (für  $q < 0$ ) Funktion der Temperatur ist. Auf jeden Fall gilt:

$$\frac{C_q}{q} \geq 0 \quad \text{für } q \notin [0, 1[.$$

Lima und Penna [17] haben durch gewissenhafte Untersuchung des Verhaltens statistischer Systeme im Bereich  $q \in ]0, 1[$  die Ursachen der auftretenden instabilen Zustände klassifiziert und eine Möglichkeit zur Wiederherstellung der Stabilität aufgezeigt:

Bei der tatsächlichen Berechnung statistischer Systeme kann man sich—wie im vorangegangenen Abschnitt erwähnt—entweder der Iterationsmethode oder der  $\beta-\beta'$ -Transformation bedienen. Die iterative Lösung funktioniert wie vorher beschrieben, für die Transformation wird folgendes Rezept vorgeschlagen:

- (1) Berechne die Größen  $y_i(\beta') = 1 - (1 - q)\beta' \varepsilon_i$   $(i = 1, \dots, W)$ .
- (2) Wenn  $y_i(\beta') < 0$ , dann  $y_i(\beta') = 0$ .
- (3) Berechne  $Z'_q(\beta') = \sum_{i=1}^W y_i(\beta')^{\frac{1}{1-q}}$ .
- (4) Berechne  $p_i(\beta') = y_i(\beta')^{\frac{1}{1-q}} / Z'_q(\beta')$ .
- (5) Berechne  $U_q(\beta')$  und andere thermodynamische Größen nach Gleichung (1.20).
- (6) Bestimme  $\beta(\beta')$  mittels Gleichung (1.30).

Der notwendige Cut-off in Schritt (2) stellt sicher, daß alle Wahrscheinlichkeiten nicht-negativ sind.

In [17] und auch schon in [3] werden beide Methoden, sowohl Iteration als auch  $\beta-\beta'$ -Transformation, am Beispiel eines Systems mit diskretem Spektrum  $\varepsilon_n = n\varepsilon$  mit  $\varepsilon > 0$  und  $n = 0, \dots, N$  demonstriert. Hier wird jedoch im Hinblick auf spätere Verwendbarkeit das Ising-Modell in einer Dimension als Anschauungsobjekt herangezogen.

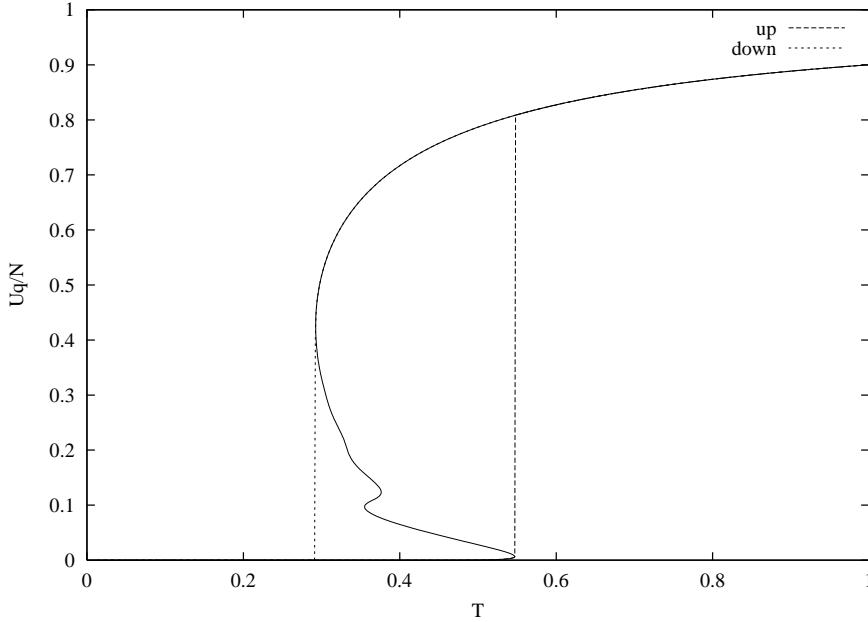


Abb. 1.3: Innere Energie  $U_q/N$  für eine Kette von  $N = 32$  Ising–Spins bei  $q = 0.9$ :  $\beta-\beta'$ –Transformation (durchgezogene Linie), iterative Berechnung ausgehend von hohen Temperaturen (kurze Striche) bzw. niedrigen Temperaturen (lange Striche).

Abbildung 1.3 zeigt die innere Energie für eine Kette von  $N = 32$  Ising–Spins bei einem  $q$ –Wert von  $q = 0.9$ , wobei die durchgezogene Kurve mittels  $\beta-\beta'$ –Transformation und die beiden gestrichelten Kurven durch Iteration beginnend bei hohen (kurze Striche) bzw. niedrigen (lange Striche) Temperaturen gewonnen wurden.

Man erkennt, daß die iterative Rechnung Diskontinuitäten in der inneren Energie produziert (die auch noch vom Iterationsanfang abhängen), während bei der  $\beta-\beta'$ –Transformation unphysikalische Mehrdeutigkeiten in der  $U_q$ – $T$ –Beziehung auftauchen. All diese Beobachtungen weisen darauf hin, daß das System instabil ist.

Laut Gleichung (1.33) ist für thermodynamische Stabilität im Bereich  $q \in ]0, 1[$  zu fordern, daß die freie Energie  $F_q$  eine konkave Funktion der Temperatur ist. In Abbildung 1.4 ist daher für das betrachtete System die freie Energie gegen die Temperatur aufgetragen.

Man sieht, daß die iterative Methode einen Sprung in der freien Energie ergibt; diese Sprünge tauchen je nach Anfangsbedingung bei unterschiedlichen Temperaturen auf. Ursache hierfür ist die Eigenschaft der Iteration einer nichtlinearen Gleichung, bei mehreren Lösungen immer zur nächsten zu tendieren. Um Stabilität des thermodynamischen Systems zu garantieren, müssen die Sprünge in

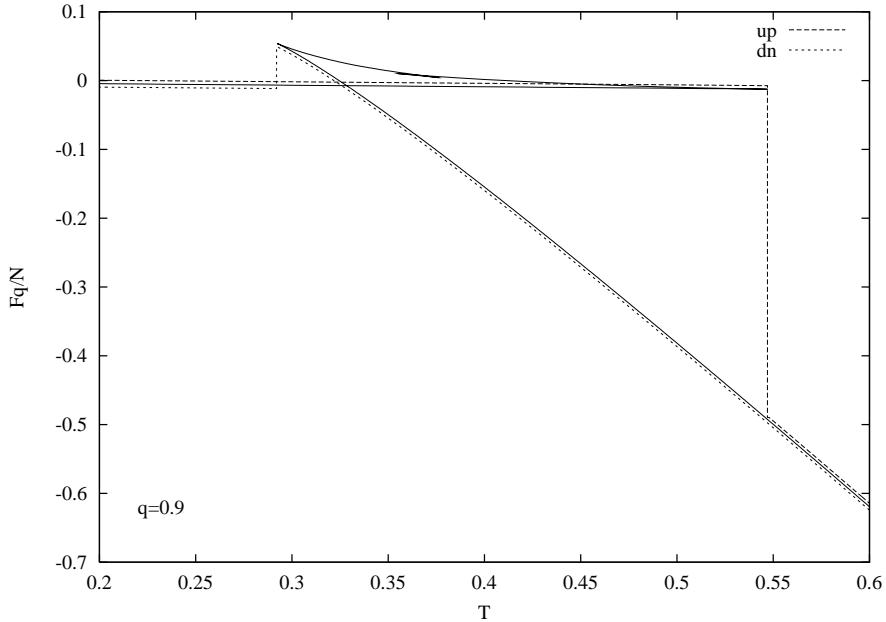


Abb. 1.4: Freie Energie  $F_q/N$  für eine Kette von  $N = 32$  Ising-Spins:  $\beta-\beta'$ -Transformation (durchgezogene Linie), iterative Berechnung ausgehend von hohen Temperaturen (kurze Striche) bzw. niedrigen Temperaturen (lange Striche). Die Kurven sind zur besseren Unterscheidung leicht vertikal verschoben.

der freien Energie entfernt werden, da diese nicht diskontinuierlich sein darf. Das Vorgehen ist also dieses: Man findet zunächst (durch Wahl unterschiedlicher Anfangsbedingungen) alle Lösungen für  $F_q(T)$  und wählt dann immer diejenige mit der niedrigsten freien Energie. Die Zustände, die nur über einen der zwei Wege in Abb. 1.4 erreicht werden, werden als metastabile Zustände angesehen. Für das hier betrachtete System ist es einfach, alle Lösungen zu finden, bei komplizierteren Systemen kann sich das jedoch als praktisch unmöglich erweisen. Es stellt sich allerdings heraus, daß das korrekte thermodynamische Verhalten viel einfacher aus der  $\beta-\beta'$ -Transformation erhalten werden kann.

Die Kurve für die freie Energie zeigt bei der Lösung durch  $\beta-\beta'$ -Transformation eine geschlossene Schleife. Die gekrümmte Linie kann schon aus Gründen der Konvexität keinen physikalisch sinnvollen Zustand repräsentieren und muß damit ausgeschlossen werden. Die Zustände, die nach Entfernung der gekrümmten Linie übrig bleiben, sind dieselben metastabilen Zustände, die auch bei der iterativen Lösung auftreten. Hier wird wieder jeweils der Zustand ausgewählt, dessen freie Energie am niedrigsten ist (vgl. [60]).

Lima et al. haben also gezeigt, daß für  $q \in ]0, 1[$  tatsächlich Instabilitäten auftreten können und daß sie durch Betrachtung der freien Energie und Entfernung von unphysikalischen und metastabilen Zuständen zu beseitigen sind. Obwohl kein allgemeiner Beweis gelungen ist, scheinen die thermodynamischen Systeme jedoch nach den beschriebenen Eingriffen stabil zu sein.

# Kapitel 2

## Monte–Carlo–Methoden

Nur wenige statistische Systeme wie das Ising–Modell in einer und in zwei Dimensionen sind analytisch exakt lösbar. Eine vielseitig einsetzbare Methode zur Lösung von Problemen (nicht nur) der statistischen Physik ist die Monte–Carlo–Methode. Während für den extensiven Grenzfall der verallgemeinerten Tsallis–Statistik (den Boltzmann–Gibbs–Grenzfall) eine Reihe verschiedener und bewährter Algorithmen zur Verfügung steht, müssen für den nicht–extensiven Fall Modifikationen bestehender Algorithmen vorgenommen oder neue Methoden erarbeitet werden.

Die Methoden, die zur Berechnung statistischer Systeme für  $q \neq 1$  bisher benutzt worden sind, lassen sich unterscheiden in solche, bei denen für jeden Wert der Temperatur  $T$  und des Parameters  $q$  eine neue Simulation durchgeführt werden muß, und solche, bei denen eine einzige Rechnung ausreicht, um thermodynamische Erwartungswerte für den gesamten physikalisch interessanten Temperaturbereich und für alle  $q$  zu erhalten. Eine Zwischenstellung nehmen Methoden ein, bei denen Ergebnisse, die für eine bestimmte Temperatur  $T_0$  erhalten worden sind, durch Neugewichtung der Daten der Simulation auf einen gewissen Temperaturbereich um die Simulationstemperatur herum ausgedehnt werden können. Die Methoden, die heute Anwendung finden, werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

### 2.1 Metropolis–artige Methoden

Die naheliegendste Methode, ein statistisches System durch Monte–Carlo–Simulation zu untersuchen, besteht in der Verwendung des Metropolis– oder des Wärmebadalgorithmus (siehe z.B. [63]). Beim Metropolis–Algorithmus wird bei fester Temperatur zunächst die Energie des Systems in der gegebenen Konfiguration  $X_{\text{alt}}$  berechnet. Dann wird nach einem geeignet gewählten Konzept, das die Bedingungen (i) Ergodizität und (ii) Mikroreversibilität erfüllt, eine neue Konfiguration  $X_{\text{neu}}$  erzeugt, deren Energie berechnet und die neue Konfiguration mit

der Wahrscheinlichkeit

$$p = \min \left[ 1, \frac{p(X_{\text{neu}})}{p(X_{\text{alt}})} \right] \stackrel{(\text{BG})}{=} \min [1, \exp\{-\beta(E(X_{\text{neu}}) - E(X_{\text{alt}}))\}] \quad (2.1)$$

akzeptiert. Das zweite Gleichheitszeichen der obigen Gleichung gilt für den BG-Fall, d.h. wenn man für die Wahrscheinlichkeiten  $p(X)$  die Boltzmann–Gibbs–Wahrscheinlichkeiten  $p^{\text{BG}} \sim e^{-\beta E(X)}$  einsetzt.

### 2.1.1 Verallgemeinertes Importance Sampling: Die AS–Methode

Einer der ersten Versuche einer Verallgemeinerung der Metropolis–Akzeptanzwahrscheinlichkeit (2.1) auf den Fall der Tsallis–Statistik wurde von Penna [22] zur Lösung des Traveling Salesman–Problems (TSP) unternommen. Seine Verallgemeinerung besteht in der Einführung der folgenden Akzeptanzwahrscheinlichkeit:

$$p^{\text{TSP}} = \min [1, (1 - (1 - q)\beta\Delta E)^{1/(1-q)}] \quad (2.2)$$

mit  $\Delta E = E(X_{\text{neu}}) - E(X_{\text{alt}})$ .

Diese Wahl stellte sich zwar als nützlich für das betrachtete Problem (TSP) heraus, hat jedoch zwei unangenehme Eigenschaften, die der Verwendung zur Untersuchung statistischer Systeme in der Tsallis–Statistik im Wege stehen [23]:

- (i) Das Akzeptanz–Kriterium (2.2) erfüllt nicht die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts und
- (ii) Die Akzeptanz (2.2) konvergiert nicht gegen die Tsallis–Gleichgewichtsverteilung.

Eine Weiterentwicklung stellt die Methode von Andricioaei und Straub [23, 24] dar, die AS–Methode. Diese basiert auf der verallgemeinerten Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$p^{\text{AS}} = \min \left[ 1, \left( \frac{p(X_{\text{neu}})}{p(X_{\text{alt}})} \right)^q \right]. \quad (2.3)$$

Bei Verwendung der Tsallis–Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.18) lässt sich diese Gleichung schreiben als

$$p^{\text{AS}} = \min \left[ 1, \left( \frac{1 - (1 - q)\beta E(X_{\text{neu}})}{1 - (1 - q)\beta E(X_{\text{alt}})} \right)^{q/(1-q)} \right]. \quad (2.4)$$

Diese Wahrscheinlichkeit erfüllt die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts und konvergiert gegen die Tsallis–Verteilung (1.18).

Da die heute gebräuchliche Tsallis–Verteilung die in Gleichung (1.22) gegebene (dritte) ist, die AS–Methode aber mit der zweiten arbeitet, gibt es nun zwei Möglichkeiten: Entweder man betrachtet wegen der Gültigkeit von Gl. (1.32) die interessierenden thermodynamischen Größen in Abhängigkeit der (inversen) Pseudo–Temperatur  $\beta'$  oder man findet eine Möglichkeit, von  $\beta'$  auf  $\beta$  zu transformieren. Dies gelingt mit der im übernächsten Abschnitt vorgestellten Salazar–Methode.

### 2.1.2 Daten–Recycling: Die Histogramm–Methode

Der rechnerische Aufwand für die Untersuchung statistischer Systeme in der Tsallis–Statistik mit der AS– oder jeder anderen Metropolis–artigen Methode ist sehr hoch, da man für gewöhnlich nicht nur für jede Temperatur  $T'$  eine neue Rechnung durchführen muß, sondern außerdem für jeden Wert des Parameters  $q$ . Eine Methode, die Daten wiederzuverwerten, die für eine feste Temperatur  $T_0$  und einen bestimmten  $q$ –Wert erhalten worden sind, ist die Histogramm–Methode [25, 63].

Da die Methode für den Boltzmann–Gibbs–Fall eingeführt wurde, wird sie zunächst für diesen Fall vorgestellt und dann auf die Tsallis–Statistik übertragen. Den Erwartungswert einer Observablen  $\mathcal{O}$  berechnet man aus einer Menge von  $N$  Meßwerten  $O_i$  gemäß der Gleichung [63]

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N = \frac{\sum_{i=1}^N O_i p_i^{-1} e^{-\beta E_i}}{\sum_{j=1}^N p_j^{-1} e^{-\beta E_j}}.$$

Im allgemeinen werden die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$ , mit denen die einzelnen Zustände des Systems gewichtet werden, so gewählt, daß sie gerade die Boltzmann–Gewichte für die Temperatur sind, an der man interessiert ist. Wählt man hingegen die  $p_i$  als die Boltzmann–Gewichte für eine andere Temperatur  $\beta_0 = 1/T_0$  ( $k = 1$ ), die nahe bei  $\beta$  liegt, aber von  $\beta$  verschieden ist, so wird aus der obigen Gleichung

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N(\beta) = \frac{\sum_{i=1}^N O_i e^{-(\beta-\beta_0)E_i}}{\sum_{j=1}^N e^{-(\beta-\beta_0)E_j}}. \quad (2.5)$$

Es ist mit dieser Formel also möglich, eine Reihe von Messungen  $O_i$  der Observablen  $\mathcal{O}$  während einer Monte–Carlo–Simulation bei der Temperatur  $\beta_0$  vorzunehmen und daraus (nach Beendigung der Messung) einen Erwartungswert für  $\mathcal{O}$  bei einer anderen Temperatur  $\beta$  zu erhalten.

Der Name „Histogramm–Methode“ ergibt sich aus der tatsächlichen Implementierung der Methode: Während der Messung werden zwei Histogramme  $O(E)$  und  $N(E)$  angelegt.  $N(E, \beta_0)$  gibt an, wie oft der Energiewert  $E$  während der Simulation bei einer Temperatur  $\beta_0$  vom System angenommen wird, und die Größe

$\langle \mathcal{O} \rangle_E = \mathcal{O}(E)/N(E)$  ist eine Approximation des mikrokanonischen Mittelwerts der Observablen  $\mathcal{O}$  bei der Systemenergie  $E$ . Gleichung (2.5) wird damit zu

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N(\beta) = \frac{\sum_E \langle \mathcal{O} \rangle_E N(E, \beta_0) e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E N(E, \beta_0) e^{-(\beta-\beta_0)E}}. \quad (2.6)$$

Die Verallgemeinerung auf die Tsallis–Statistik, d.h. auf den Fall  $q \neq 1$  erfolgt völlig geradlinig [26]:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_q(T') = \frac{\sum_E \langle \mathcal{O} \rangle_E N(E, T'_0) \left[ \frac{1-(1-q)E/T'}{1-(1-q)E/T'_0} \right]^{q/(1-q)}}{\sum_E N(E, T'_0) \left[ \frac{1-(1-q)E/T'}{1-(1-q)E/T'_0} \right]^{q/(1-q)}}. \quad (2.7)$$

Der Temperaturbereich, in dem mit der Histogramm–Methode mit geringem Fehler gearbeitet werden kann, hängt natürlich vom Histogramm  $N(E, T_0)$  ab.

### 2.1.3 Numerische $\beta$ – $\beta'$ –Transformation: Die Salazar–Methode

Mit der AS–Methode können thermodynamische Erwartungswerte nur in Abhängigkeit von der (inversen) Pseudo–Temperatur  $\beta'$  berechnet werden. Die Möglichkeit einer numerischen  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation ist mit der Salazar–Methode gegeben [26].

Diese Methode besteht darin, in einem ersten Schritt Monte–Carlo–Simulationen unter Benutzung der AS–Akzeptanzwahrscheinlichkeit bei festen Werten von  $T'$  durchzuführen und anschließend die zugehörige Temperatur  $T$  auf die folgende Weise zu bestimmen: Aus den Gleichungen (1.30) und (1.1) erhält man zunächst

$$T = \frac{T' - (1-q)U_q(T')}{1 + (1-q)S_q(T')}. \quad (2.8)$$

Die Energie  $U_q(T')$  wird während der Simulation berechnet, die Entropie  $S_q(T')$  bestimmt man durch Ausnutzung der Relation (1.25)

$$\frac{\partial S_q}{\partial U_q} = \frac{1}{T} \stackrel{(2.8)}{=} \frac{1 + (1-q)S_q}{T' - (1-q)U_q}. \quad (2.9)$$

Durch Trennung der Variablen und eine anschließende Integration zwischen zwei Gleichgewichtszuständen mit Temperaturen  $T'_0$  und  $T'$

$$\int_{S_q(T'_0)}^{S_q(T')} \frac{dS_q}{1 + (1-q)S_q} = \int_{U_q(T'_0)}^{U_q(T')} \frac{dU_q}{T' - (1-q)U_q} \quad (2.10)$$

erhält man schließlich

$$T(T') = \frac{T' - (1-q)U_q(T')}{1 + (1-q)S_q(T'_0)} \exp \left\{ (q-1) \int_{U_q(T'_0)}^{U_q(T')} \frac{dU_q}{T' - (1-q)U_q} \right\}. \quad (2.11)$$

Technisch funktioniert die Methode also wie folgt: Um die zu einem bestimmten Wert des Parameters  $T'$  gehörende Temperatur  $T$  zu berechnen, führt man Monte-Carlo-Simulationen unter Benutzung der AS-Methode bei festen Werten von  $T'$  durch, beginnend bei einem Anfangswert  $T'_0$  bis zum gewünschten Wert  $T'$ . Dabei bestimmt man die Werte  $U_q(T')$  und berechnet dann das Integral in Gleichung (2.11) numerisch. Der Anfangswert  $T'_0$  ist dabei so zu wählen, daß die Entropie bei diesem Wert des Parameters  $T'$  bekannt ist. In den meisten Fällen bieten sich dabei die Grenzfälle sehr hoher oder sehr niedriger Temperatur an. Um den Fehler bei der numerischen Berechnung des Integrals (z.B. einfach mit der Trapez- oder der Simpsonschen Regel) möglichst niedrig zu halten, ist es sinnvoll, durch Benutzung der zuvor beschriebenen Histogramm-Methode ausgehend von vergleichsweise wenigen Stützpunkten die innere Energie  $U_q(T')$  in sehr kleinen Temperaturschritten zu berechnen.

## 2.2 Bestimmung der Zustandsdichte

Die bisher vorgestellten Methoden haben alle den erheblichen Nachteil, daß—wenn auch (mit der Histogramm-Methode) nicht mehr für jeden einzelnen Temperaturwert eine neue Simulation durchgeführt werden muß—doch jeder neue Wert des Parameters  $q$  eine neue Rechnung erfordert. Abhilfe können hier Methoden schaffen, die die Eigenschaften des interessierenden Systems unabhängig vom  $q$ -Wert untersuchen. Im Konkreten sind das Methoden, die es gestatten, die Zustandsdichte  $g(E)$  eines statistischen Systems und die relevanten Observablen  $O(E)$  zu bestimmen.

### 2.2.1 Mikrokanonische Methoden: Creutz und HOW

Während die Anzahl der mikroskopischen Konfigurationen eines statistischen Systems im allgemeinen sehr groß ist, ist der Bereich der möglichen Energiewerte normalerweise sehr viel kleiner. So ist beispielsweise die Anzahl der Konfigurationen eines eindimensionalen Ising-Modells mit  $N$  Spins  $2^N$ , die Anzahl der möglichen Energiewerte hingegen nur  $N/2 + 1$ . Bei Kenntnis der Zustandsdichte  $g(E)$  des Systems, also der Anzahl der möglichen Systemkonfigurationen mit einer festen Energie  $E$ , läßt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.31) umschreiben in die Form

$$p(E) = \frac{[1 - (1-q)\beta'E]^{1/(1-q)}}{\sum_E g(E) [1 - (1-q)\beta'E]^{1/(1-q)}}. \quad (2.12)$$

Wenn man die Zustandsdichte  $g(E)$  auf irgendeine Weise bestimmt hat, kann jede beliebige Statistik auf das System angewandt werden, sei es Boltzmann–Gibbs-, Tsallis– oder eine andere verallgemeinerte Statistik. Darüber hinaus sind Rechnungen für beliebige Werte von  $T$  und  $q$  ohne großen Aufwand möglich.

Die naheliegendste Methode zur Bestimmung von  $g(E)$  wäre, verschiedene zufällige Systemkonfigurationen zu erzeugen und zu zählen, wie häufig Konfigurationen mit Energie  $E$  auftauchen. Dieses naive Vorgehen führt jedoch nicht zum Ziel, weil die Zustandsdichte zu viele Größenordnungen überspannt und es nicht möglich ist, in einem einzigen Lauf ein Histogramm zu erzeugen, das den gesamten Energiebereich überspannt. Also ist es sinnvoll, den gesamten Energiebereich in kleinere Intervalle aufzuteilen und für jedes Intervall eine eigene Simulation durchzuführen. Dabei gibt es im Grunde zwei verschiedene Möglichkeiten: Entweder man legt die Grenzen der Energieintervalle von vornherein fest und erlaubt nur Konfigurationen, deren Energien innerhalb der jeweiligen Intervalle liegen, oder man bedient sich der im folgenden beschriebenen Methode von Creutz [27].

Die Creutz–Methode führt als zusätzlichen Freiheitsgrad des Systems einen Dämon ein, der mit einem Sack ausgerüstet durch das System wandert und Energie überträgt, indem er dynamische Variable verändert. Dabei soll jedoch die Gesamtenergie von statistischem System+Dämon konstant bleiben. Im Fall eines Ising–Systems würde der Dämon zufällig oder sequentiell durch das Gitter streifen und Spins umkehren. Wenn die Systemenergie sich dabei verringert, packt er den Differenzbetrag in seinen Sack; muß Energie aufgewendet werden, um einen Spin umzukehren, d.h. würde sich dadurch die Systemenergie erhöhen, kann er den Spin nur umkehren, wenn er den Differenzbetrag an Energie in seinem Sack verfügbar hat.

Auf diese Weise erhält man Systemkonfigurationen mit Energien in einem Bereich, dessen Umfang davon abhängt, in welchem Zustand sich das System zu Beginn der Simulation befunden hat, und wieviel Energie der Dämon zu Beginn in seinem Beutel hatte. Durch Sammeln eines Histogramms  $N(E)$  kann man so die Verhältnisse der Anzahlen von Zuständen mit benachbarten Energien bestimmen. Kennt man nun noch die Entartung eines der erhaltenen Zustände, kann man aus diesem Wert und den gemessenen Verhältnissen alle anderen Werte bestimmen. Im Falle eines Ising–Modells wird man die Kenntnis ausnutzen, daß der Grundzustand zweifach entartet ist.

Ähnlich arbeitet die "Histogram by Overlapping Windows"–Methode (HOW) [28, 29]. Der Unterschied zur Creutz–Methode besteht darin, daß der Energiebereich schon vor Beginn der Simulation in überlappende Intervalle (windows) aufgeteilt wird und nur Systemkonfigurationen zugelassen werden, deren Energien in den jeweils aktuellen Intervallen liegen. Man könnte also Intervalle in der folgenden Weise bilden:  $\{E_0, E_1, E_2, E_3\}$ ,  $\{E_3, E_4, E_5, E_6\}$ , ... Jedes Intervall besteht aus vier aufeinanderfolgenden Energiewerten und der letzte Wert des einen

Intervalls ist der erste des nächsten.

Nun nimmt man ein Intervall und erzeugt eine Systemkonfiguration, deren Energie in diesem Intervall liegt. In dem so präparierten System erzeugt man neue Konfigurationen (im Fall eines Ising–Modells beispielsweise durch Umklappen von einzelnen Spins) und akzeptiert die Änderungen nur, wenn die Energie des Systems dann noch innerhalb des Intervalls liegt. Wie bei der Creutz–Methode sammelt man die Anzahlen von Konfigurationen mit Energie  $E$ , die man auf diese Weise erzeugt, in einem Histogramm  $N(E)$ . Hat man hinreichend viele Konfigurationen gezählt, geht man über zum nächsten Energieintervall. Dadurch, daß die Intervalle sich alle überlappen, kann man wieder nur mit der Kenntnis des Entartungsgrades des Grundzustands die Zustandsdichte des Systems bestimmen. Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten (2.12) reicht es sogar aus, nur die Verhältnisse der einzelnen  $g(E)$  zu kennen.

### 2.2.2 Die Broad–Histogram–Methode (BHMC)

Die Broad–Histogram–Methode [30, 31, 32, 33, 34, 35] gestattet die Bestimmung der Zustandsdichte  $g(E)$  eines statistischen Systems ausgehend von mikrokanonischen Erwartungswerten gewisser makroskopischer Größen, die im folgenden eingeführt werden. Zunächst wird für das zu untersuchende System ein Protokoll erlaubter Zustandsänderungen (Züge) gewählt. Für ein Ising–System könnte man beispielsweise das Umklappen einzelner Spins oder von Clustern aus  $n$  Spins wählen. Die einzige Bedingung, die an das gewählte Protokoll gestellt wird, ist, daß ein Zug nur dann erlaubt sein darf, wenn auch der umgekehrte Zug erlaubt ist, d.h. das Protokoll muß mikroreversibel sein.

Beginnend bei einem beliebigen Zustand  $X$  mit Energie  $E$  zählt die Zahl  $N_X(E \rightarrow E + \Delta E)$  alle erlaubten Züge  $X \rightarrow X'$ , die die Energie um den festen Betrag  $\Delta E \geq 0$  erhöhen. Im Falle des Ising–Modells würde man (je nach gewähltem Protokoll) jeden einzelnen Spin oder jeden möglichen Cluster von  $n$  Spins umklappen und prüfen, ob sich die Energie um den entsprechenden Betrag verändert. Betrachtet man alle  $g(E)$  Zustände mit Energie  $E$ , ist die Gesamtzahl möglicher Züge, die die Energie des Systems von  $E$  auf  $E + \Delta E$  erhöhen, gegeben durch

$$\sum_{X(E)} N_X(E \rightarrow E + \Delta E) = g(E) \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle,$$

wobei  $\langle N(E \rightarrow \dots) \rangle$  der mikrokanonische Erwartungswert von  $N(E \rightarrow E + \Delta E)$  bei der Energie  $E$  ist. Analog gibt  $N_X(E \rightarrow E - \Delta E)$  die Zahl der erlaubten Züge an, die einen Zustand  $X$  mit Energie  $E$  in einen Zustand  $X'$  mit Energie  $E - \Delta E$  überführen.

Die Anzahl der möglichen Züge von einem Zustand  $X'$  mit Energie  $E + \Delta E$  zu einem Zustand  $X$  mit Energie  $E$  ist

$$\sum_{X'(E+\Delta E)} N_{X'}(E + \Delta E \rightarrow E) = g(E + \Delta E) \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle.$$

Da nach Voraussetzung alle Züge mikroreversibel sind, muß die Gesamtzahl der erlaubten Züge von  $E$  nach  $E + \Delta E$  gleich der Gesamtzahl der erlaubten Züge von  $E + \Delta E$  nach  $E$  sein, es muß also gelten

$$g(E) \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle = g(E + \Delta E) \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle. \quad (2.13)$$

Dies ist die zentrale Gleichung der Broad–Histogram–Methode. Sie erlaubt es, wenn man auf irgendeine Weise die Größen  $\langle N(\dots) \rangle$  bestimmt hat, die Zustandsdichte des betrachteten Systems zu berechnen—vorausgesetzt, man kennt zusätzlich den Entartungsgrad des Grundzustands  $g(E_0)$ . Es ist aber immer möglich, die Verhältnisse  $g(E)/g(E_0)$  zu bestimmen.

Um die benötigten mikrokanonischen Erwartungswerte zu berechnen, sind verschiedene Methoden vorgeschlagen worden. So benutzen beispielsweise Oliveira et al. in ihrem ersten Artikel zu BHMC [30] einen Random Walk auf der Energieachse. Das Modellsystem, an dem die Methode das erste Mal getestet wurde, war das Ising–Modell und die Random–Walk–Dynamik ist die folgende: Wähle einen zufälligen Gitterplatz und berechne die Energieänderung  $\Delta E$ , die eintritt, wenn der Spin umgeklappt wird. Wenn der neue Zustand eine niedrigere Energie hat, wird der Zug akzeptiert. Wird durch den Zug die Energie jedoch erhöht, wird er nur mit der Wahrscheinlichkeit

$$p = \min \left[ 1, \frac{N_X(E \rightarrow E - \Delta E)}{N_X(E \rightarrow E + \Delta E)} \right]$$

ausgeführt. Sollte sich die Energie durch den Zug nicht ändern, ist also  $\Delta E = 0$ , so wird der Zug mit einer festen Wahrscheinlichkeit akzeptiert.

Diese Dynamik wirft mehrere Probleme auf. Zunächst einmal kann sich ein System, wenn es einmal in den Grundzustand übergegangen ist, nicht mehr aus diesem befreien. Dieses (kleine) Problem kann dadurch behoben werden, daß man die ad hoc–Regel einführt, Zustandsänderungen aus dem Grundzustand immer zu akzeptieren.

Ein schwerwiegenderes Problem stellt die Tatsache dar, daß—anders als bei kanonischen Simulationen—große Energiesprünge auftreten und daher aufeinanderfolgende Zustände stark korreliert sein können. Die Lösung in diesem Fall besteht darin, den jeweils aktuellen Zustand zuerst zu thermalisieren, bevor dessen Beitrag zu den Mittelwerten berechnet wird [32]. Das kann dadurch geschehen, daß man einige kanonische Sweeps bei einer Temperatur  $T(E)$  durchführt, die zu dem jeweiligen Zustand gehört. Ein ungefährer Wert für diese Temperatur läßt sich mit Hilfe der Broad–Histogram–Gleichung (2.13) angeben als

$$\begin{aligned} \frac{1}{T(E)} = \frac{d \ln g(E)}{dE} &= \frac{\ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)}{\Delta E} \\ &= \frac{1}{\Delta E} \ln \frac{\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle}{\langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Der größte Nachteil dieser Random-Walk-Dynamik besteht jedoch darin, daß sie—wie Wang in [33] gezeigt hat—nicht die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erfüllt und daher keine richtigen mikrokanonischen Erwartungswerte liefert. Der Fehler, der durch diese Verletzung des detaillierten Gleichgewichts in die Rechnungen einfließt, nimmt jedoch mit steigender Systemgröße ab. Eine deutliche Verbesserung stellt die Wahl der Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$p = \min \left[ 1, \frac{\langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle}{\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle} \right] \quad (2.15)$$

dar, wobei  $\langle N(\dots) \rangle$  die Mittelwerte der bisher angesammelten Histogrammdaten sind.

Wang selber schlägt vor, zwei Simulationen durchzuführen, wobei in der ersten auf irgendeine Weise Schätzwerte für die Größen in (2.15) bestimmt werden, die dann in einer unabhängigen zweiten Simulation benutzt werden, um die Histogrammdaten zur Berechnung von  $g(E)$  zu erhalten.

Die Random-Walk-Dynamik stellt nur eine Möglichkeit dar, die nötigen mikrokanonischen Erwartungswerte in (2.13) zu bestimmen. Eine andere (naheliegende) Möglichkeit ist es, direkt die mikrokanonischen Methoden HOW oder die Creutzsche Energiebeutelmethode zu benutzen. Es kommt hierbei nur darauf an, hinreichend viele Meßwerte in jedem Energie-Kanal zu erhalten. Dazu könnte man auch (völlig unphysikalisch) eine Reihe von kanonischen Simulationen (z.B. mit Metropolis- oder Wärmebad-Algorithmus) bei verschiedenen Temperaturen durchführen, was jedoch wegen der stark um den Mittelwert  $E(T)$  konzentrierten kanonischen Energieverteilung wenig effektiv ist, da sehr viele einzelne Rechnungen nötig wären, um den gesamten Bereich möglicher Energien abzudecken.

In Abschnitt 3.1 werden Ergebnisse für die Random-Walk-Dynamik mit verschiedenen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten für Züge, die die Energie des Systems erhöhen, und für direkte mikrokanonische Simulation gegenübergestellt.

### BHMC für Systeme mit kontinuierlichem Energiespektrum

Muñoz und Herrmann haben die Broad-Histogram-Methode für den Fall eines Systems mit kontinuierlichem Energiespektrum, nämlich für das  $XY$ -Modell, erweitert [36, 37]. Die Hamilton-Funktion dieses Systems (ohne äußeres Feld) ist gegeben durch

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j),$$

wobei  $\theta_i$  der Winkel ist, den der Spin  $i$  mit einer vorgegebenen Achse einschließt, und die Summation  $\langle i,j \rangle$  über alle Paare benachbarter Gitterplätze läuft.

Da die BHMC-Relation (2.13)—wie Oliveira gezeigt hat [32]—für alle Systeme

exakt ist, stellt sich hier nur die Frage, wie man die Größen  $\langle N(\dots) \rangle$  in Gleichung (2.13) bestimmt, und welches Protokoll von Zügen man wählen kann, um diese Größen zu bestimmen.

Sie schlagen dazu das folgende Protokoll von Zustandsänderungen vor: Wähle zufällig einen Spin. Dessen Stellung sei charakterisiert durch den Winkel  $\theta_{\text{alt}}$  bezüglich einer festgelegten Achse. Wähle dann für diesen Spin einen neuen Winkel  $\theta_{\text{neu}} \in [-\pi, \pi]$ . Dieser neue Winkel ist eine Zufallsgröße mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_{\theta_{\text{neu}}}(\theta) = \begin{cases} 1/(2\pi) & \text{für } -\pi < \theta_{\text{neu}} < \pi \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.16)$$

Daher kann das Protokoll der zufälligen Zustandsänderungen durch Angabe der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für die neuen Werte der Systemvariablen gegeben werden.

Nun müssen für jede gegebene Konfiguration  $X$  mit Energie  $E_{\text{alt}}$  die Größen  $N_X(E \rightarrow E + \Delta E_{\text{fix}})$  und  $N_X(E \rightarrow E - \Delta E_{\text{fix}})$  geschätzt werden. Das stellt ein Problem dar, weil es eine überabzählbare Menge von Zuständen gibt, die mit dem gewählten Protokoll in einem Zug erreicht werden können. Da jedoch jede der möglichen neuen Konfigurationen eine wohldefinierte Energie  $E_{\text{neu}}$  hat und genau eine von ihnen zufällig gewählt wird, können  $E_{\text{neu}}$  und  $\Delta E \equiv E_{\text{neu}} - E_{\text{alt}}$  als Zufallsvariable gewählt werden. Daher werden die Größen  $N_X(\dots)$  wie folgt definiert:

$$N_X(E \rightarrow E + \Delta E_{\text{fix}}) \equiv f_{\Delta E}(\Delta E_{\text{fix}}),$$

$$N_X(E \rightarrow E - \Delta E_{\text{fix}}) \equiv f_{\Delta E}(-\Delta E_{\text{fix}}).$$

Das Problem besteht nun nur noch darin, für eine gegebene Konfiguration  $X_{\text{alt}}$  die Funktion  $f_{\Delta E}$  zu finden.

Wenn man nach dem gewählten Protokoll einen einzelnen Spin  $i$  dreht, ändern nur die Bindungen dieses Spins mit seinen nächsten Nachbarn  $\mathcal{N}(i)$  ihre Energiewerte. Man kann also  $\varepsilon_i$  als die Summe dieser Bindungsenergien definieren:

$$\varepsilon_i \equiv - \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \cos(\theta_i - \theta_j). \quad (2.17)$$

Wenn  $\theta_{i_{\text{alt}}}$  in  $\theta_{i_{\text{neu}}}$  übergeht, ändert  $\varepsilon_i$  seinen Wert von  $\varepsilon_{i_{\text{alt}}}$  in  $\varepsilon_{i_{\text{neu}}}$ , also ist  $\Delta E = \varepsilon_{i_{\text{neu}}} - \varepsilon_{i_{\text{alt}}}$  und  $\varepsilon_{i_{\text{neu}}}$  ist eine Funktion der Zufallsgröße  $\theta_{i_{\text{neu}}}$ .

Um  $\varepsilon_{i_{\text{neu}}}$  als Funktion von  $\theta_{i_{\text{neu}}}$  auszudrücken, kann Gleichung (2.17) umgeschrieben werden in die Form

$$\varepsilon_{i_{\text{neu}}} = A_i \cos(\theta_{i_{\text{neu}}} - \delta\theta_i)$$

mit den Abkürzungen

$$A_i \equiv \sqrt{\left( \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \cos \theta_j \right)^2 + \left( \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \sin \theta_j \right)^2},$$

$$\delta\theta_i \equiv \arctan \left( \frac{\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \sin \theta_j}{\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \cos \theta_j} \right) + \pi.$$

Wenn  $\theta_{i_{\text{neu}}}$  eine Zufallsvariable mit Wahrscheinlichkeitsdichte (2.16) ist, dann folgt für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Funktion  $\varepsilon_{i_{\text{neu}}}$  dieser Zufallsgröße [58]:

$$f_{\varepsilon_{i_{\text{neu}}}}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{A_i^2 - \varepsilon^2}} & \text{für } |\varepsilon| < A_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Daraus erhält man für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $f_{\Delta E}^i(\Delta E)$  von  $\Delta E$  bei Rotation des Spins  $i$  durch Einsetzen von  $\Delta E + \varepsilon_{i_{\text{alt}}}$ :

$$f_{\Delta E}^i(\Delta E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{A_i^2 - (\varepsilon_{i_{\text{alt}}} + \Delta E)^2}} & \text{für } |\Delta E + \varepsilon_{i_{\text{alt}}}| < A_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Da die Wahl des zu drehenden Spins zufällig und mit gleicher Wahrscheinlichkeit für alle  $N$  Spins erfolgt, ergibt sich schließlich durch Aufsummieren aller  $f_{\Delta E}^i(\Delta E)$  und Division durch die Anzahl der Spins:

$$N_X(E \rightarrow E + \Delta E_{\text{fix}}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_{\Delta E}^i(\Delta E_{\text{fix}}),$$

$$N_X(E \rightarrow E - \Delta E_{\text{fix}}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_{\Delta E}^i(-\Delta E_{\text{fix}}).$$



# Kapitel 3

## Das Ising–Modell in einer Dimension

Eines der ersten statistischen Systeme, das im Rahmen der Tsallis–Statistik untersucht worden ist [29, 38, 39, 40, 41], ist das Ising–Modell in einer Dimension. Dieses Modell eignet sich deshalb gut für einen ersten Test der im vorigen Kapitel eingeführten Monte–Carlo–Methoden, da es im BG–Grenzfall exakt lösbar ist und daher seine Eigenschaften gut bekannt sind.

Die Hamilton–Funktion einer Kette von  $N$  Ising–Spins mit periodischen Randbedingungen hat die Form

$$H = -J \left( \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - C \right),$$

wobei  $C$  eine Konstante zur Kalibrierung des Grundzustands ist. Wenn  $C$  nicht explizit gegeben ist, wird  $C = N$  angenommen. Die Kopplungskonstante  $J$  wird im folgenden auf  $J = 1$  gesetzt.

In einem ersten Abschnitt werden Ergebnisse für die verschiedenen Methoden des letzten Kapitels verglichen, darauf folgt ein Abschnitt mit einer genaueren Untersuchung der  $\beta-\beta'$ -Transformation, und schließlich folgt ein Vergleich der erhaltenen Ergebnisse mit den bereits vorliegenden Arbeiten.

### 3.1 Test der Monte–Carlo–Methoden

Das Energiespektrum und die Zustandsdichte  $g(E)$  eines statistischen Systems sind intrinsische Eigenschaften und hängen weder von der Wechselwirkung des Systems mit seiner Umgebung noch von der gewählten Statistik ab. Daher sind solche Methoden, die auf die näherungsweise Bestimmung der Zustandsdichte abzielen (beispielsweise die Broad–Histogram–Methode), so vielseitig einsetzbar.

Im Falle des Ising–Modells in einer Dimension ist das Energiespektrum bekannt und die Funktion  $g(E)$  kann analytisch berechnet werden. Damit hat man die

Möglichkeit, durch Modifikation des Rezeptes in Abschnitt 1.2.2 alle thermodynamischen Größen des Ising–Modells und ihr Temperaturverhalten exakt zu berechnen. Unter Verwendung der Zustandsdichte liest sich dieses Rezept dann

- (1) Bestimme  $y(E, \beta') = 1 - (1 - q) \beta' E$  für alle  $E$ .
- (2) Wenn  $y(E, \beta') < 0$ , dann  $y(E, \beta') = 0$ .
- (3) Berechne  $Z'_q(\beta') = \sum_E g(E) y(E, \beta')^{\frac{1}{1-q}}$ .
- (4) Berechne  $p(E, \beta') = y(E, \beta')^{\frac{1}{1-q}} / Z'_q(\beta')$ .
- (5) Berechne die innere Energie  $U_q(\beta')$  und andere thermodynamische Größen gemäß

$$\langle\langle \mathcal{O} \rangle\rangle_q(\beta') = \frac{\sum_E g(E) O(E) p^q(E, \beta')}{\sum_E g(E) p^q(E, \beta')}.$$

- (6) Bestimme  $\beta(\beta')$  gemäß der Gleichung

$$\beta(\beta') = \frac{\beta' \sum_E g(E) p^q(E, \beta')}{1 - (1 - q) \beta' U_q(\beta')}.$$

Die auf diese Weise berechneten Werte dienen als Referenz für die Bestimmung der Zuverlässigkeit der benutzten Monte–Carlo–Verfahren.

Die Zustandsdichte einer Kette von  $N = 2N'$  ( $N' \in \mathbb{N}$ ) Ising–Spins mit periodischen Randbedingungen und ohne äußeres Feld lässt sich wie folgt berechnen [42]:

$$\begin{aligned} g(E) &= \sum_{\{\sigma\}} \delta(E - H(\sigma)) \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{dt}{2\pi} e^{itE} \sum_{\{\sigma\}} e^{-itH(\sigma)}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

wobei  $\{\sigma\}$  die Menge aller möglichen Konfigurationen ist und die Delta–Funktion ersetzt wurde durch die Darstellung

$$\delta(E - H(\sigma)) = \int_0^{2\pi} \frac{dt}{2\pi} e^{it(E - H(\sigma))}.$$

Die Summe in Gleichung (3.1) ist gerade die Zustandssumme des Systems mit der Ersetzung  $\beta \rightarrow it$ . Diese ist bekannt und lässt sich schreiben als [59]

$$Z(\beta) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad \text{mit} \quad \lambda_{\pm} = e^{\beta} \pm e^{-\beta}.$$

Damit haben wir also zunächst

$$\begin{aligned}
 Z(it) &= \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} e^{itk} e^{-it(N-k)} [1 + (-1)^{N-k}] \\
 &= 2 \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ gerade}}}^N \binom{N}{k} e^{itk} e^{-it(N-k)} \\
 &= 2 \sum_{k=0}^{N'} \binom{2N'}{2k} e^{2itk} e^{-2it(N'-k)} \\
 &= 2 e^{-2itN'} \sum_{k=0}^{N'} \binom{2N'}{2k} e^{4itk}.
 \end{aligned}$$

In (3.1) eingesetzt, folgt für die Zustandsdichte  $g(E)$  schließlich

$$\begin{aligned}
 g(E) &= 2 \sum_{k=0}^{N'} \binom{2N'}{2k} \int_0^{2\pi} \frac{dt}{2\pi} e^{it(4k+E-2N')} \\
 &= 2 \sum_{k=0}^{N'} \binom{2N'}{2k} \delta(4k + E - 2N') \\
 &= 2 \left( \binom{N}{\frac{N-E}{2}} \right).
 \end{aligned}$$

Der Test der im vorigen Kapitel vorgestellten Monte-Carlo-Methoden beginnt mit der AS-Methode.

Abbildung 3.1 zeigt die innere Energie  $U_q/N$  einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins (mit periodischen Randbedingungen, d.h.  $s_{N+1} = s_1$ , und einem Energie-Offset von  $C = N$ , also ausschließlich nicht-negativen Energiewerten) in Abhängigkeit von der Pseudo-Temperatur  $T'$  für verschiedene Werte des Parameters  $q$ . Die durchgezogenen Linien wurden mit der Histogramm-Methode aus den Daten der AS-Simulationen interpoliert.

Die AS-Werte können mit exakten Ergebnissen nur in Abhängigkeit von  $T'$  verglichen werden, da der Ausdruck für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit nach Andricioaei und Straub unter Benutzung der zweiten Version der Tsallis-Verteilung entwickelt wurde. Nach Abschnitt 1.2.1 sind jedoch  $p_i^{(2)}(\beta')$  und  $p_i^{(3)}(\beta')$  äquivalent.

Abbildung 3.2 vergleicht für zwei exemplarisch herausgegriffene  $q$ -Werte (einer aus dem sub- und einer aus dem superextensiven Bereich) die nach unterschiedlichen Methoden berechneten inneren Energien des Systems. Die dargestellten Daten sind AS-Punkte ( $\square$ ), exakt berechnete ( $\blacksquare$ ) und BHMC(Creutz)-Werte (durchgezogene Linien).

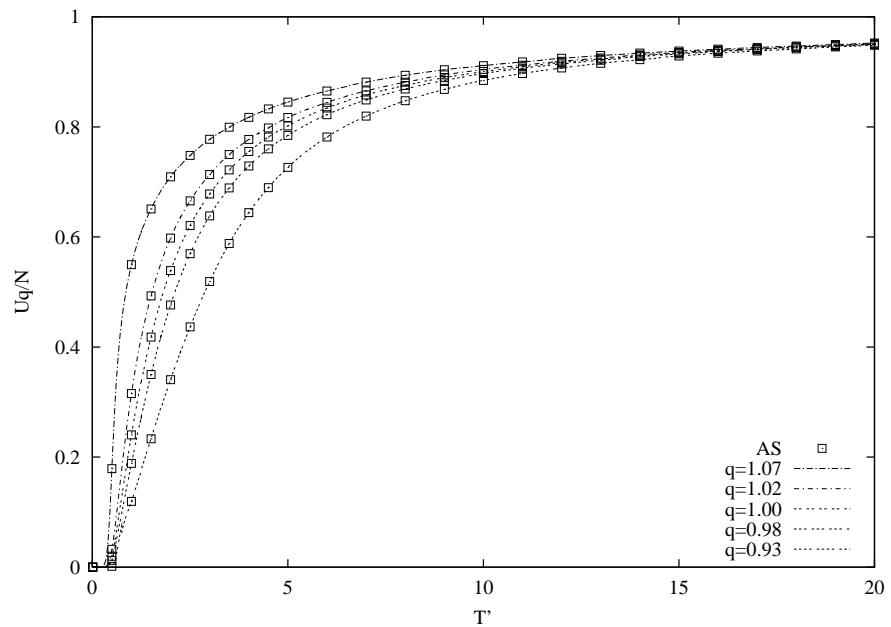


Abb. 3.1: Innere Energie einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins mit Energie-Offset  $C = N$  für verschiedene  $q$ -Werte: AS-Punkte und Kurve nach Histogramm-Methode

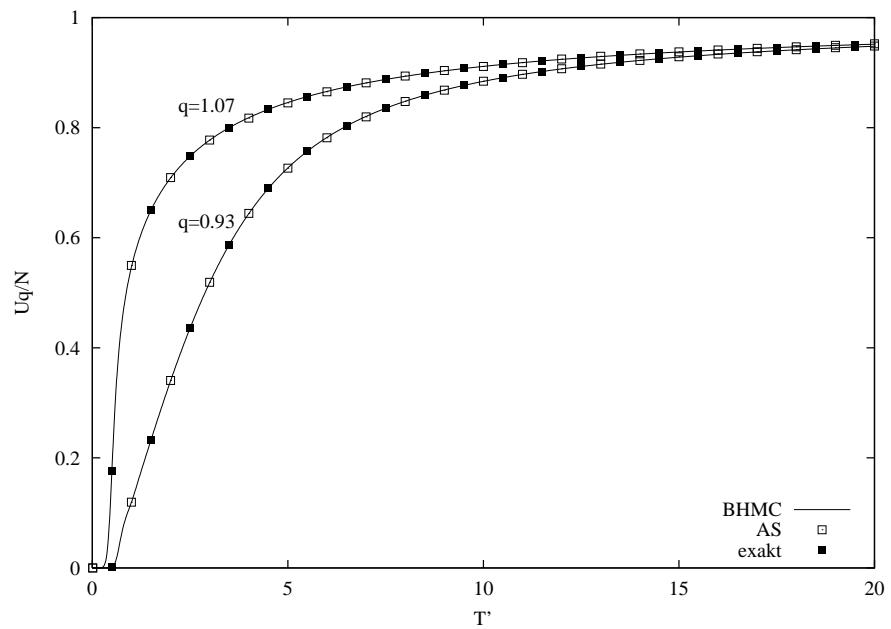


Abb. 3.2: Innere Energie desselben Systems für  $q \in \{0.93, 1.07\}$ : AS-, BHMC(Creutz)- und exakte Werte

Anhand von Abbildung 3.2 erkennt man, daß die BHMC(Creutz)–Werte gut mit den AS– und den exakten Werten übereinstimmen. Die Fehler für die AS–Werte sind für alle dargestellten Punkte deutlich kleiner als die gezeichneten Symbole. Die Genauigkeit der Broad–Histogram–Methode wird weiter unten genauer untersucht.

Um die innere Energie des betrachteten Systems auch in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  darstellen zu können, muß die  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation ausgeführt werden. Das geschieht im Falle der exakten und der Broad–Histogram–Rechnung gemäß Punkt (6) des zu Beginn dieses Abschnittes gegebenen Rezepts, im Falle der AS–Rechnung muß die numerische Integration nach Salazar vorgenommen werden. Dabei wird für jeden Wert  $T'$ , für den die zugehörige Temperatur  $T$  bestimmt werden soll, gemäß Gleichung (2.11) die Funktion  $f(U_q) = 1/(T' - (1-q)U_q)$  integriert. Integrationsgrenzen sind dabei zwei Gleichgewichtszustände, von denen der eine durch die (Pseudo–)Temperatur  $T'$  charakterisiert ist, und der andere so gewählt werden muß, daß die Entropie in diesem Zustand  $X(T'_0)$  bekannt ist. In diesem Fall bietet sich der Zustand mit  $T'_0 = 0$  an. Dann befindet sich das System nämlich in einer der beiden Grundzustandskonfigurationen, die (da im betrachteten System durch kein äußeres Feld einer der Zustände ausgezeichnet ist) beide mit der Wahrscheinlichkeit  $1/2$  angenommen werden. Es wird später klar werden, daß dies nicht für alle Energie–Offsets  $C$  richtig ist, für  $C = N$  ist es allerdings korrekt. Die Entropie nimmt somit den Wert

$$S_q(T'_0 = 0) = \frac{2^{1-q} - 1}{1 - q}$$

an. Dieser Wert unterscheidet sich von demjenigen, der von Salazar und Toral in [26, 29] für dasselbe System angegeben worden ist um den Summanden  $-1/(1-q)$ , der in den genannten Referenzen fehlt.

Abbildung 3.3 vergleicht für die bereits betrachteten Fälle  $q = 0.93$  und  $q = 1.07$  die Ergebnisse der Salazar–Integration mit exakten und BHMC(Creutz)–Werten. Auch diese Abbildung zeigt die hervorragende Übereinstimmung der Ergebnisse der drei verschiedenen Methoden. Die Abweichungen der Ergebnisse der Salazar–Integration von den exakten Werten sind so gering, daß sie in dem verwendeten Maßstab nicht darstellbar sind, die Ergebnisse der Broad–Histogram–Methode werden im folgenden mit den exakten Werten verglichen.

In Tabelle 3.1 sind für das betrachtete System die exakten Werte der Größen angegeben, die in die Broad–Histogram–Gleichung (2.13) zur Bestimmung der Zustandsdichte  $g(E)$  eingehen. Diese Werte wurden erhalten, indem unter Ausnutzung der Symmetrien des Systems für die Hälfte aller möglichen Zustände die Größen  $N_X(\dots)$  explizit abgezählt wurden. Für die Energieänderung  $\Delta E$  wurde hier—wie auch in den nachfolgenden Broad–Histogram–Rechnungen—der Wert  $\Delta E = 4$  gewählt.

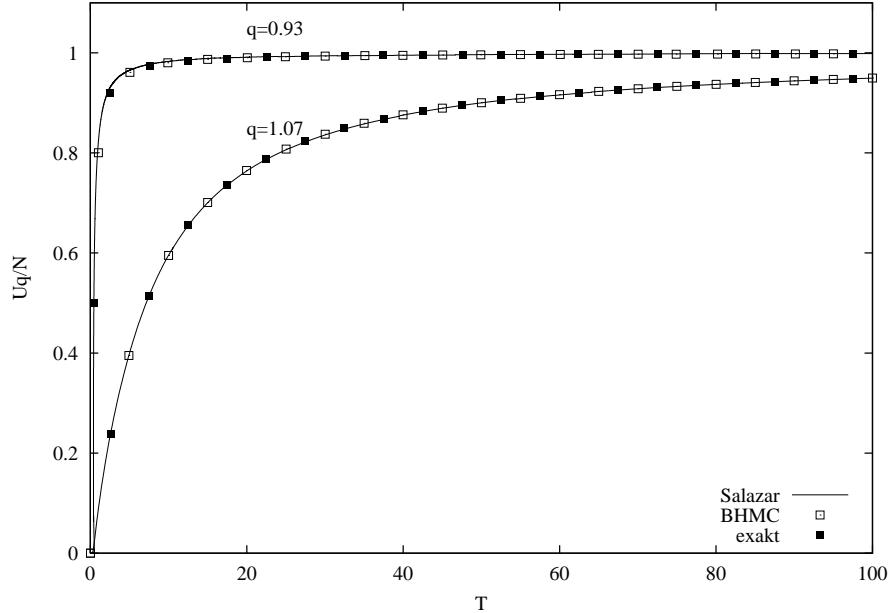


Abb. 3.3: Innere Energie  $U_q/N$  desselben Systems in Abhangigkeit von der Temperatur  $T$ : Ergebnisse der Salazar–Integration, BHMC(Creutz)– und exakte Werte

$E$	$g(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	2	32	0
4	992	28.064516	0.064516
8	71920	24.387097	0.387097
12	1812384	20.967742	0.967742
16	21036600	17.806452	1.806452
20	129024480	14.903226	2.903226
24	451585680	12.258065	4.258065
28	942871200	9.870968	5.870968
32	1202160780	7.741935	7.741935

Tab. 3.1: Exakte Werte fur ein eindimensionales System aus  $N = 32$  Ising–Spins mit  $\Delta E = 4$ . Die zweite Halft des Spektrums ( $E = 36 \dots 64$ ) ist symmetrisch zur ersten Halft.

Mit diesen Werten konnen nun die Ergebnisse verschiedener Implementierungen der Broad–Histogram–Methode verglichen werden. So gelingt eine Einschatzung der Fehler, die durch die Korrelation der Zustande und die Verletzung des detaillierten Gleichgewichts bei Verwendung der Random–Walk(RW)–Dynamik in die Ergebnisse eingehen.

Die in den Tabellen 3.2 bis 3.4 aufgelisteten Ergebnisse wurden erhalten, indem für dasselbe System in derselben Ausgangskonfiguration unter Verwendung der RW-Dynamik jeweils gleich viele Histogrammdaten gesammelt wurden. Die Rechnungen unterscheiden sich nur in der Wahl der Wahrscheinlichkeiten, mit denen Zustandsänderungen (Umklappen von einzelnen Spins) akzeptiert wurden, wenn sie zur Erhöhung der Systemenergie führten. Korrelationen zwischen aufeinanderfolgenden Systemzuständen wurden vernachlässigt.

Tabelle 3.2 zeigt die Ergebnisse der Rechnung mit der von Wang vorgeschlagenen Akzeptanzwahrscheinlichkeit (2.15)

$$p_{\text{up}} = \min \left[ 1, \frac{\langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle}{\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle} \right].$$

$E$	$V(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	13233	32	0
4	969538	28.42808	0.42803
8	$1.76963 \cdot 10^7$	24.89950	0.89948
12	$8.17883 \cdot 10^7$	21.28948	1.29420
16	$1.55476 \cdot 10^8$	17.87942	1.87945
20	$1.83586 \cdot 10^8$	14.85222	2.85224
24	$1.87139 \cdot 10^8$	12.21413	4.21412
28	$1.87244 \cdot 10^8$	9.84945	5.84948
32	$1.86089 \cdot 10^8$	7.72840	7.72840

Tab. 3.2: Broad-Histogram-Simulation desselben Systems mit RW-Dynamik und  $p_{\text{up}} = \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$

Für Tabelle 3.3 wurde diese Akzeptanzwahrscheinlichkeit genähert, indem die Mittelwerte  $\langle N(\dots) \rangle$  aus demselben Energiekanal gelesen wurden, für Tabelle 3.4 wurde nur jeweils der aktuelle Zustand berücksichtigt.

Man erkennt, daß alle drei Varianten ähnlich schlechte Ergebnisse liefern. Das Bild ändert sich jedoch, wenn man die Korrelationen zwischen aufeinanderfolgenden Zuständen berücksichtigt und das System nach jeder Energieänderung thermaliisiert wird. So wurden zur Bestimmung der Daten in den Tabellen 3.5 bis 3.7 nach jeder Zustandsänderung des Systems 10 Metropolis-Sweeps bei Temperaturen durchgeführt, die nach Gleichung (2.14) aus den jeweils aktuellen Zuständen und den bisher angesammelten Histogrammdaten bestimmt werden konnten. Es wurde wieder für jede der drei Akzeptanzwahrscheinlichkeiten  $p_{\text{up}}$  eine eigene Simulation durchgeführt.

Nun erkennt man, daß die Ergebnisse aller drei Simulationen gut mit den exakten Werten übereinstimmen. Der Fehler, der durch die Verletzung der detaillierten

$E$	$V(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	29561	32	0
4	$2.07433 \cdot 10^6$	28.45589	0.45589
8	$3.50043 \cdot 10^7$	24.91368	0.91370
12	$1.45351 \cdot 10^8$	21.29266	1.29267
16	$2.28571 \cdot 10^8$	17.85240	1.85241
20	$1.93788 \cdot 10^8$	14.79091	2.79094
24	$1.33996 \cdot 10^8$	12.16656	4.16660
28	$9.59100 \cdot 10^7$	9.82813	5.82813
32	$7.23845 \cdot 10^7$	7.72272	7.72272

Tab. 3.3: Das Gleiche mit  $p_{\text{up}} = \langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$ 

$E$	$V(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	14353	32	0
4	$1.20063 \cdot 10^6$	28.38010	0.38015
8	$2.48024 \cdot 10^7$	24.85981	0.85978
12	$1.26337 \cdot 10^8$	21.22308	1.22307
16	$2.30400 \cdot 10^8$	17.75217	1.75211
20	$2.06801 \cdot 10^8$	14.69026	2.69027
24	$1.40059 \cdot 10^8$	12.16987	4.16984
28	$9.87182 \cdot 10^7$	9.92663	5.92663
32	$7.46226 \cdot 10^7$	7.84161	7.84161

Tab. 3.4: Das Gleiche mit  $p_{\text{up}} = N_X(E \rightarrow E - \Delta E) / N_X(E \rightarrow E + \Delta E)$ 

$E$	$V(E) [\times 10^6]$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	1.91376	32	0
4	7.14163	28.06082	0.06082
8	9.33207	24.38516	0.38513
12	8.51029	20.96544	0.96543
16	6.54608	17.80516	1.80514
20	4.88819	14.90183	2.90185
24	3.87947	12.25871	4.25873
28	3.39153	9.87206	5.87207
32	3.21753	7.74252	7.74252

Tab. 3.5: Das Gleiche mit  $p_{\text{up}} = \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$  und 10 Thermalisierungs-Sweeps

$E$	$V(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	$2.20173 \cdot 10^6$	32	0
4	$8.20353 \cdot 10^6$	28.06073	0.06079
8	$1.06558 \cdot 10^7$	24.38503	0.38498
12	$9.57666 \cdot 10^6$	20.96545	0.96548
16	$7.18885 \cdot 10^6$	17.80507	1.80509
20	$5.16203 \cdot 10^6$	14.90199	2.90200
24	$3.89951 \cdot 10^6$	12.25895	4.25897
28	$3.24507 \cdot 10^6$	9.86980	5.86980
32	$2.98315 \cdot 10^6$	7.74319	7.74319

Tab. 3.6: Das Gleiche mit  $p_{\text{up}} = \langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle_E / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle_E$  und 10 Thermalisierungs-Sweeps

$E$	$V(E)$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	$2.12994 \cdot 10^6$	32	0
4	$7.99646 \cdot 10^6$	28.06079	0.06077
8	$1.04525 \cdot 10^7$	24.38460	0.38457
12	$9.48415 \cdot 10^6$	20.96540	0.96538
16	$7.17564 \cdot 10^6$	17.80496	1.80491
20	$5.18701 \cdot 10^6$	14.90255	2.90256
24	$3.92674 \cdot 10^6$	12.25836	4.25837
28	$3.27014 \cdot 10^6$	9.87034	5.87033
32	$3.00822 \cdot 10^6$	7.74119	7.74119

Tab. 3.7: Das Gleiche mit  $p_{\text{up}} = N_X(E \rightarrow E - \Delta E) / N_X(E \rightarrow E + \Delta E)$  und 10 Thermalisierungs-Sweeps

Gleichgewichtsbedingung in die Rechnungen eingeht, scheint so klein zu sein, daß eine Tendenz der Werte, mit steigender Vereinfachung des Ausdrucks (2.15) schlechter zu werden, kaum feststellbar ist.

Die besten Ergebnisse liefert die Broad-Histogram-Simulation mit Creutz-Dynamik (Werte in Tabelle 3.8), die jedoch auch von allen benutzten Methoden den größten Rechenaufwand erfordert. So wurden für die tabellierten Ergebnisse fünf einzelne Simulationen durchgeführt. Da der Bereich der Energiewerte, die in einer Simulation erreicht werden können, verhältnismäßig klein ist, mußte das System vor Beginn der Simulation in fünf verschiedenen Anfangskonfigurationen mit fünf verschiedenen Energien präpariert werden.

$E$	$V(E) [\times 10^8]$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	2.02021	32	0
4	9.99875	28.06461	0.06467
8	1.37226	24.38736	0.38730
12	9.72904	20.96743	0.96748
16	1.34282	17.80596	1.80595
20	2.60695	14.90316	2.90317
24	9.12567	12.25795	4.25799
28	3.43020	9.87088	5.87088
32	4.37410	7.74191	7.74191

Tab. 3.8: Broad-Histogram-Simulation desselben Systems mit Creutz-Dynamik

Doch auch wenn die mit der RW-Dynamik bestimmten mikrokanonischen Mittelwerte  $\langle N(\dots) \rangle$  verhältnismäßig gut mit den exakten Werten übereinstimmen, bleibt zu berücksichtigen, daß sich die für diese Werte an sich akzeptablen Fehler im Verlaufe der weiteren Rechnung fortpflanzen. Diese Mittelwerte werden ja benötigt um die Zustandsdichte  $g(E)$  gemäß (2.13) rekursiv zu berechnen

$$g(E + \Delta E) = g(E) \frac{\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle}{\langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle},$$

die Zustandsdichte geht in die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten und anderer Erwartungswerte ein, und so vervielfachen sich die Fehler. Tabelle 3.9 vergleicht die mit den Werten der Tabellen 3.5 bis 3.8 berechneten Zustandsdichten  $g(E)$ .

$E$	$g(E)$ (exakt)	$g(E)$ (Tab. 3.5)	$g(E)$ (Tab. 3.6)	$g(E)$ (Tab. 3.7)	$g(E)$ (Tab. 3.8)
0	2	2	2	2	2
4	992	1052	1053	1053	990
8	71920	76649	76752	76834	71738
12	1812384	1936027	1938517	1940755	1808307
16	21036600	22485601	22515155	22543343	20994795
20	129024480	137967064	138140562	138285968	128766996
24	451585680	482764048	483349090	483944221	450690383
28	942871200	1007832751	1009464092	1010567120	941007171
32	1202160780	1285031926	1286705956	1288515211	1199777428

Tab. 3.9: Vergleich der mit den Werten aus den Tabellen 3.5 bis 3.8 berechneten Zustandsdichten

Trotz der nun schon wesentlich größeren Abweichungen der RW-Ergebnisse von

den Soll-Werten ist die BHMC(RW)-Dynamik nicht so schlecht wie es den Anschein hat. So kann zum einen durch größeren Rechenaufwand, nämlich durch längere Thermalisierung der mit dem Random Walk erreichten Zustände, die Genauigkeit der Ergebnisse deutlich verbessert werden, zum anderen sind aber bereits die tabellierten Werte hinreichend genau, um das qualitative Verhalten eines statistischen Systems in der Tsallis-Statistik zu untersuchen.

$E$	$V(E) [\times 10^6]$	$\langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$	$\langle N(E \rightarrow E - \Delta E) \rangle$
0	2.15519	32	0
4	6.59605	28.06452	0.06446
8	8.45715	24.38729	0.38727
12	7.61645	20.96764	0.96758
16	5.83734	17.80588	1.80586
20	4.35425	14.90296	2.90296
24	3.45467	12.25917	4.25916
28	3.02075	9.86997	5.86997
32	2.86479	7.74186	7.74186

Tab. 3.10: BHMC(RW)-Simulation mit  $p_{\text{up}} = \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$  und 100 Thermalisierungs-Sweeps

Tabelle 3.10 zeigt die Ergebnisse einer BHMC(RW)-Simulation mit  $p_{\text{up}} = \langle N(E + \Delta E \rightarrow E) \rangle / \langle N(E \rightarrow E + \Delta E) \rangle$  und 100 Thermalisierungs-Sweeps. Ein Vergleich mit den Tabellen 3.1 und 3.8 zeigt, daß diese Werte sehr gut mit den exakten Werten übereinstimmen und von der Genauigkeit her mit den BHMC(Creutz)-Werten vergleichbar sind. Allerdings ist nun auch der Rechenaufwand mit dem der Creutz-Dynamik vergleichbar.

Abb. 3.4 zeigt die innere Energie  $U_q/N$  des betrachteten Systems in Abhängigkeit vom Parameter  $T'$  für  $q \in \{0.65, 1.0, 1.15\}$ . Die durchgezogenen Kurven stellen die exakte Lösung dar, die einzelnen Datenpunkte ( $\square$ ) wurden mit den schlechtesten Werten aus Tabelle 3.9 (5. Spalte, Werte aus Tab. 3.7) berechnet. Man erkennt selbst bei Benutzung dieser Werte eine gute Übereinstimmung mit den Soll-Werten.

Auch in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  stimmen die mit den fehlerbehafteten Werten für die Zustandsdichte  $g(E)$  berechneten inneren Energien gut mit den exakten Lösungen überein, obwohl sich die Fehler bei Ausführung der  $\beta-\beta'$ -Transformation deutlich vergrößern. In Abbildung 3.5 ist für die drei betrachteten Fälle die innere Energie gegen die Temperatur aufgetragen. Wieder stellen die durchgezogenen Kurven die exakten Lösungen dar, die Symbole repräsentieren die fehlerbehafteten Werte.

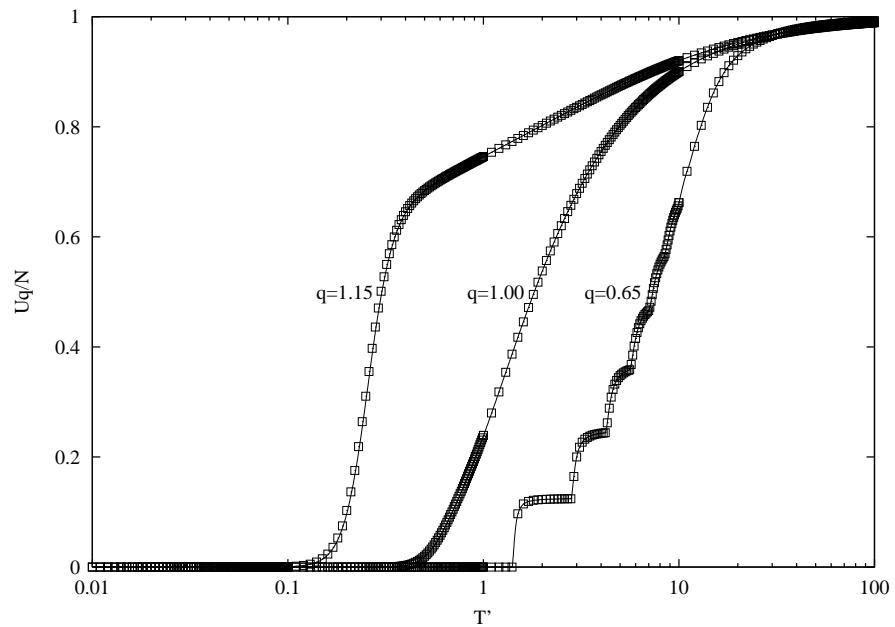


Abb. 3.4: Innere Energie  $U_q(T')/N$  des Systems für  $q \in \{0.65, 1.0, 1.15\}$ : Exakte (durchgezogene Kurve) und BHMC(RW)-Werte ( $\square$ ).

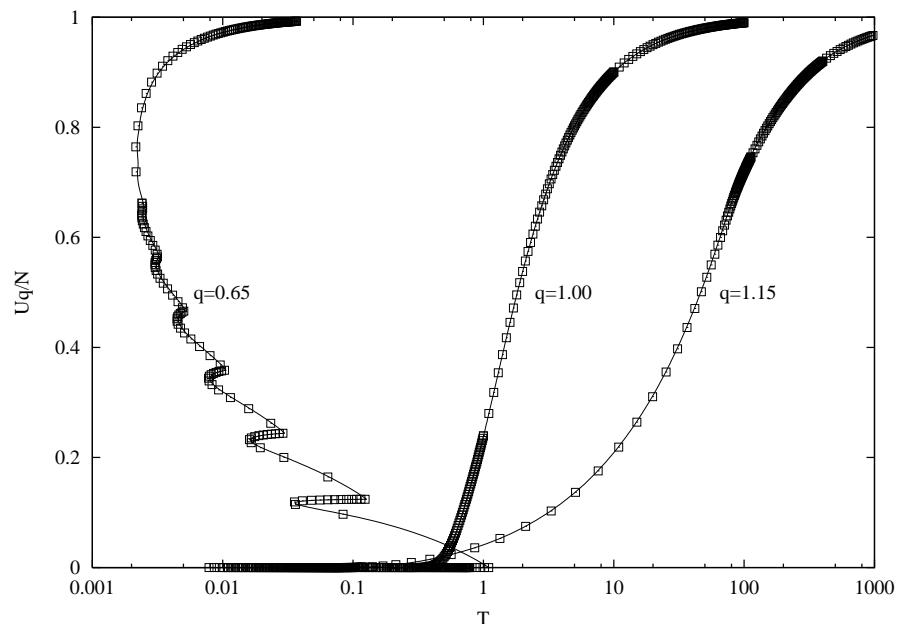


Abb. 3.5: Dasselbe System nach Ausführung der  $\beta-\beta'$ -Transformation

Es wurde gezeigt, daß alle im vorigen Kapitel vorgestellten Monte–Carlo–Methoden für die Tsallis–Statistik brauchbare Ergebnisse liefern. Da jedoch für das in diesem Kapitel untersuchte Ising–Modell in einer Dimension und auch für das zweidimensionale Ising–Modell, das Gegenstand des nächsten Kapitels sein wird, die Zustandsdichte  $g(E)$  bekannt ist, besteht nicht die Notwendigkeit, auf numerische Methoden zurückzugreifen, denn alle interessierenden Größen sind exakt berechenbar. Daher werden Monte–Carlo–Simulationen (abgesehen von einer kurzen Demonstration, daß diese auch in zwei Dimensionen gute Ergebnisse liefern) erst wieder im übernächsten Kapitel zum Einsatz kommen, das dem  $XY$ –Modell gewidmet ist, für welches keine exakte Lösung bekannt ist.

## 3.2 Eigenschaften des Systems

In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften des eindimensionalen Ising–Modells in der Tsallis–Statistik untersucht. Interessante Aspekte sind dabei

- der Einfluß der Systemgröße  $N$ ,
- der Einfluß des Parameters  $q$  und
- der Einfluß der Grundzustandsenergie (Translation des Energiespektrums) auf das Verhalten des Systems, sowie
- die Eigenschaften der  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation

### 3.2.1 Die Cut–off–Bedingung

Bereits in den Abbildungen 3.4 und 3.5 erkennt man ein ungewöhnliches Verhalten der inneren Energie sowohl in Abhängigkeit von der Pseudo–Temperatur  $T'$  als auch der Temperatur  $T$ . Abbildung 3.6 zeigt die innere Energie für eine Schar von  $q$ –Werten.

Während die innere Energie  $U_q(T')/N$  im subextensiven Fall  $q > 1$  mit steigendem  $q$ –Faktor immer steiler ansteigt, bildet sich im superextensiven Regime  $q < 1$  eine treppenartige Struktur heraus.

Es ist sinnvoll, die Fälle  $q > 1$  und  $q < 1$  getrennt zu betrachten. Die Treppenstruktur bei  $q < 1$  wird von der Cut–off–Bedingung (2) des Rezeptes zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten  $p(E)$  verursacht. Für alle  $q < 1$  sind im Falle  $C = N$ , d.h. nur nicht–negativer Energiezustände, die Größen  $y(E) = 1 - (1 - q)\beta'E$  für niedrige „Temperaturen“  $T' = 1/\beta'$  kleiner als Null—ausgenommen für den Grundzustand, der jedoch wegen  $E_0 = 0$  zur inneren Energie nicht beiträgt. Daher haben bei niedrigen Temperaturen nur die Zustände mit  $E = 0$  nicht–verschwindende Besetzungswahrscheinlichkeiten. Mit steigender Temperatur werden dann auch Zustände mit höherer Energie verfügbar, und zwar immer dann,

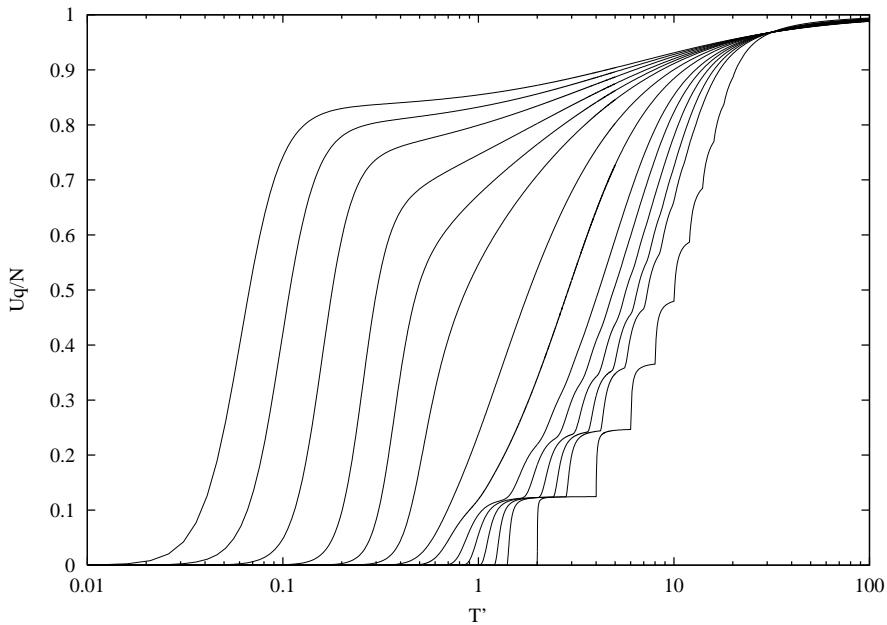


Abb. 3.6: Innere Energie  $U_q/N$  einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins mit Energie-Offset  $C = N$  in Abhängigkeit vom Parameter  $T'$  für (v. l. n. r.)  $q \in \{1.30, 1.25, 1.20, 1.15, 1.11, 1.07, 1.0, 0.93, 0.85, 0.80, 0.75, 0.70, 0.65, 0.50\}$

wenn  $(1 - q)E/T' < 1$  für  $E = 4, 8, \dots, 2N$ . Im Fall  $q = 0.5$  heißt das beispielsweise, daß immer für  $T' = 2n$ , ( $n \in \mathbb{N}$ ) ein neuer Zustand besetzt wird und zur inneren Energie beiträgt. Dieses Verhalten ist in Abbildung 3.6 deutlich erkennbar (Kurve ganz rechts).

Damit ist auch klar, daß sich die Energieplateaus mit fallendem  $q$ -Wert zu höheren „Temperaturen“ verschieben und immer ausgeprägter werden. Außerdem wird deutlich, daß die Maximalzahl der möglichen Plateaus durch die Systemgröße, d.h. durch die Anzahl der möglichen Energiezustände, vorgegeben ist. Insbesondere heißt das, daß im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  die Treppestruktur verschwindet. Abbildung 3.7 zeigt die innere Energie  $U_q(T')/N$  für verschiedene Systemgrößen  $N$ . Man sieht, daß  $U_q$  für kleinere Systemgrößen deutlich schneller und mit weniger Sprüngen ansteigt als bei großen  $N$ .

Im Fall  $q > 1$  findet die Cut-off-Bedingung keine Anwendung, da  $y(E) \geq 1$  für  $E \geq 0$ . Bei Betrachten der Abb. 3.6 fällt zunächst auf, daß  $U_q$  für große  $q$  zunächst sehr steil ansteigt und dann in einen Bereich sehr flachen Anstiegs übergeht. Dabei steigt die Kurve für kleine  $T'$  umso stärker, je größer  $q$  wird, für große  $T'$  steigt die Kurve mit kleinerem  $q$  stärker. Das ist einsichtig, da  $y(E)$  für  $T' \rightarrow \infty$  gegen  $1^+$  geht und  $1/(1-q)$  für  $q \rightarrow \infty$  gegen  $0^-$  strebt. Damit gilt für die Wahrscheinlichkeiten  $p \sim y^a$  mit  $a = 1/(1-q) < 0$  und  $y \in ]1, \infty[$ . Für große  $y$  (kleine  $T'$ ) steigt das  $p$  mit dem größten Exponenten  $a$  (d.h. mit dem höchsten

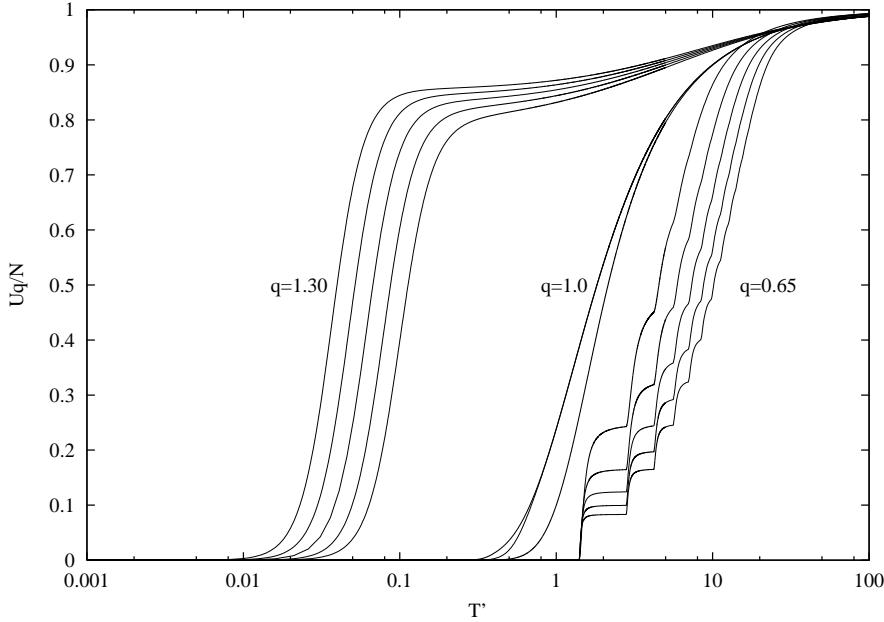


Abb. 3.7:  $U_q(T')/N$  für verschiedene Systemgrößen.  $q = 1.3: N \in \{36, 34, 32, 30, 28\}$ ,  $q = 1.0: N \in \{256, 32, 4\}$ ,  $q = 0.65: N \in \{16, 24, 32, 40, 48\}$  (v. l. n. r.)

$q$ ) am schnellsten, während für kleine  $y$  (große  $T'$ ) die Kurve mit dem kleinsten  $a(q)$  schneller ansteigt.

### 3.2.2 Die $\beta-\beta'$ -Transformation

Die Gleichung für die  $\beta-\beta'$ -Transformation (Punkt (6) in Abschnitt 3.1) lässt sich für die Temperaturen  $T' = 1/\beta'$  und  $T = 1/\beta$  schreiben als

$$T(T') = \frac{1}{\sum_E g(E) p^q(E)} [T' - (1-q)U_q(T')] . \quad (3.2)$$

In Abbildung 3.8 sind für verschiedene  $q$ -Werte die Funktionen  $T(T')$  aufgetragen. Für große Werte von  $q > 1$  erkennt man einen  $T'$ -Bereich, in dem die  $T(T')$ -Kurve fast horizontal verläuft.

Im Fall  $q < 1$  bildet sich mit sinkendem  $q$ -Wert eine zerklüftete Struktur heraus. Ursache hierfür ist wieder die Cut-off-Bedingung. Abbildung 3.9 verdeutlicht das Entstehen dieser Struktur: Für den Fall  $q = 0.85$  ist die Transformation in einzelne Schritte zerlegt dargestellt. Zunächst zeigt die Abbildung die Funktionen  $T = T'$ ,  $(1-q)U_q(T')$  und, daraus zusammengesetzt,  $T' - (1-q)U_q(T')$ . Bereits diese dritte Funktion zeigt die typische Struktur der  $T-T'$ -Transformation für  $q < 1$ . Um schließlich auf die Funktion  $T(T')$  zu kommen, wird mit  $1/Y$  multipliziert,

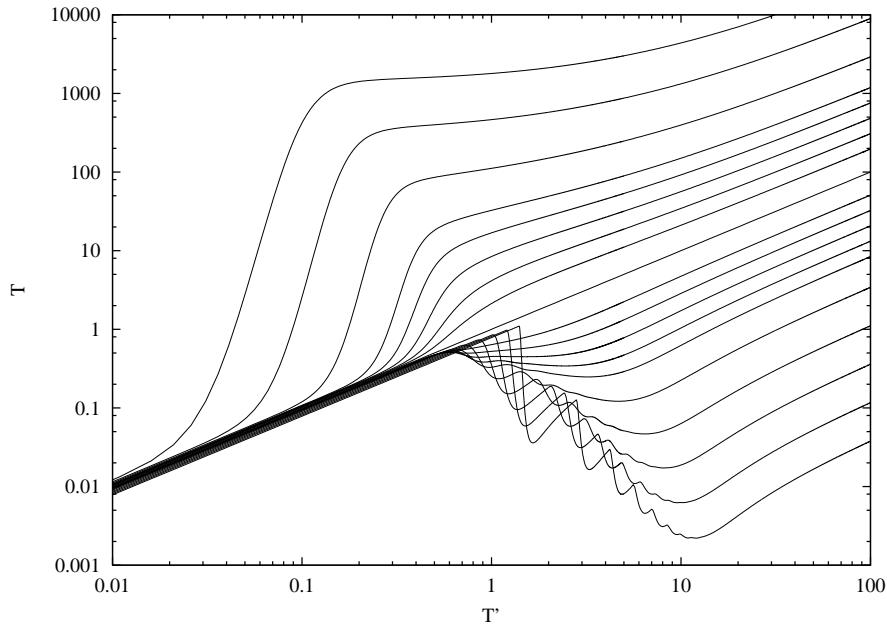


Abb. 3.8:  $T$ - $T'$ -Transformation für  $N = 32$  Ising-Spins mit Energie-Offset  $C = N$  und  $q$ -Werten von 1.25 (oben) bis 0.65 (unten)

wobei  $Y = \sum_E g(E) p^q(E)$  ist.

Da im Fall  $q > 1$  für den hier betrachteten Energie-Offset  $C = N$  keine Cut-off-Bedingung benötigt wird und die innere Energie eine glatte Funktion der Größe  $T'$  ist, tritt ein Verhalten wie im superextensiven Bereich  $q < 1$  nicht auf, und  $T(T')$  ist glatt.

Für  $T' \rightarrow \infty$  strebt  $U_q \rightarrow U_q^{\max}$  und  $p_i \rightarrow 1/W = 1/2^N$  für alle  $i$ . Damit lässt sich für den Fall  $T' \rightarrow \infty$  eine Asymptote der  $T(T')$ -Funktion angeben:

$$T(T' \rightarrow \infty) \sim 2^{(q-1)N} (T' - (1-q)U_q^{\max}).$$

Für  $T' \rightarrow 0$  geht  $U_q \rightarrow U_q^{\min}$  und  $p(E=0) \rightarrow 1/2$ , während  $p(E \neq 0) \rightarrow 0$ . Damit erhält man für den Grenzfall kleiner  $T'$  das Verhalten

$$T(T' \rightarrow 0) \sim 2^{(q-1)} (T' - (1-q)U_q^{\min}).$$

Betrachtet man nun die thermodynamischen Größen wie die innere Energie  $U_q$  oder die freie Energie  $F_q$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$ , führt also die  $T$ - $T'$ -Transformation aus, erkennt man, daß diese Größen für  $q < 1$  keine eindeutigen Funktionen der Temperatur sind. Die Ursache dafür ist die Struktur der  $T$ - $T'$ -Transformation und damit letzten Endes wieder die Cut-off-Bedingung. Da diese Mehrdeutigkeiten kein physikalisch sinnvolles Verhalten darstellen und

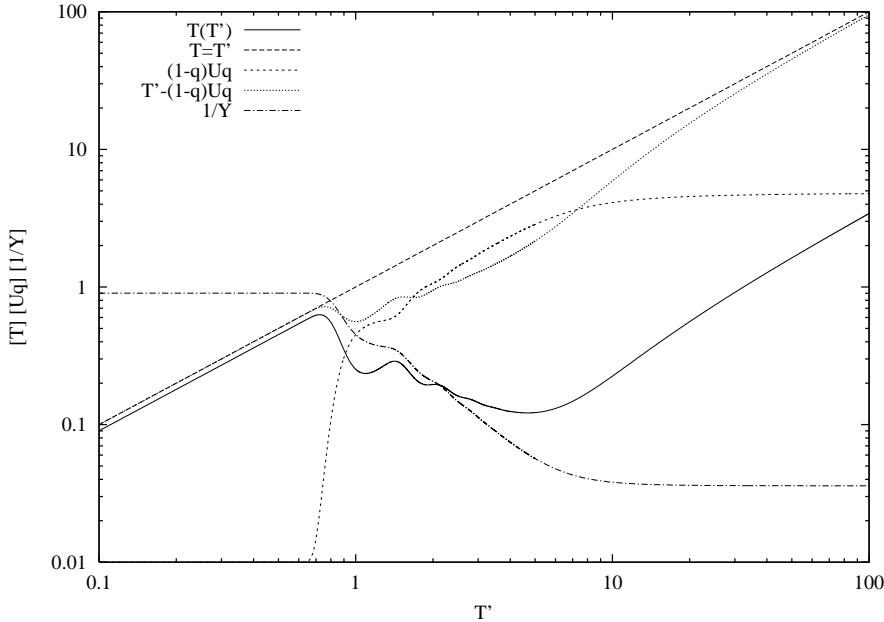


Abb. 3.9: Zur Erklärung der  $T$ - $T'$ -Transformation. Erläuterung: siehe Text

darüber hinaus Konsequenzen einer mathematischen Hilfskonstruktion sind, müssen Schritte unternommen werden, die Eindeutigkeit der Zuordnungen  $T \mapsto \mathcal{O}(T)$  und damit die thermodynamische Stabilität wiederherzustellen.

Das Vorgehen dazu wurde bereits in Abschnitt 1.2.2 erläutert. Abbildung 3.10 zeigt die freie Energie einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins mit periodischen Randbedingungen und einem Energie-Offset von  $C = N$  für  $q = 0.85$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$ . Man erkennt zwei geschlossene Schleifen, die unphysikalische Zustände repräsentieren und mit den in Abschnitt 1.2.2 genannten Methoden entfernt werden müssen.

Die Auswirkungen des Eingriffs auf die Kurve der inneren Energie des Systems zeigt Abbildung 3.11. Dort ist für verschiedene  $q$ -Werte die innere Energie  $U_q/N$  gegen die Temperatur aufgetragen.

Für  $q < 1$  sind die Kurven von  $U_q$  vor und nach dem Eingriff dargestellt, für  $q > 1$  ist ein solcher Eingriff nicht erforderlich. Man erkennt nun anhand von Abbildung 3.10, daß die Ableitung der freien Energie nach der Temperatur, also die Entropie, nach Entfernung der Schleife eine Unstetigkeitsstelle bei einer Temperatur  $T_t$  besitzt, die man als Übergangstemperatur ansehen kann. Bei dieser Temperatur ist die Entropie des Systems unstetig, die innere Energie macht—wie man aus Abbildung 3.11 ersehen kann—einen endlichen Sprung, und sowohl spezifische Wärme als auch magnetische Suszeptibilität divergieren.

Um die Übergangstemperatur im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  zu bestimmen, sind in Abbildung 3.12 für verschiedene  $q$ -Werte die Übergangstemperaturen gegen die inversen Systemgrößen  $1/N$  aufgetragen. Der thermodynamische Limes entspricht dann dem Grenzwert  $1/N \rightarrow 0$ .

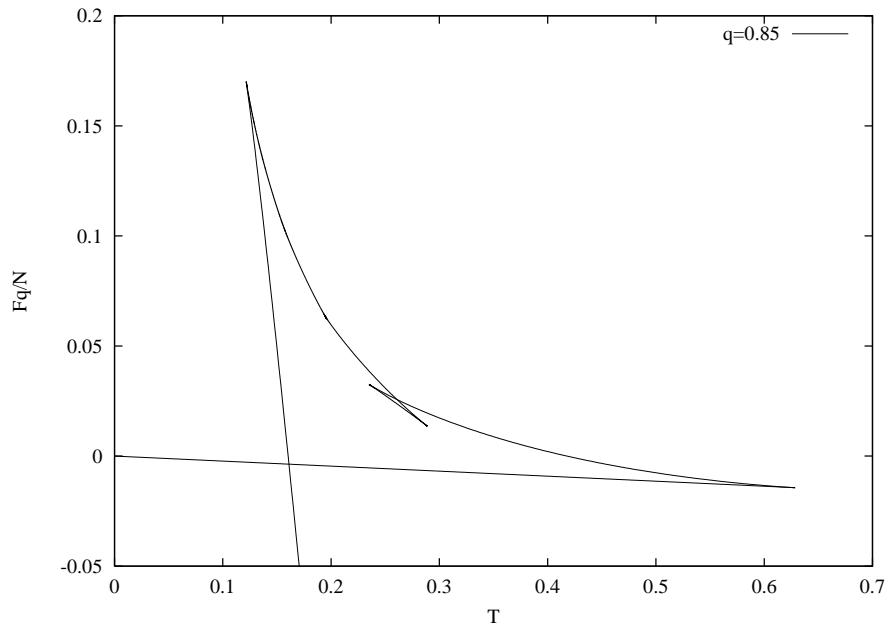


Abb. 3.10: Freie Energie  $F_q/N(T)$  einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins mit  $C = N$  für  $q = 0.85$

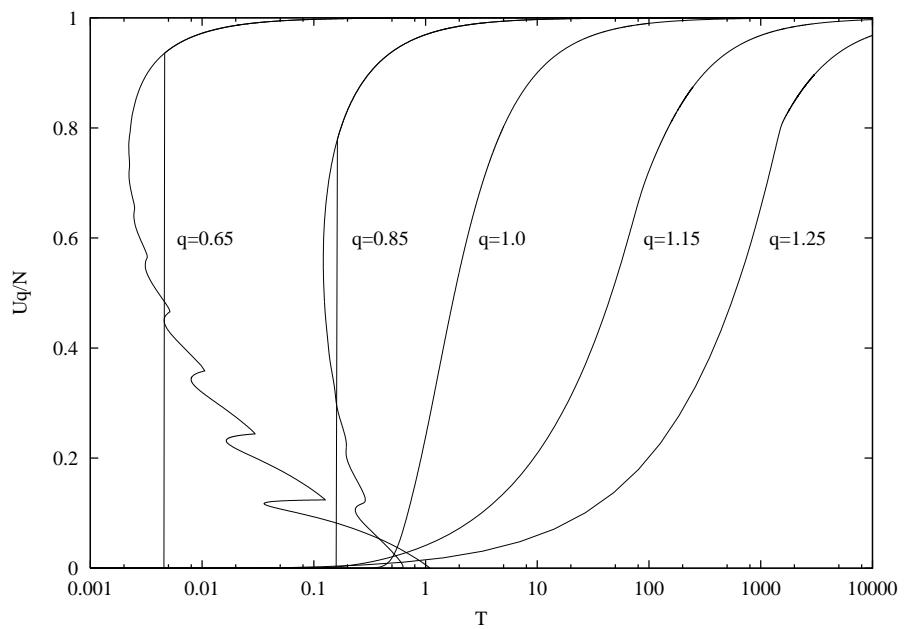


Abb. 3.11: Innere Energie  $U_q(T)/N$  für verschiedene  $q$  vor und nach der Entfernung der Schleifen in der Beziehung  $F_q(T)$

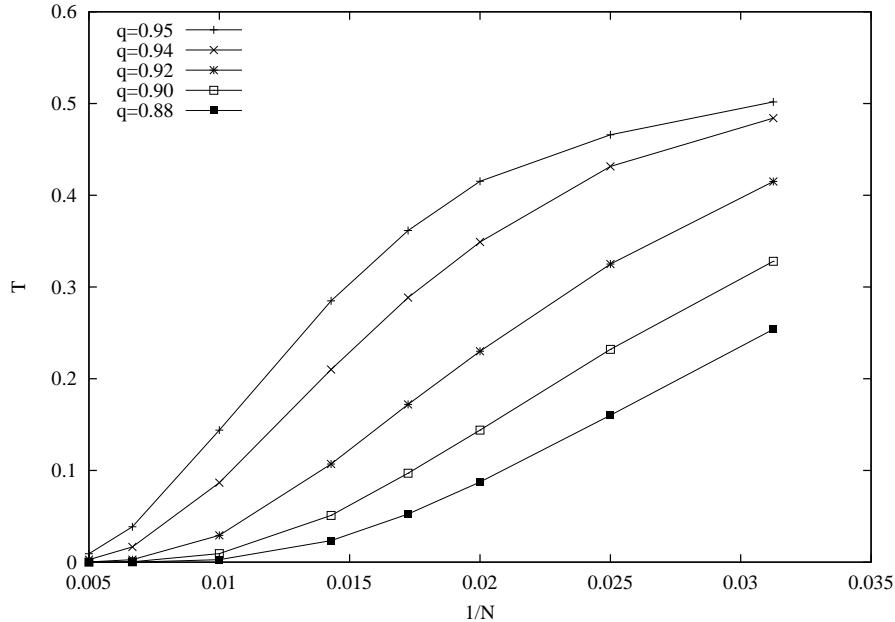


Abb. 3.12: Bestimmung der Übergangstemperatur  $T_t$  im thermodynamischen Limes  $1/N \rightarrow 0$

Man erkennt, daß  $T_t$  für  $N \rightarrow \infty$  sehr schnell verschwindet. Im thermodynamischen Limes gibt es also für  $q < 1$  keinen Phasenübergang.

Da das eindimensionale Ising–Modell im BG–Grenzfall auch keinen Phasenübergang aufweist, bleibt noch das Verhalten für  $q > 1$  zu untersuchen. Hier weist die Kurve der inneren Energie eine abrupte Änderung ihrer Ableitung auf, die umso ausgeprägter wird, je größer man  $q$  und  $N$  wählt. An diesen Stellen ist die Ableitung aber nicht unstetig. Ursache dieses „Knicks“ ist wieder die  $T$ – $T'$ –Transformation. In Abbildung 3.13 ist die  $T$ – $T'$ –Relation für  $q = 1.3$  und verschiedene Systemgrößen dargestellt. Man erkennt, daß für  $N \rightarrow \infty$  die Bereiche, in denen abrupte Änderungen von  $T$  auftreten, von den Werten 0 und  $\infty$  begrenzt werden, und im thermodynamischen Limes keine „Knicke“ mehr auftreten.

Es gibt also für beliebige  $q$  im thermodynamischen Limes keinen Phasenübergang des eindimensionalen Ising–Modells. Dies kann man auch folgendermaßen sehen: Wenn alle  $N$  Spins einer linearen Kette in dieselbe Richtung zeigen, befindet sich die Energie an ihrem absoluten Minimum, die Entropie ist Null. Klappt man nun alle Spins jenseits eines gewissen Gitterplatzes  $i$  um, steigt die innere Energie um  $2J$ , die Entropie jedoch um  $k/(q-1)[1 - (N-1)^{1-q}]$ , da es gerade  $N-1$  Möglichkeiten gibt, den Gitterplatz  $i$  zu wählen. Damit ändert sich durch den Vorgang die freie Energie um

$$\Delta F_q = 2J - \frac{kT}{q-1} [1 - (N-1)^{1-q}] = 2J - kT \ln_q(N-1).$$

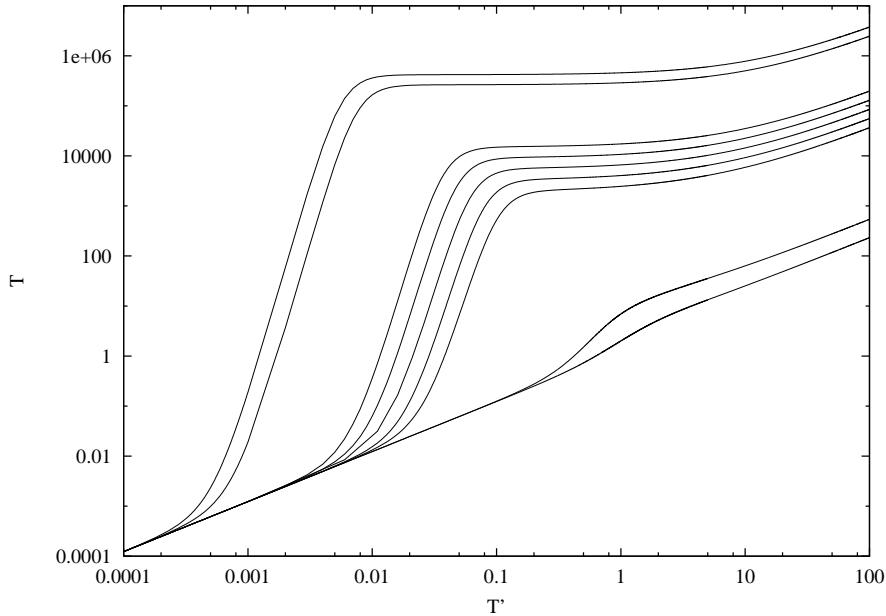


Abb. 3.13:  $T$ - $T'$ -Relation für  $q = 1.30$  und  $N \in \{50, 48, 36, 34, 32, 30, 28, 8, 4\}$  (v. o. n. u.)

Für  $T > 0$  und  $N \rightarrow \infty$  sinkt damit die freie Energie für alle  $q$ . Das heißt, daß sich dieser Vorgang wiederholen wird, bis die Spins in zufällige Richtungen zeigen. Daher kann es in einer Dimension keine spontane Magnetisierung geben.

### 3.2.3 Der Energie-Offset

Nach Abschnitt 1.2 sind die Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i^{(3)}\}$  unabhängig von einem beliebigen Offset der Energiewerte  $\varepsilon_i$ , wenn man sie als Funktionen der Temperatur betrachtet. Als Funktionen von  $T'$  hängen die Wahrscheinlichkeiten aber sehr wohl vom Energienullpunkt ab und ebenso die  $T$ - $T'$ -Beziehung derart, daß sich die  $E_0$ -Abhängigkeiten bei der Transformation  $T' \rightarrow T$  kompensieren, so daß die Erwartungswerte  $\langle\langle \mathcal{O} \rangle\rangle_q$  als Funktionen der Temperatur unabhängig sind von einer Translation des Energiespektrums.

Bisher wurde immer  $C = N$  angenommen, es gab also nur nicht-negative Energiewerte. In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß die Observablen  $U_q$  und  $F_q$  tatsächlich insofern unabhängig von der Wahl des Energienullpunkts  $E_0$  sind, als sie bei  $\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_i + C$  ( $i = 1, \dots, W$ ) übergehen in  $U_q + C$  bzw.  $F_q + C$ . Es stellt sich jedoch heraus, daß für  $C \neq N$  Schwierigkeiten bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten  $p_i(T)$  auftreten.

Zunächst kann man anhand der  $T$ - $T'$ -Beziehung (3.2)

$$T(T') = \frac{T' - (1-q)U_q(T')}{\sum_i p_i^q}$$

erkennen, daß man (da  $\sum_i p_i^q > 0$ ), um den Temperaturbereich  $0 \leq T < \infty$  zu erhalten, den Parameter  $T'$  in dem Bereich  $T' \in [(1-q)E_0, \infty[$  zu wählen hat. Dies wurde zuerst von Salazar und Toral erkannt [29]. Das bedeutet insbesondere, daß es in zwei Fällen (nämlich wenn  $C < N$  und  $q < 1$  oder  $C > N$ ,  $q > 1$ ) notwendig wird, auch negative Werte von  $T'$  zu berücksichtigen.

Betrachtet man die beiden anderen Fälle, stellt man fest, daß für  $C > N$  und  $q < 1$  keine Probleme auftreten, für  $C < N$  und  $q > 1$  jedoch das von Lima et al. vorgeschlagene Rezept zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten [17], das zu Beginn dieses Kapitels angegeben ist, verbessert werden muß. Für  $q > 1$  ist nämlich  $1/(1-q) < 0$ , und sobald die Cut-off-Bedingung zur Anwendung kommt, tritt in Schritt (3) eine Division durch Null auf. Daher muß das Rezept wie folgt umformuliert werden:

- (1) Berechne  $y(E, \beta') = 1 - (1 - q)\beta'E$  für alle  $E$ .
- (2) Wenn  $y(E, \beta') < 0$ , dann  $y(E, \beta') = 0$ .
- (3) Berechne  $Z'_q(\beta') = \sum_E [1 - \delta(y(E, \beta'))] g(E) y(E, \beta')^{\frac{1}{1-q}}$ .
- (4) Berechne  $p(E, \beta') = [1 - \delta(y(E, \beta'))] y(E, \beta')^{\frac{1}{1-q}} / Z'_q(\beta')$ .
- (5) und (6) wie gehabt.

Abbildung 3.14 zeigt die innere Energie  $U_q$  für zwei verschiedene  $q$ -Werte und diverse Energie-Offsets  $C$ . Man erkennt deutlich, daß die Addition eines konstanten Betrags zu allen Energiewerten nur eine Verschiebung von  $U_q$  um denselben Betrag zur Folge hat.

Auch wenn es im Fall  $C < N$  und  $q < 1$  theoretisch möglich sein sollte, durch Wahl von negativen  $T'$ -Werten den Bereich niedriger Temperaturen  $T$  abzudecken, stellt sich heraus, daß das Verfahren von Lima et al. zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  und der Erwartungswerte  $\langle\langle \mathcal{O}(T) \rangle\rangle_q$  dies nicht leisten kann. Um eine stetige  $T$ - $T'$ -Beziehung zu erhalten, müssen die Werte von  $U_q$  und  $\sum_E p^q(E)$  für  $T' \rightarrow -0$  und  $T' \rightarrow +0$  stetig aneinander anschließen. Dies ist bei dem angegebenen Verfahren jedoch nicht der Fall. Während im Hochtemperaturgrenzfall  $T, T' \rightarrow \infty$  alle Energiezustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen werden, gehen die Wahrscheinlichkeiten für die Zustände hoher Energie für  $T' \rightarrow 0$  gegen Null. Für sehr kleine positive  $T'$  haben dann nur noch die  $m$  niedrigsten Energiezustände nichtverschwindende Besetzungswahrscheinlichkeiten. Sobald man jedoch zu negativen Werten von  $T'$  übergeht, verschwinden wegen der Cut-off-Bedingung gerade die Wahrscheinlichkeiten der niedrigsten Energiezustände und es werden bevorzugt Zustände hoher Energie angenommen. Daher kommt es zu einem endlichen Sprung in der inneren Energie bei  $T' = 0$  und damit zu einer unstetigen  $T$ - $T'$ -Beziehung. Das gleiche Problem tritt auf, wenn  $C > N$  und  $q > 1$ .

Es bleibt jedoch die Möglichkeit, die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  mittels der im ersten Kapitel beschriebenen Iterationsmethode direkt in Abhängigkeit von  $T$  zu

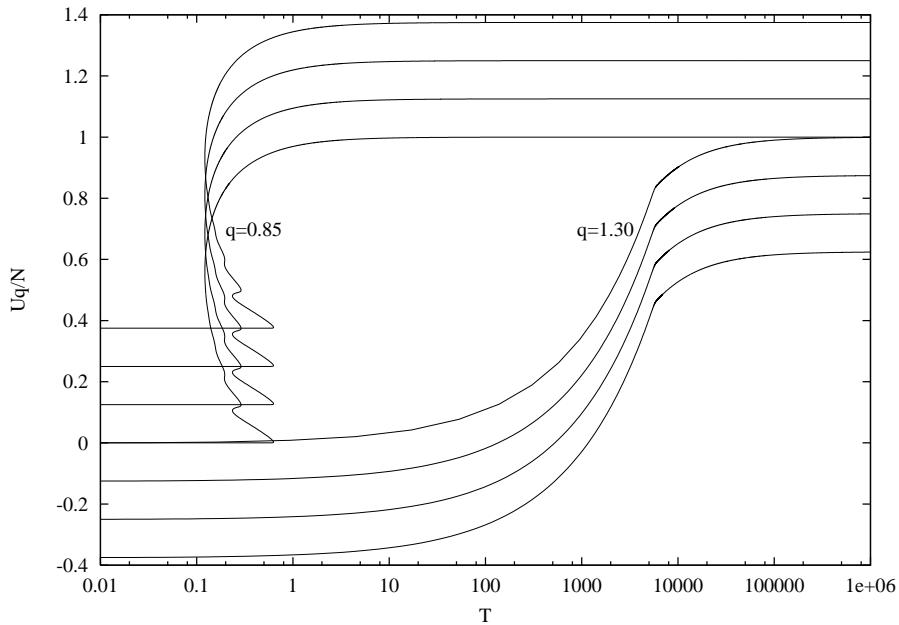


Abb. 3.14: Innere Energie  $U_q(T)/N$  für  $q = 0.85$  und  $q = 1.30$  und verschiedene Energie-Offsets  $C$ . Diese sind für  $q = 0.85$  (v. o. n. u.)  $C \in \{N + 12, N + 8, N + 4, N\}$ , für  $q = 1.30$  (v. o. n. u.)  $C \in \{N, N - 4, N - 8, N - 12\}$ .

berechnen. Dabei ist es notwendig, zur Bestimmung der Kurven  $\langle\langle \mathcal{O}(T) \rangle\rangle_q$  je einen Iterationszyklus bei hohen und einen bei niedrigen Temperaturen zu beginnen, da (wie in Abschnitt 1.2 gezeigt wurde) in beiden Fällen vorübergehend metastabile Zustände angenommen werden. Aus den beiden unterschiedlichen Kurven kann dann durch Betrachtung der freien Energie mit den in Abschnitt 1.2 genannten Methoden das korrekte physikalische Verhalten von  $\mathcal{O}(T)$  konstruiert werden. Abbildung 3.15 zeigt die so bestimmten Kurven der inneren Energie für  $q = 0.85$  und  $C < N$ . Man erkennt, daß auch in diesem Fall die Addition eines konstanten Energiebetrages zu allen Energiewerten des Systems nur die Verschiebung der inneren Energie um denselben Betrag zur Folge hat.

Komplizierter ist der letzte verbliebene Fall, nämlich  $q > 1$ ,  $C > N$ , da hier für große  $q$  auch die Iterationsmethode versagt. Groß heißt hier, daß bereits für  $q = 1.03$  durch Iteration kein befriedigendes Ergebnis mehr zu erhalten ist. Für kleinere  $q$  konvergiert die Iteration aber noch, und so ist es möglich, in Abbildung 3.16 Ergebnisse für die innere Energie bei  $q = 1.01$  und  $C > N$  zu zeigen.

Aus allen betrachteten Fällen geht hervor, daß die Wahrscheinlichkeiten  $p_i(T)$  tatsächlich unabhängig von der Wahl des Energienullpunkts sind und eine Translation des Energiespektrums lediglich eine Translation der inneren Energie (und wegen  $F_q = U_q - TS_q$  auch der freien Energie) um denselben Energiebetrag bewirkt. Insbesondere ist die spezifische Wärme  $C_q = dU_q/dT$  invariant unter  $\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_i + \Delta$  für alle  $i$ .

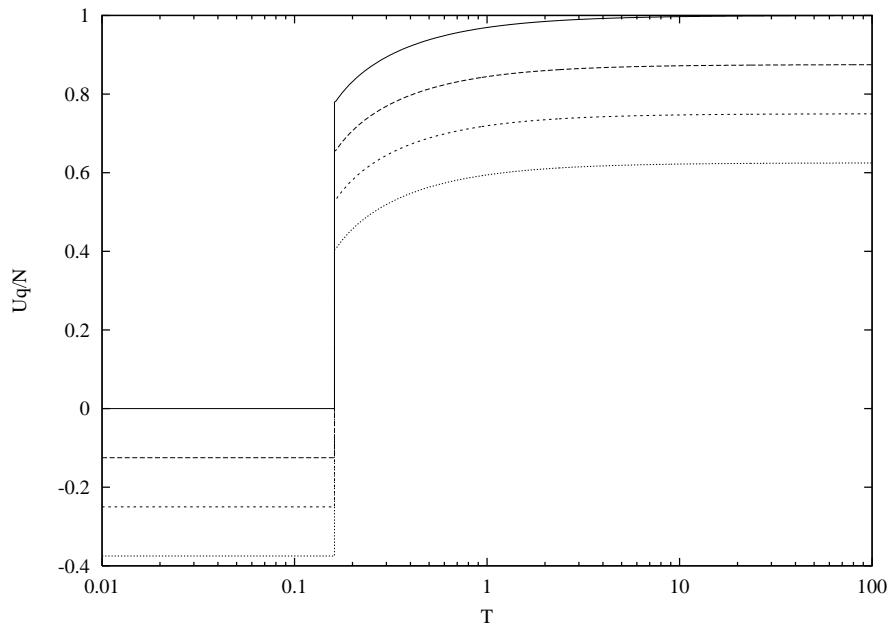


Abb. 3.15: Innere Energie für  $q = 0.85$  und  $C \in \{N, N-4, N-8, N-12\}$  (v. o. n. u.), berechnet nach der Iterationsmethode

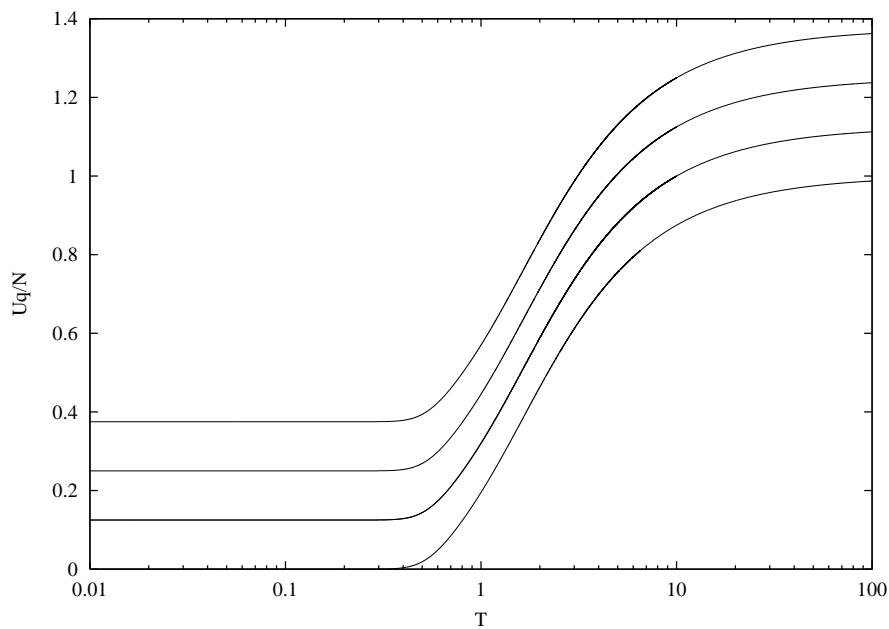


Abb. 3.16: Innere Energie für  $q = 1.01$  und  $C \in \{N+12, N+8, N+4, N\}$  (v. o. n. u.), berechnet nach der Iterationsmethode

Daher wird im folgenden—sofern nicht ausdrücklich anders angegeben—der Energienullpunkt stets so gewählt, daß er mit dem niedrigsten Energiewert des betrachteten Systems zusammenfällt. Mit dieser Wahl können alle beschriebenen rechnerischen Schwierigkeiten umgangen werden.

### 3.3 Vergleich mit der Literatur

Das eindimensionale Ising-Modell gehörte zu den ersten Modellen der statistischen Physik, die im Rahmen der Tsallis-Statistik untersucht worden sind. Die erste Arbeit, die von R. F. S. Andrade im Jahr 1991 veröffentlicht wurde [38], untersucht den Einfluß der Grundzustandsenergie auf das Verhalten einer Kette von  $N + 1$  Ising-Spins (ohne periodische Randbedingungen) für eine Schar von  $q$ -Werten, charakterisiert durch die natürliche Zahl  $r$ :

$$q_r = \frac{r+1}{r}, \quad r = 1, 2, \dots$$

Für diese Werte von  $q$  läßt sich nämlich die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.14), d.h. die Verteilung bei erster Wahl der  $U_q$ -Nebenbedingung, als Polynom schreiben, und die Summe über alle Konfigurationen kann ausgeführt werden. Auf diese Weise ist es dem Autor gelungen, für die beiden Spezialfälle ausschließlich nicht-positiver und ausschließlich nicht-negativer Energiezustände, analytische Ausdrücke für die innere Energie zu erhalten und damit für die beiden niedrigsten  $r$ - bzw.  $q$ -Werte die spezifische Wärme  $C_q$  zu berechnen.

Die folgenden Abbildungen (Abb. 3.17 a–d), die mit einem für die erste Version der  $p_i$  modifizierten Rezept nach Lima et al. berechnet worden sind (wobei zunächst auch die  $T-T'$ -Transformation wegfällt), reproduzieren die Ergebnisse aus [38] mit dem Unterschied, daß die Skalierung der Temperaturachse mit dem Faktor 2, die dort (wie aus dem Text hervorgeht offenbar unbemerkt bzw. unbeabsichtigt) vorgenommen wurde, hier nicht vorkommt. Die Temperatur wurde hier aus Gründen der Unterscheidbarkeit von den Temperaturen der zweiten und dritten Version der kanonischen Gleichgewichtsgesamtheit mit  $T''$  bezeichnet.

Die dargestellten Werte wurden durch numerische Differentiation der zugehörigen inneren Energien erhalten, die in den folgenden Abbildungen dargestellt sind. Abbildung 3.18 zeigt für verschiedene Systemgrößen die innere Energie für  $q_1 = 2.0$  und den Fall ausschließlich nicht-positiver Energiezustände. Man erkennt, daß die innere Energie für höhere  $N$  im dargestellten Temperaturbereich nicht den gesamten Bereich möglicher Werte annimmt. Dieses Verhalten erinnert stark an das der inneren Energie bei Benutzung der dritten Version der Wahrscheinlichkeiten, wenn sie für  $q < 1$  und  $C < N$  gegen die Hilfsgröße  $T'$  aufgetragen wird. Man ahnt, daß sich die  $U_q-T''$ -Beziehung in den Bereich negativer  $T''$  fortsetzen ließe. Und tatsächlich gibt es einen Zusammenhang zwischen den Wahrscheinlichkeitsverteilungen bei erster und bei dritter Wahl der  $U_q$ -Nebenbedingung, der sich auf zwei verschiedene Weisen herstellen läßt.

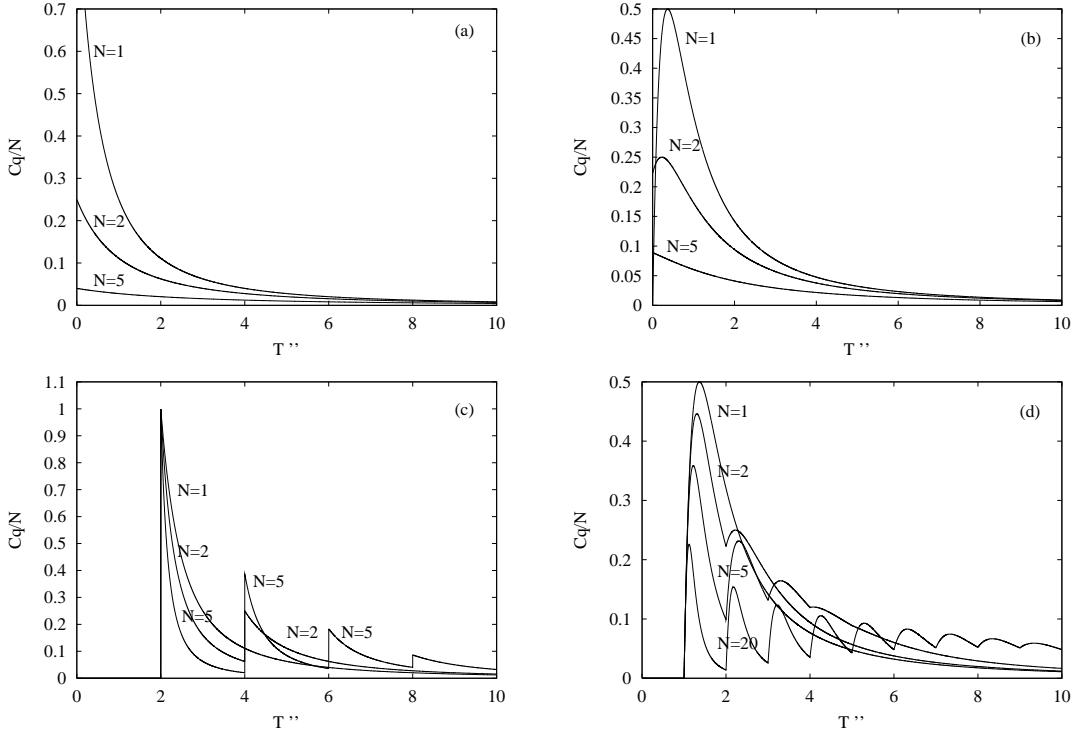


Abb. 3.17: Reproduktion der Ergebnisse von R. F. S. Andrade [38] für die spezifische Wärme einer Kette von  $N + 1$  Ising–Spins: (a) negative Energiezustände und  $r = 1$ , (b) negative Energiezustände und  $r = 2$ , (c) positive Energiezustände und  $r = 1$ , (d) positive Energiezustände und  $r = 2$

### 3.3.1 Äquivalenz der ersten und dritten $p_i$ -Verteilung

Die in Abschnitt 1.2 eingeführte kanonische Wahrscheinlichkeitsverteilung bei Wahl der Nebenbedingung  $U_q = \sum_i p_i \varepsilon_i$  für die innere Energie lautet

$$p_i^{(1)} = \frac{[1 - (q-1)\beta^* \varepsilon_i]^{\frac{1}{q-1}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (q-1)\beta^* \varepsilon_j]^{\frac{1}{q-1}}}. \quad (3.3)$$

Tsallis et al. haben in [3] als erste darauf hingewiesen, daß sich die dritte  $p_i$ -Verteilung mit den ebenfalls in Abschnitt 1.2 eingeführten „escort probabilities“  $P_i = p_i^q / \sum_j p_j^q$  schreiben läßt als

$$P_i^{(3)} = \frac{[1 - (1-q)\beta' \varepsilon_i]^{\frac{q}{1-q}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta' \varepsilon_j]^{\frac{q}{1-q}}}$$

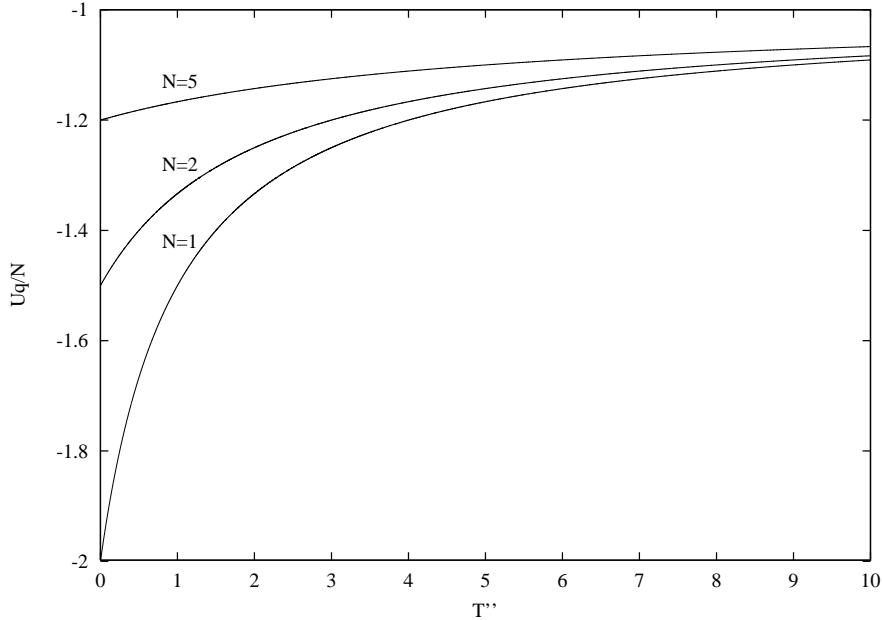


Abb. 3.18: Innere Energie für  $q_1 = 2.0$  und ausschließlich nicht-positive Energiewerte in Abhängigkeit von  $T''$

bzw. nach einer kurzen Umformung und Einführung der Größe  $\beta'' = q\beta'$  in der Form

$$P_i^{(3)} = \frac{[1 - (1/q - 1)\beta''\varepsilon_i]^{\frac{1}{1/q-1}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1/q - 1)\beta''\varepsilon_j]^{\frac{1}{1/q-1}}} . \quad (3.4)$$

Da für (3.4) ebenso wie für (3.3) die Normierungsbedingung  $\sum_i P_i^{(3)} = 1$  gilt und sich Erwartungswerte in der Form  $\langle\langle \mathcal{O} \rangle\rangle_q = \sum_i P_i^{(3)} O_i$  schreiben lassen, gilt ganz offensichtlich

$$P_i^{(3)}(1/q, \beta'') = p_i^{(1)}(q, \beta^*) , \quad (3.5)$$

d.h. die Wahrscheinlichkeiten der ersten Version bei einem Wert  $q$  und der Temperatur  $\beta^*$  sind identisch mit denen der dritten Version bei einem Wert  $1/q$  und einer Temperatur  $\beta'' = q\beta'$ . Das heißt insbesondere, daß es somit möglich ist, die mit der ersten Wahrscheinlichkeitsverteilung berechneten Ergebnisse auf die aktuell gültige Formulierung des kanonischen Ensembles umzurechnen und damit auch auf die Temperatur  $T$  bzw. inverse Temperatur  $\beta$ .

Salazar und Toral haben in [29] einen anderen Weg gewählt, die Äquivalenz von  $p_i^{(1)}$  und  $P_i^{(3)}$  zu zeigen. Sie gehen aus von den Entropien, die sich in den beiden

Formulierungen wie folgt lesen:

$$S_q^{(1)} = \frac{1 - \sum_i p_i^q}{q - 1} \quad \text{bzw.} \quad S_q^{(3)} = \frac{1 - \left(\sum_i p_i^{1/q}\right)^{-q}}{q - 1}.$$

Die Indizes (1) und (3) wurden weggelassen, außerdem wurde auf die Unterscheidung zwischen  $p_i$  und  $P_i$  verzichtet.

Durch Einführung der in  $x$  monoton steigenden Funktion

$$G_q(x) = \frac{q}{1-q} [1 - (1 + (1-q)x)^{-1/q}]$$

mit der leicht nachzurechnenden Eigenschaft  $G_q^{-1}(x) = G_{1/q}(x)$  zeigen sie den Zusammenhang zwischen den beiden Entropien  $S_q^{(1)}$  und  $S_q^{(3)}$ :

$$S_{1/q}^{(1)} = G_q [S_q^{(3)}].$$

Das heißt, daß dieselbe Menge von Wahrscheinlichkeiten  $\{p_i\}$ , die  $S_q^{(3)}$  für einen gegebenen Wert von  $U_q$  maximiert, auch  $S_{1/q}^{(1)}$  für dasselbe  $U_q$  maximiert. Diese Konkavität in den Wahrscheinlichkeiten bedeutet jedoch nicht, daß die damit berechneten Erwartungswerte übereinstimmen, wenn sie gegen die Temperatur aufgetragen werden, da es eine nicht-triviale Beziehung zwischen den Temperaturen beider Versionen gibt.

Mit den Bezeichnungen  $T^{(1)}(q)$  und  $T^{(3)}(q)$  für die entsprechenden Temperaturen zeigen sie, daß aus

$$\frac{1}{T^{(1)}(q)} = \frac{\partial S_q^{(1)}}{\partial U_q} \quad \text{und} \quad \frac{1}{T^{(3)}(q)} = \frac{\partial S_q^{(3)}}{\partial U_q} \quad (3.6)$$

zunächst die Beziehung

$$\frac{1}{T^{(3)}(q)} = \frac{\partial}{\partial U_q} G_q^{-1} [S_{1/q}^{(1)}] = \frac{\partial}{\partial U_q} G_{1/q} [S_{1/q}^{(1)}] = \frac{1}{T^{(1)}(1/q)} G'_{1/q} [S_{1/q}^{(1)}]$$

folgt (wobei  $G'_q(x)$  die Ableitung von  $G_q(x)$  ist) und damit schließlich

$$T^{(3)}(q) = T^{(1)}(1/q) \left( \sum_i p_i^{1/q} \right)^{q+1}.$$

Und diese Beziehung ist falsch! Und zwar deshalb, weil Gleichung (3.6) falsch ist. Der Argumentation von Plastino und Plastino [12] folgend sieht man das wie folgt:

Bei Maximierung der Entropie unter den Nebenbedingungen  $\sum_{i=1}^W p_i = 1$  und  $U_q = \sum_{i=1}^W p_i \varepsilon_i$  folgt (vgl. Abschnitt 1.2) aus

$$\delta \left( S_q - \alpha \sum_i p_i - \alpha \beta^* (1-q) U_q \right) = 0$$

zunächst für  $i = 1, \dots, W$  die Beziehung

$$\frac{\partial S_q}{\partial p_i} - \alpha - \alpha\beta^*(1-q)\frac{\partial U_q}{\partial p_i} = 0, \quad (3.7)$$

woraus man die gesuchte Lösung  $p_i = p_i(\alpha, \beta^*)$  erhält. Die Normierungsbedingung  $\sum_i p_i = 1$  erlaubt dann die Bestimmung des Lagrange-Parameters  $\alpha = \alpha(\beta^*)$ , womit sich die Lösung für die  $p_i$  vereinfacht zu  $p_i = p_i(\beta^*) = p_i(\alpha(\beta^*), \beta^*)$ . Ableitungen nach der Variablen  $\beta^*$  schreiben sich dann

$$\frac{dS_q}{d\beta^*} = \sum_{i=1}^W \frac{\partial S_q}{\partial p_i} \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right), \quad (3.8)$$

$$\frac{dU_q}{d\beta^*} = \sum_{i=1}^W \frac{\partial U_q}{\partial p_i} \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right). \quad (3.9)$$

Aus der Normierungsbedingung folgt jedoch

$$\sum_i p_i = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{d\beta^*} \sum_i p_i = \sum_i \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right) = 0, \quad (3.10)$$

und aus Gleichung (3.7) folgt

$$\alpha\beta^*(1-q)\frac{\partial U_q}{\partial p_i} = \frac{\partial S_q}{\partial p_i} - \alpha. \quad (3.11)$$

Damit ergibt sich dann

$$\begin{aligned} & \alpha\beta^*(1-q)\frac{dU_q}{d\beta^*} \\ & \stackrel{(3.9)}{=} \alpha\beta^*(1-q) \sum_i \frac{\partial U_q}{\partial p_i} \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right) \\ & \stackrel{(3.11)}{=} \sum_i \left( \frac{\partial S_q}{\partial p_i} - \alpha \right) \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right) \\ & = \sum_i \frac{\partial S_q}{\partial p_i} \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right) - \alpha \sum_i \left( \frac{\partial p_i}{\partial \beta^*} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{d\beta^*} \right) \\ & \stackrel{(3.10)}{=} \frac{dS_q}{d\beta^*}, \end{aligned}$$

und schließlich die gesuchte Beziehung

$$\frac{dS_q}{dU_q} = \frac{dS_q/d\beta^*}{dU_q/d\beta^*} = \alpha\beta^*(1-q).$$

Mit der Umbenennung  $T^{(1)}(q) \equiv T^*(q) = 1/\beta^*(q)$  gelten also statt (3.6) die Beziehungen

$$\frac{\alpha(1-q)}{T^*(q)} = \frac{\partial S_q^{(1)}}{\partial U_q} \quad \text{und} \quad \frac{1}{T^{(3)}(q)} = \frac{\partial S_q^{(3)}}{\partial U_q}$$

und damit für die Beziehung zwischen  $T^*(1/q)$  und  $T^{(3)}(q)$ :

$$\begin{aligned} T^{(3)}(q) &= \frac{T^*(1/q)}{\alpha(1-1/q)} \left( \sum_i p_i^{1/q} \right)^{q+1} \\ &= q T^*(1/q) \left( Z_{1/q}^{(1)} \right)^{1-1/q} \left( \sum_i p_i^{1/q} \right)^{q+1}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Um zu zeigen, daß diese Beziehung richtig ist, zeigt die folgende Abbildung 3.19 die innere Energie der im letzten Abschnitt bereits untersuchten Kette von 32 Ising-Spins mit periodischen Randbedingungen für den  $q$ -Wert  $q = 0.5$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T^{(3)}(q)$ , wobei die durchgezogene Kurve direkt mit der dritten  $p_i$ -Verteilung berechnet wurde und die einzelnen Datenpunkte ( $\square$ ) unter Verwendung der ersten Version der kanonischen Gleichgewichtsverteilung bei  $1/q = 2.0$  nach Transformation der Temperatur mittels Gleichung (3.12) bestimmt worden sind.

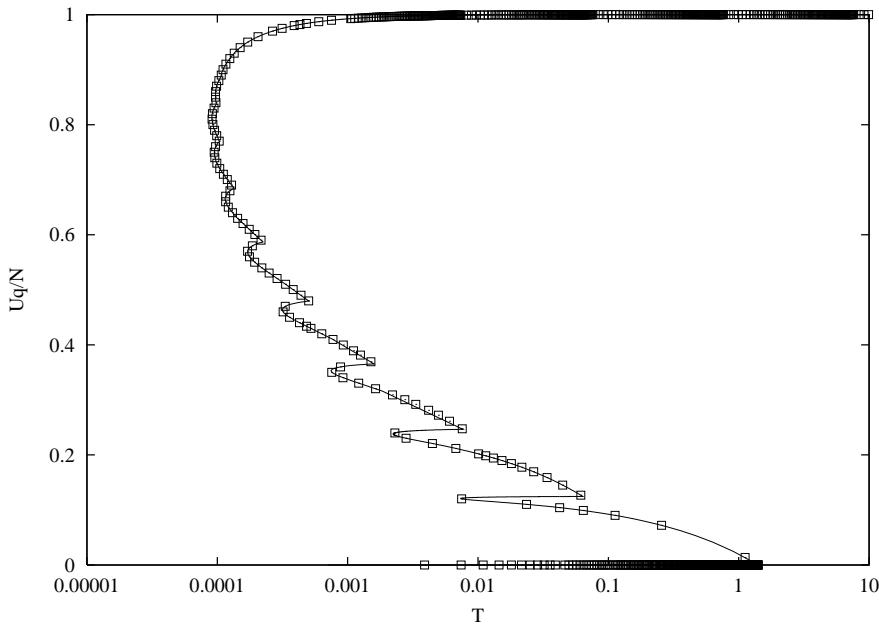


Abb. 3.19: Innere Energie einer Kette von  $N = 32$  Ising-Spins, berechnet mit dritter (durchgezogene Kurve) und erster ( $\square$ ) Wahl der kanonischen Gleichgewichtsverteilung bei  $q = 0.5$

Man erkennt, daß die Werte sehr gut übereinstimmen. Betrachtet man die in Abbildung 3.20 dargestellten Beziehungen  $T(T')$  für die dritte und  $T(T^* = T'')$  für die erste Wahl der kanonischen Verteilung, so sieht man deutlich, daß (3.12) nichts anderes ist als die bereits bekannte  $T-T'$ -Transformation, wobei für die erste Version  $T' \rightarrow T'' = T'/q$ . Dies folgt natürlich auch aus der bereits wiedergegebenen Argumentation von Tsallis et al.

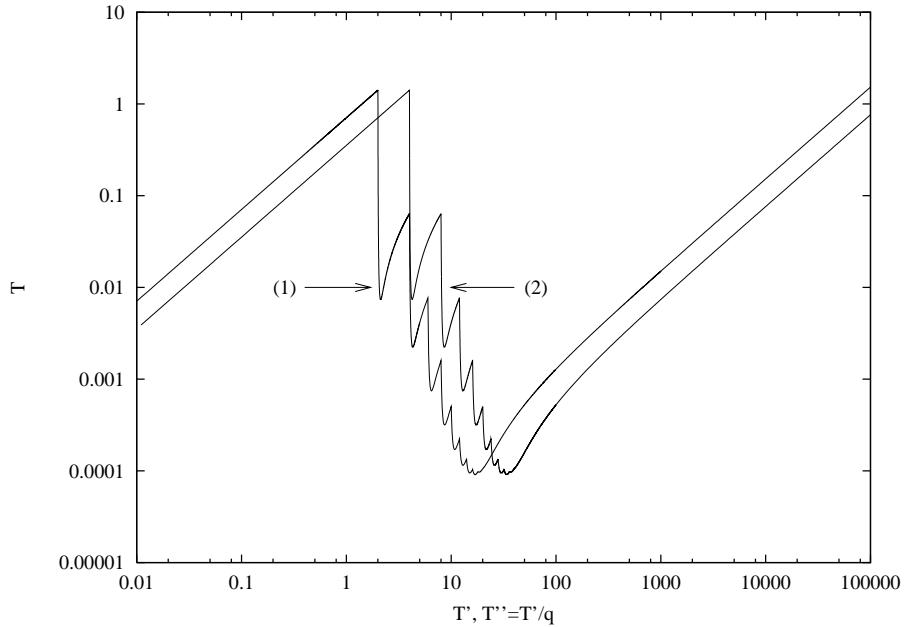


Abb. 3.20: Funktionen  $T(T')$  (1) und  $T(T'' = T^*)$  (2) für  $N = 32$  und  $q = 0.5$

### 3.3.2 Diskussion der veröffentlichten Ergebnisse

Somit ist nun auch klar, daß das von Andrade festgestellte Verhalten, daß nämlich  $C_q$  im Falle nicht-positiver Energiezustände für alle „Temperaturen“  $T^*$  verschwindet, wenn  $N \rightarrow \infty$ , nicht zutrifft. Es vergrößert sich mit wachsendem  $N$  lediglich der Bereich der negativen  $T^*$ , die man berücksichtigen muß, um den gesamten  $T$ -Bereich abzudecken. Rechnerisch funktioniert dies (wie auch schon im vorigen Abschnitt) nicht. Es ist jedoch möglich, mittels der Iterationsmethode die vollständigen Kurven  $U_q(T)$  zu bestimmen. Abbildung 3.21 zeigt die Ergebnisse der Iteration für  $q = 1.5$  ( $r = 2$ ) und negative Energiewerte.

Für den Fall positiver Energiezustände und  $q = 2$  ist in Abbildung 3.22 (rechte Hälfte) die innere Energie gegen den Parameter  $T^* = T''$  aufgetragen. Durch Ableitung nach  $T^*$  erhält man daraus die in Abb. 3.17 (c) gezeichneten Kurven. In diesem Fall können durch Transformation auf die Temperatur  $T$  nach Gleichung

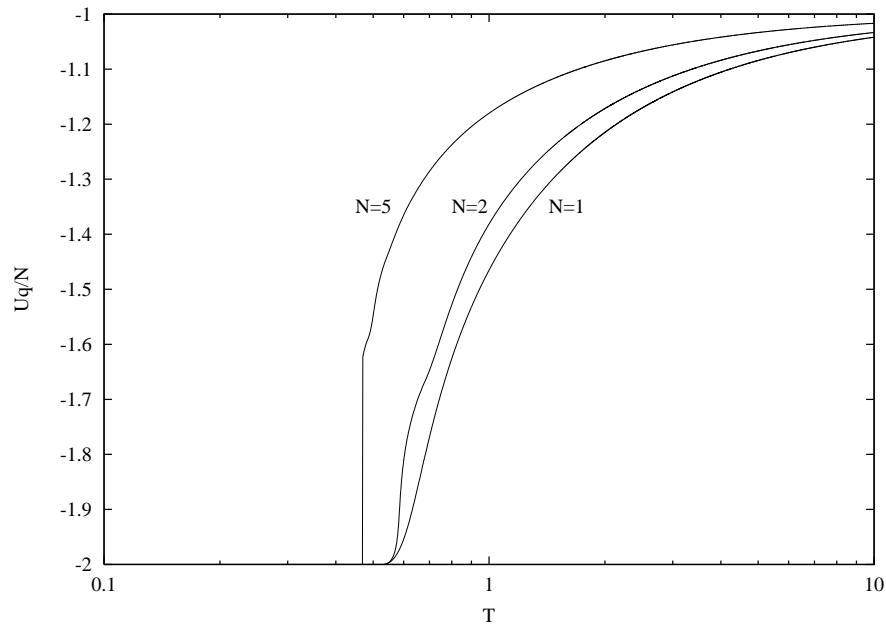


Abb. 3.21: Mit der Iterationsmethode berechnete innere Energie für  $q = 1.5$  und verschiedene  $N$  für ausschließlich nicht-positive Energiezustände

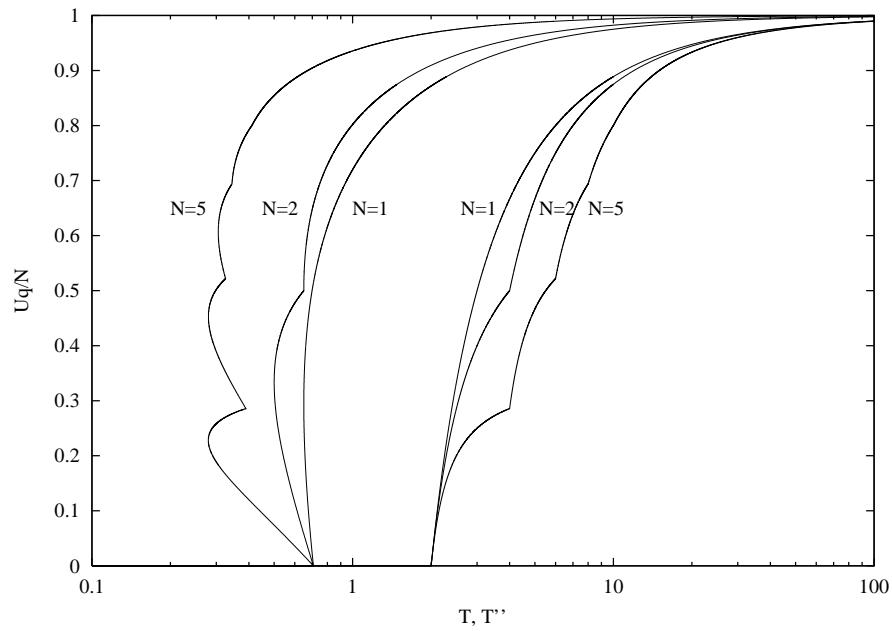


Abb. 3.22: Innere Energie in Abhängigkeit von  $T$  (linke Hälfte) und  $T^*$  (rechte Hälfte) für  $q = 2$  und nicht-negative Energiewerte

(3.12) die Kurven erhalten werden, die in der linken Hälfte der Abbildung dargestellt sind.

Zunächst stellt man fest, daß  $U_q(T^*)$  für  $N > 1$  wieder die Treppenstruktur zeigt, die bereits im vorangegangenen Abschnitt im Zusammenhang mit der Cut-off-Bedingung bzw. der Forderung strikt positiver Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  diskutiert worden ist. Damit ist auch das Auftreten des mehrdeutigen Verhaltens von  $U_q(T)$  erklärt und die Maßnahmen zur Wiederherstellung der Eindeutigkeit und damit der thermodynamischen Stabilität liegen auf der Hand.

Nach Identifikation von Gleichung (3.12) als Transformation von  $T^* = T'/q$  auf  $T$  ist mit den Ergebnissen des vorigen Abschnitts klar, daß das von Andrade festgestellte qualitativ unterschiedliche Verhalten für positive und negative Energiezustände bei Betrachtung in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  nicht auftritt. Es trifft allerdings tatsächlich zu, daß die spezifische Wärme  $C_q$  im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  für alle Temperaturen  $T$  verschwindet, da (wie in Abschnitt 3.2 festgestellt) die Temperatur, bei der die Kurve der inneren Energie durch die Entfernung der Schleife in  $F_q(T)$  abgeschnitten wird, mit steigender Systemgröße schnell gegen Null geht und der Sprung in der inneren Energie gleichzeitig immer größer wird, so daß im thermodynamischen Limes ein Sprung von  $U_{\min}$  auf  $U_{\max}$  bei  $T = 0$  zu erwarten ist, die innere Energie also für alle positiven Temperaturen konstant ist. Diese Feststellung ist zu unterscheiden von Andrades Beobachtung verschwindender spezifischer Wärme im thermodynamischen Limes, da dort nicht der vollständige relevante Temperaturbereich betrachtet wurde.

In [39] wird dasselbe System erneut untersucht, diesmal jedoch unter Verwendung der zweiten kanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung. Da in dieser Formulierung bei der Berechnung der Erwartungswerte der inneren Energie die einzelnen Energiezustände mit  $p_i^q$  gewichtet werden,  $U_q$  also wegen  $\sum_{i=1}^W p_i^q \neq 1$  von der Anzahl  $W$  der möglichen Zustände abhängt, wird eine „normierte“ Größe  $\bar{U}_q = W^{q-1} U_q$  eingeführt.

Betrachtet werden die beiden Familien von  $q$ -Werten

$$q_r^- = q^- = \frac{r-1}{r} \quad \text{und} \quad q_r^+ = q^+ = \frac{r+1}{r} \quad \text{mit } r = 1, 2, \dots,$$

mit denen sich die Zustandssummen vereinfachen zu

$$Z_{q^-}^{(2)} = \sum_{i=1}^W \left(1 - \frac{\beta \varepsilon_i}{r}\right)^r \quad \text{und} \quad Z_{q^+}^{(2)} = \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{\beta \varepsilon_i}{r}\right)^{-r}.$$

Nun stellt Andrade fest, daß man eine Beziehung zwischen diesen Zustandssummen und den entsprechenden Ausdrücken bei Benutzung der ersten  $p_i$ -Verteilung angeben kann, nämlich

$$Z_{q^-}^{(2)} = Z_{q^+}^{(1)} \quad \text{und} \quad Z_{q^+}^{(2)} = Z_{q^-}^{(1)}.$$

Das ist zwar formal richtig, man sollte jedoch im Hinterkopf behalten, daß die Größen  $\beta^{(1)}$  und  $\beta^{(2)}$  unterschiedliche Bedeutung haben. Im Fall (2) ist  $\beta$  der Lagrange–Parameter der Nebenbedingung zur inneren Energie, im Fall (1) ist das nicht der Fall. Vom Standpunkt der dritten Formulierung der kanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung aus gesehen, unterscheiden sich die beiden Parameter jedoch nur um den Faktor  $q$ , da mit den in den Abschnitten 1.2 und 3.3.1 eingeführten Bezeichnungen  $\beta^{(2)} = \beta'$  und  $\beta^{(1)} = \beta^* = \beta'' = q\beta'$  ist.

Abbildung 3.23 zeigt eine Rekonstruktion der Ergebnisse aus [39].

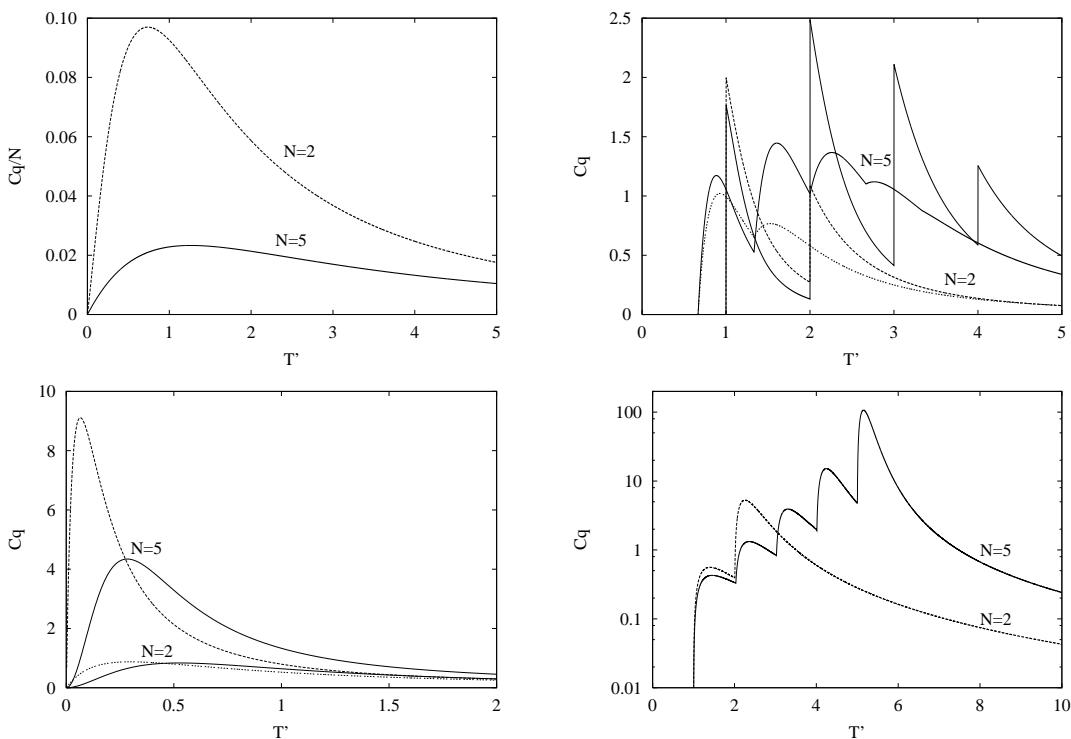


Abb. 3.23: Reproduktion der Ergebnisse von R. F. S. Andrade [39] für die spezifische Wärme  $\bar{C}_q$  einer Kette von  $N + 1$  Ising–Spins: (o. l.)  $q = 2/3$  und negative Energien, (o. r.) positive Energien und  $q = 1/2$  (scharfe Peaks) bzw.  $q = 2/3$  (glatte Kurven), (u. l.) positive Energien und  $q = 2$  (gestrichelt) bzw.  $q = 1.5$  (durchgezogen), (u. r.) negative Energien,  $q = 1.5$

Die ersten beiden Abbildungen (obere Reihe) sind denen aus der vorangegangenen Arbeit [38] sehr ähnlich. Bei negativen Energiezuständen ergeben sich wieder glatte Kurven für die spezifische Wärme, während bei positiven Energien das bereits bekannte oszillierende Verhalten auftritt, das von der treppenartigen Struktur der inneren Energie herrührt. Da die Wahrscheinlichkeiten der ersten und dritten Version der Gleichgewichtsverteilung durch Gleichung (3.5) verknüpft sind und (wegen der Äquivalenz von dritter und zweiter Version wenn in Abhängigkeit von  $\beta'$  betrachtet) auch die Wahrscheinlichkeiten von zweiter und dritter Version, ist

klar, daß die scharfen Peaks in der spezifischen Wärme, die in [38] bei  $q = 2$  auftreten, hier bei  $q = 1/2$  zu beobachten sind.

Der größte Unterschied zwischen den Abbildungen 3.17 (c) und (d) einerseits und 3.23 (o. r.) andererseits ist die Tatsache, daß hier die Höhe der Peaks mit steigender „Temperatur“ nicht mehr monoton abnimmt, sondern zunächst ansteigt, um dann zu hohen Temperaturen hin abzufallen.

Dieses Verhalten, das auch in Abb. 3.23 (u. r.) zu beobachten ist, hängt jedoch nur mit der ungeschickt gewählten Normierung der Erwartungswerte (hier der inneren Energie) zusammen. Die Normierung ist von Andrade nämlich gerade so gewählt, daß für hohe Temperaturen  $T' \rightarrow \infty$  der Erwartungswert von Eins  $\langle 1 \rangle_q = \sum_{i=1}^W p_i^q = 1$  ist, da  $p_i \xrightarrow{T' \rightarrow \infty} 1/W$  für alle  $i$ . Wählt man die Normierung so, daß immer  $\langle 1 \rangle_q = 1$ , wählt also  $\bar{U}_q = U_q / \sum_i p_i^q = \langle\langle E \rangle\rangle_q$ , ist das monotone Abklingen der Amplitude der Oszillation in der spezifischen Wärme wiederhergestellt, wie man in der folgenden Abbildung sieht.

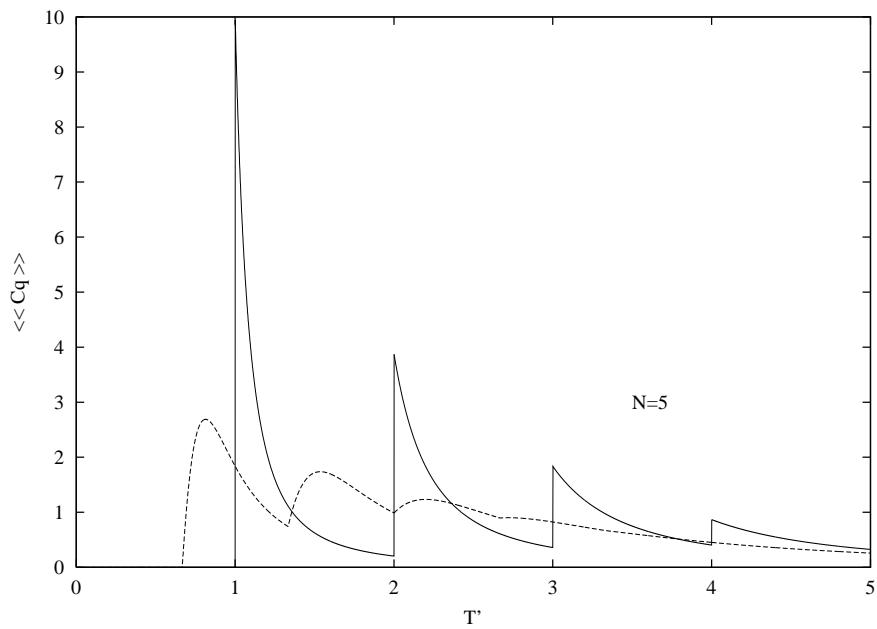


Abb. 3.24: Spezifische Wärme  $\langle\langle C \rangle\rangle_q$  für  $q = 1/2$  (scharfe Peaks) und  $q = 2/3$

Mit dieser Normierung (die Andrade bei seiner Herangehensweise zugegebenermaßen nicht hätte wählen können, da er die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  gar nicht explizit berechnet hat) ist es nun möglich, die Transformation von  $T'$  auf die Temperatur  $T$  vorzunehmen. Als Ergebnis der Transformation ist in Abbildung 3.25 für  $N = 5$  die innere Energie gegen die Temperatur aufgetragen. Die Kurven für  $q = 1/2$  und  $q = 2/3$  sind exakt identisch mit denen, die bei der Diskussion der Ergebnisse aus [38] für  $q = 2$  und  $q = 3/2$  erhalten wurden.

Neu in [39] ist die Untersuchung des Falls  $q > 1$ . So stellt der Autor für den

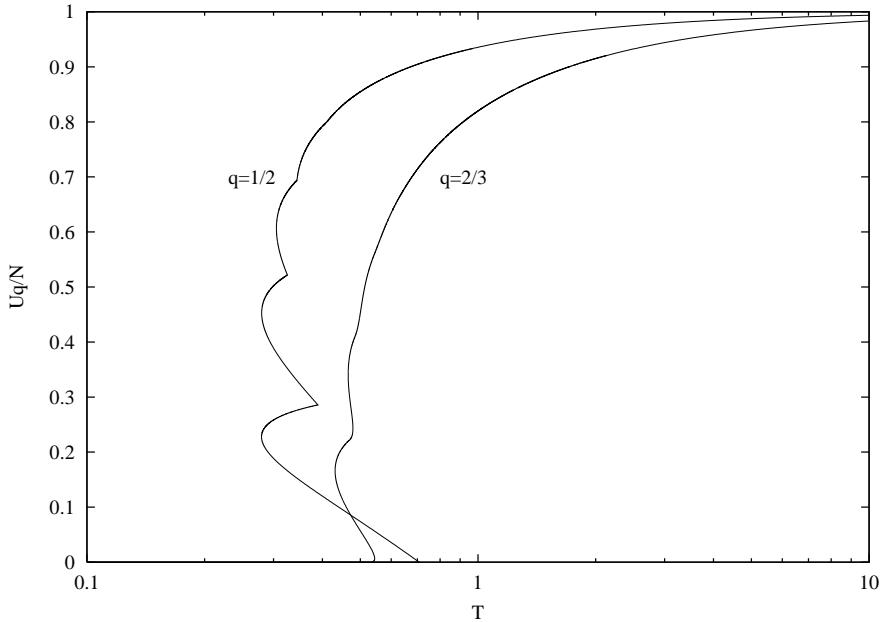


Abb. 3.25: Innere Energie  $U_q$  nach der  $T-T'$ -Transformation, vgl. Abb. 3.22

Fall ausschließlich negativer Energiezustände das in Abb. 3.23 (u. r.) dargestellte seltsame Verhalten fest, daß es nämlich eine Reihe hoher Peaks in der spezifischen Wärme gibt, deren Höhe zunächst mit  $T'$  ansteigt bis  $C_q$  schließlich nach dem höchsten Peak monoton abfällt. Ursache dieses Verhaltens vom Standpunkt der dritten Version der Thermostatistik ist die Berücksichtigung eines zu großen Bereichs von  $T'$ . In Abschnitt 3.2 wurde gezeigt, daß man die Werte  $T' \in [(1-q)E_0, \infty[$  berücksichtigen muß, um den Temperaturbereich  $T \in [0, \infty[$  zu erhalten. Im abgebildeten Fall  $N = 5$  und  $q = 1.5$  ist der niedrigste  $T'$ -Wert, der berücksichtigt werden muß,  $T'_{min} = 5$ . Beachtet man dies, so weist die spezifische Wärme nur noch ein Maximum auf.

Alle von Andrade in [38, 39] beobachteten Eigenschaften des eindimensionalen Ising-Modells in der Tsallis-Statistik können also vom Standpunkt der aktuellen (dritten) Formulierung erklärt werden. Es wurde gezeigt, daß alle Versionen der kanonischen Gleichgewichtsverteilung nach Ausführung der Transformationen (3.2) oder (3.12) und Einführung einer geeigneten Normierung der Erwartungswerte im Falle der zweiten Formulierung schließlich auf dieselben Ergebnisse führen. Tirnaklı et al. haben in [40] Andrades Ergebnisse aus [38] bestätigt, jedoch keine neuen Erkenntnisse über das Verhalten des betrachteten Systems in der verallgemeinerten statistischen Mechanik erhalten.



# Kapitel 4

## Das Ising–Modell in zwei Dimensionen

Im vorigen Kapitel wurde das eindimensionale Ising–Modell als Beispiel eines bekannten und ausführlich untersuchten statistischen Systems in der Tsallis–Statistik betrachtet, wobei ein besonderes Augenmerk auf den Eigenschaften der  $\beta-\beta'$ –Transformation bzw. den Einflüssen von Gundzustandsenergie und Cut–off–Bedingung auf diese lag. Außerdem wurden die im zweiten Kapitel eingeführten Monte–Carlo–Methoden auf ihre Anwendbarkeit und Zuverlässigkeit getestet.

In diesem Kapitel wird das Ising–Modell in zwei Dimensionen vor allem unter der Fragestellung betrachtet, ob der im Boltzmann–Gibbs–Grenzfall auftretende Phasenübergang zweiter Ordnung auch für  $q \neq 1$  zu beobachten ist.

Auch in diesem Fall existiert ein analytischer Ausdruck für die Zustandsdichte  $g(E)$  des zweidimensionalen Ising–Modells auf einem quadratischen Gitter der Größe  $N = L^2$  mit periodischen Randbedingungen. Dieser Ausdruck wurde von Paul D. Beale [43] aus einer Niedrigtemperatur–Reihenentwicklung der Zustandssumme des Systems erhalten.

Damit können die thermodynamisch relevanten Größen wieder exakt berechnet werden, und Monte–Carlo–Rechnungen werden nur zu Beginn kurz vorgestellt, um zu demonstrieren, daß die bekannten Methoden auch in zwei Dimensionen zufriedenstellende Ergebnisse liefern.

Da im vorigen Kapitel gezeigt worden ist, daß die Grundzustandsenergie keinen Einfluß auf die thermodynamischen Erwartungswerte (betrachtet in Abhängigkeit von  $T$ ) hat, wird hier zur Vermeidung rechnerischer Schwierigkeiten die Grundzustandsenergie mit dem Nullpunkt der Energieskala identifiziert.

Die Hamilton–Funktion des Modells hat die Gestalt

$$H/J = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - s_i s_j),$$

wobei sich die Summe über alle Paare benachbarter Gitterplätze erstreckt. Der Faktor  $1/2$  ist lediglich Konvention und wurde hier gewählt, um die Energieska-

la der in [46] benutzten anzugelichen. Die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes im extensiven Grenzfall  $q = 1$  beträgt bei Benutzung dieser Hamilton-Funktion  $T_c^\infty = [2 \operatorname{artanh}(\sqrt{2} - 1)]^{-1} = 1.13459 \dots$

## 4.1 Eigenschaften des Systems

Für ein Ising-System mit  $N = 10^2$  Spins wurde die innere Energie  $U_q$  mit verschiedenen Monte-Carlo-Methoden berechnet. Die folgende Abbildung 4.1 zeigt die Ergebnisse, die für zwei verschiedene  $q$ -Werte durch exakte Rechnung ( $\bullet$ ) und mit der AS-Methode ( $\circ$ ) erhalten wurden in Abhängigkeit von der Hilfsgröße  $T'$ . Die durchgezogenen Kurven wurden mit Hilfe der Histogramm-Methode aus den Daten der AS-Simulation bestimmt. Man erkennt eine hervorragende Übereinstimmung der Monte-Carlo- mit den exakten Werten. In diesem Maßstab ist die numerisch berechnete (Histogramm)Kurve von der exakten nicht zu unterscheiden. Deshalb wurden einzelne exakte Werte zusätzlich als Punkte eingezeichnet.

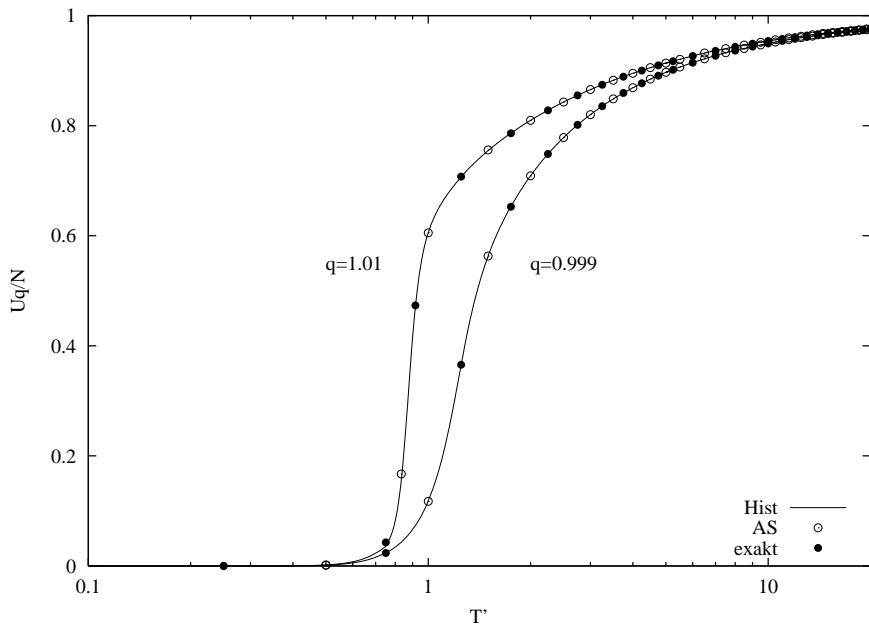


Abb. 4.1: Innere Energie  $U_q(T')/N$  für ein 2D Ising-System mit  $N = 10^2$  Spins und zwei verschiedene  $q$

Abbildung 4.2 zeigt die innere Energie desselben Systems in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$ . Die durchgezogene Kurve repräsentiert in diesem Fall die Ergebnisse einer Simulation mit der HOW-Methode, während die einzelnen Datenpunkte exakte Werte ( $\bullet$ ) und mit der Salazar-Methode auf  $T$  transformierte AS-Werte ( $\circ$ ) darstellen. Auch diese Werte stimmen hervorragend überein.

Nachdem nun mit diesen Beispielen demonstriert ist, daß die im zweiten Kapitel

eingeführten Monte–Carlo–Methoden auch in zwei Dimensionen zufriedenstellende Ergebnisse liefern, kann die weitere Untersuchung des Systems mit der schnelleren exakten Rechnung erfolgen. Dazu ist es wie im vorangegangenen Kapitel sinnvoll, die Fälle  $q < 1$  und  $q > 1$  wegen des sehr unterschiedlichen Verhaltens getrennt zu betrachten.

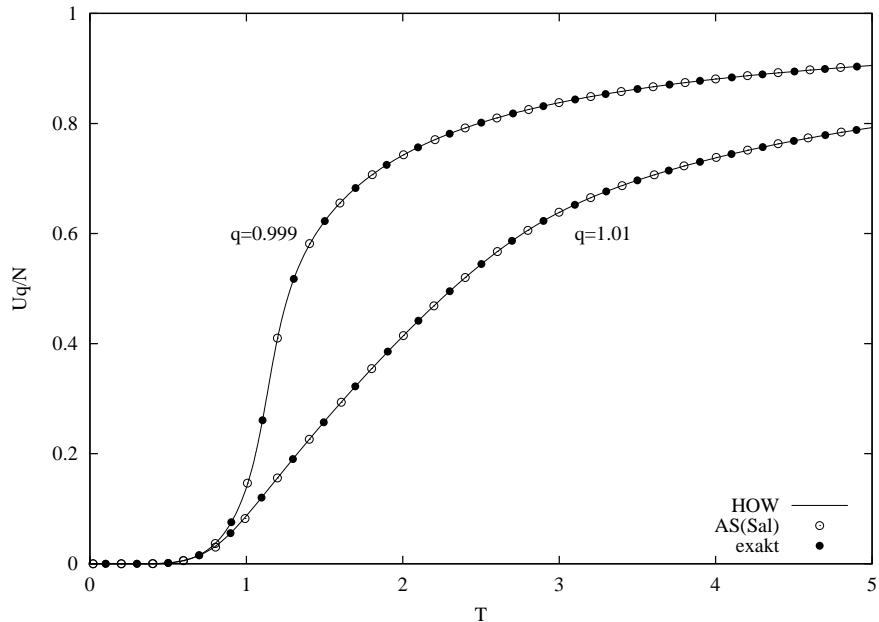


Abb. 4.2: Innere Energie desselben Systems in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$

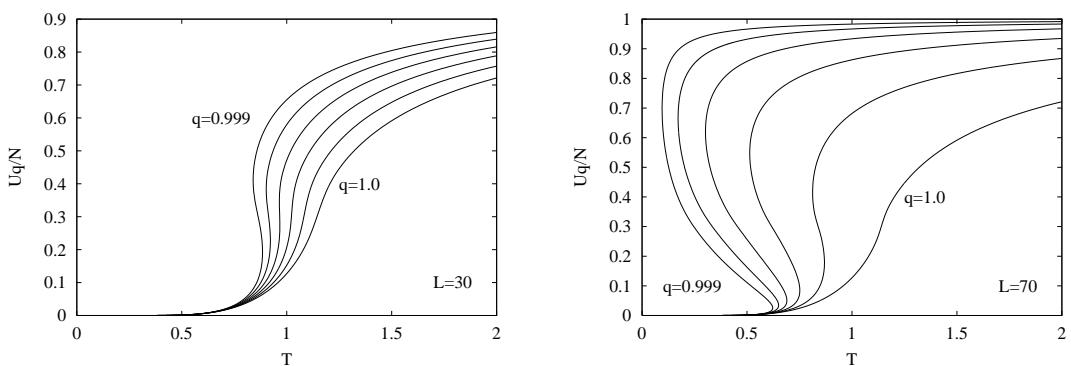


Abb. 4.3: Innere Energie  $U_q(T)/N$  für verschiedene  $q$  und  $L = 30$  (links) bzw.  $L = 70$  (rechts)

Für den Fall  $q \leq 1$  ist in Abbildung 4.3 die innere Energie für Ising–Systeme verschiedener Größe gegen die Temperatur aufgetragen. Man erkennt wieder die be-

reits vom eindimensionalen Fall bekannten Mehrdeutigkeiten in der  $U_q(T)$ -Kurve, die mit wachsender Systemgröße und mit sinkendem  $q$ -Wert stärker ausgeprägt werden. Die Ursachen dieses Verhaltens sind in Kapitel 3 ausführlich diskutiert worden.

Wie bereits im vorigen Kapitel muß auch hier die thermodynamische Stabilität durch Beseitigung der unphysikalischen Zustände in der Kurve der freien Energie  $F_q(T)$  wiederhergestellt werden. Das Ergebnis dieses Eingriffs für die Systemgröße  $L = 70$  und  $q$ -Werte von 0.999 bis 1.0 ist in der folgenden Abbildung 4.4 dargestellt.

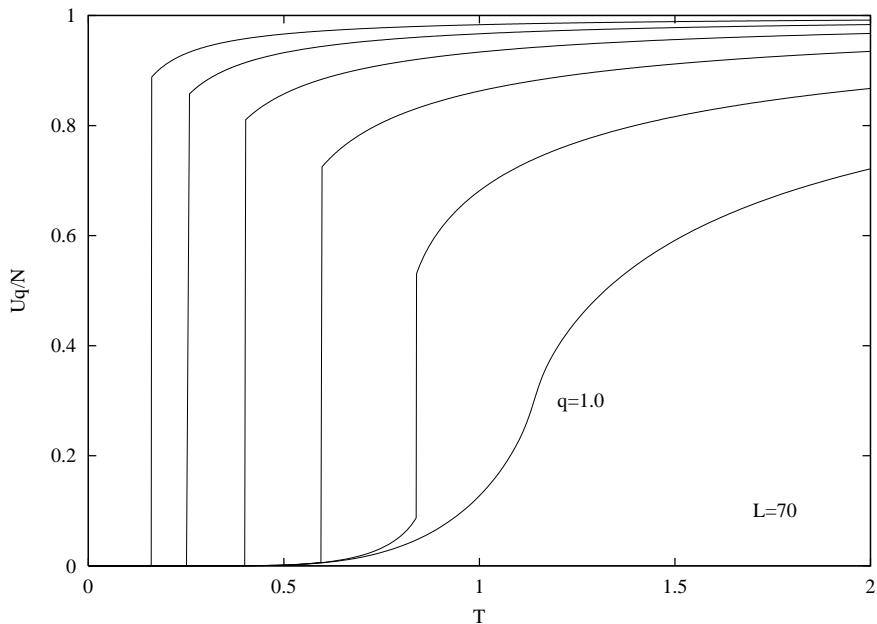


Abb. 4.4: Innere Energie  $U_q(T)/N$  für  $L = 70$  nach Wiederherstellung der thermodynamischen Stabilität

Man erkennt wie bereits in einer Dimension, daß die innere Energie bei einer Temperatur  $T_t$  einen endlichen Sprung aufweist. An dieser Stelle gibt es damit auch eine Diskontinuität der Entropie, so daß  $T_t$  als Übergangstemperatur betrachtet werden kann.

Da diese Werte für Systeme endlicher Größe bestimmt worden sind, wurden in der folgenden Abbildung 4.5 die Übergangstemperaturen  $T_t$  für verschiedene  $q < 1$  gegen die inverse Systemgröße  $1/L$  aufgetragen. Die Übergangstemperaturen im thermodynamischen Limes  $L \rightarrow \infty$  ergeben sich dann als die Grenzwerte von  $T_t$  für  $1/L \rightarrow 0$ . Man erkennt, daß für alle  $q \neq 1$  die Übergangstemperatur mit steigender Systemgröße sehr schnell fällt. Für  $q = 1$  strebt  $T_t \rightarrow 1.13 \dots = T_c^\infty$ . Damit ist klar, daß es für  $q < 1$  keinen Phasenübergang des zweidimensionalen Ising-Modells gibt.

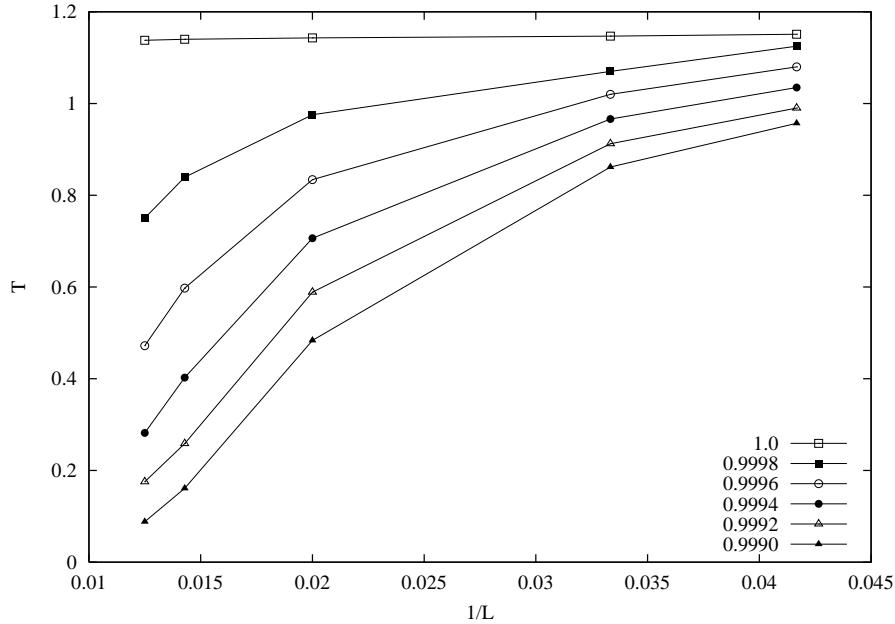


Abb. 4.5: Zur Bestimmung der Übergangstemperatur  $T_t$  im thermodynamischen Limes  $1/L \rightarrow 0$

Für  $q > 1$  wird die Cut-off-Bedingung bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten  $\{p(E)\}$  nicht benötigt, da der Energienullpunkt so gewählt ist, daß alle Energiewerte nicht-negativ sind. Damit erwartet man auch keine Unstetigkeiten und Mehrdeutigkeiten in der inneren Energie. Und wie bereits in einer Dimension gesehen, treten auch tatsächlich keine solchen instabilen Zustände auf.

Abbildung 4.6 zeigt die innere Energie  $U_q(T)/N$  für ein System der Größe  $N = 50 \times 50$  und verschiedene  $q > 1$ . Man erkennt ein Verhalten, das deutlich von dem im Fall  $q < 1$  gezeigten abweicht. Es treten keine Diskontinuitäten der inneren Energie auf. Statt dessen weisen die Kurven „Knicke“ an Stellen auf, an denen sich die Ableitung der inneren Energie (spezifische Wärme) abrupt ändert.

Die Ursache dafür ist die  $T-T'$ -Transformation bzw. die  $U_q(T')$ -Beziehung, wie man anhand von Abbildung 4.7 erkennen kann. Dort ist nämlich in der linken Hälfte der Abbildung die Beziehung zwischen  $T$  und  $T'$  für dasselbe System dargestellt. Die Kurven zeigen einen Bereich, in dem sich die Temperatur  $T$  zwar sehr stark, aber nicht diskontinuierlich ändert. Dieser Bereich wird umso größer, je größer der Parameter  $q$  wird. Dieses Verhalten der abrupten Änderung mit der Hilfsgröße  $T'$  weist auch die in der rechten Hälfte der Abbildung dargestellte innere Energie auf. Wie bereits erwähnt, ist hierfür nicht die Cut-off-Bedingung verantwortlich, die in der Vorschrift zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(E)$  auftritt.

Die Bereiche, in denen sich  $T$  in Abhängigkeit von  $T'$  stark ändert, werden nicht nur mit steigendem  $q$  größer, sondern auch mit wachsender Systemgröße. Die

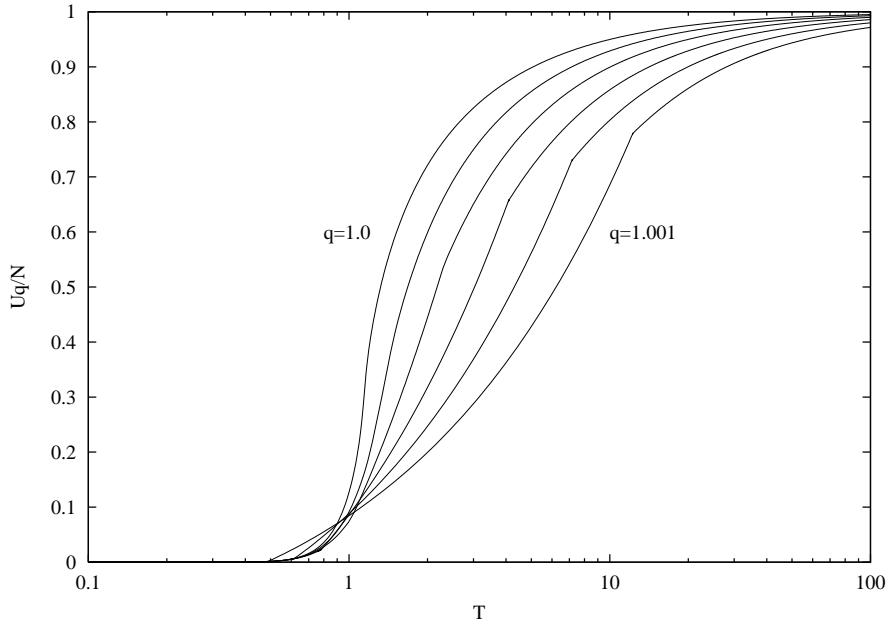


Abb. 4.6: Innere Energie eines Systems von  $N = 50 \times 50$  Ising-Spins für verschiedene  $q > 1$

Werte von  $T$ , die diese Bereiche begrenzen, gehen für  $N \rightarrow \infty$  gegen Null und Unendlich. Das heißt, daß die Kurven von  $U_q(T)$  im thermodynamischen Limes keine „Knicke“ mehr aufweisen.

Damit ist auch klar, daß es für  $q > 1$  im thermodynamischen Limes ebensowenig einen Phasenübergang gibt wie bei endlichen Systemgrößen.

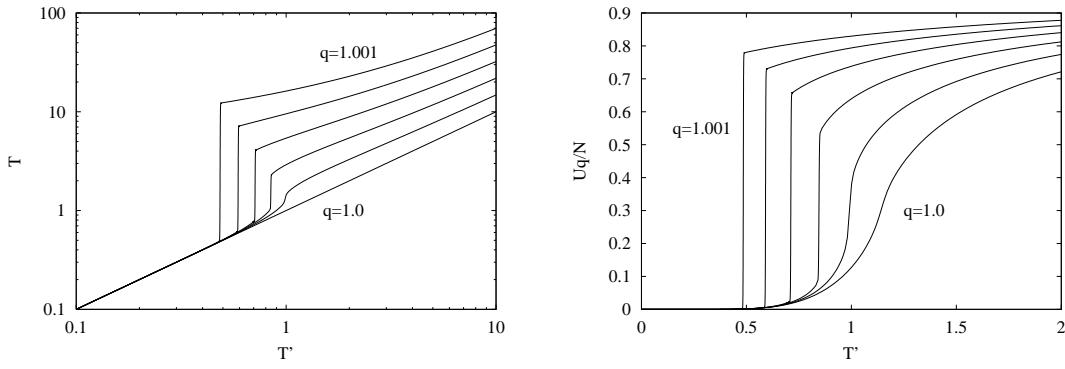


Abb. 4.7:  $T-T'$ -Beziehung für ein System der Größe  $N = 50 \times 50$  und  $q \in [1.0, 1.001]$  (links), Innere Energie  $U_q(T')/N$  für dasselbe System (rechts)

## 4.2 Vergleich mit der Literatur

Die im vorigen Abschnitt beschriebenen Untersuchungen bestätigen die Ergebnisse von Lima et al. [46], welche besagen, daß das zweidimensionale Ising–Modell für  $q \neq 1$  keinen Phasenübergang aufweist.

Ein abweichendes Ergebnis haben da Silva und Stanley [44] erhalten: Durch Einführung einer thermalen Transmissivitätsvariable und durch Renormierungsgruppentransformationen wurden unter Ausnutzung des Selbstdualität des quadratischen Gitters für verschiedene Energie–Offsets in der Definition der Hamilton–Funktion des Systems verschiedene Temperaturen für den kritischen Punkt des zweidimensionalen Ising–Modells erhalten. Diese Ausdrücke sind nicht nur (wie man es bei Benutzung der zweiten Version der kanonischen Gleichgewichtsgesamtheit nach den Erkenntnissen der vorangegangenen Kapitel erwartet) vom Nullpunkt der Energieskala abhängig, sondern auch vom Nichtextensivitätspараметer  $q$ . Diese  $q$ –Abhängigkeit der kritischen Temperatur  $T_c$  suggeriert das Vorhandensein eines Phasenübergangs bei endlicher Temperatur für alle  $q$ .

Durch die folgende Argumentation kann hier gezeigt werden, daß dies nicht zutrifft: Da aufgrund der in Abschnitt 1.2 beschriebenen Eigenschaften des kanonischen Ensembles in zweiter Version (Abhängigkeit vom Energienullpunkt, Nichtadditivität der inneren Energie, . . . ) die zugehörige Temperatur keine physikalisch sinnvolle Größe ist, müssen die von da Silva und Stanley berechneten kritischen Temperaturen der  $T$ – $T'$ –Transformation unterzogen, d.h. auf die Temperatur der dritten Version transformiert werden.

Die in [44] benutzte Hamilton–Funktion lautet

$$-\beta H = K_0 + K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j,$$

wobei  $K \equiv \beta J$  und  $K_0$  eine additive Konstante ist. Damit wurden (im in dieser Arbeit stets betrachteten Spezialfall  $J = k = 1$ ) für drei verschiedene Werte von  $K_0$  die drei folgenden kritischen Temperaturen  $K_c^{-1} = T'_c$  erhalten:

$$\begin{aligned} T'_c(K_0 = -K) &= (1-q) \frac{2}{1 - (\sqrt{2}-1)^{1-q}} \\ T'_c(K_0 = 0) &= (1-q) \frac{1 + (\sqrt{2}-1)^{1-q}}{1 - (\sqrt{2}-1)^{1-q}} \\ T'_c(K_0 = K) &= (1-q) \frac{2}{(\sqrt{2}+1)^{1-q} - 1} \end{aligned}$$

Da die thermodynamischen Eigenschaften eines Systems im kanonischen Ensemble der dritten Formulierung von einer Translation des Energiespektrums unabhängig sind, müssen alle drei aufgeführten kritischen Temperaturen  $T'_c$  durch die  $T$ – $T'$ –Transformation auf dasselbe  $T_c$  abgebildet werden.

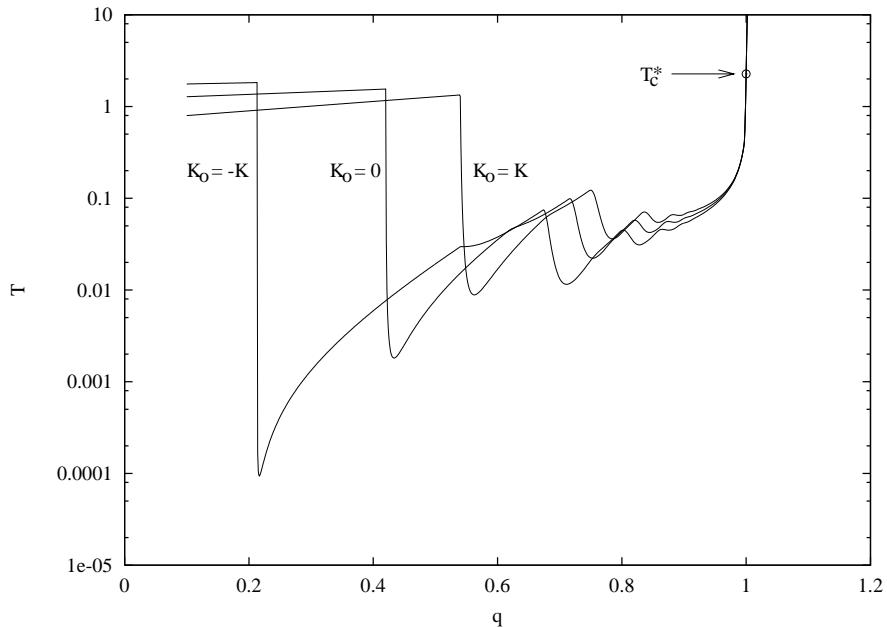


Abb. 4.8: Abhangigkeit der transformierten kritischen Temperaturen  $T_c$  vom Parameter  $q$ , hier fur ein System der Groe  $N = 30 \times 30$ . Die drei Kurven schneiden sich nur in einem einzigen Punkt  $T_c^*$  bei  $q = 1$ . Dieses Verhalten tritt bei allen untersuchten Systemgroen auf.

Durch ausgedehnte und sehr prazise numerische Untersuchung der  $q$ -Abhangigkeit der drei transformierten Werte  $T_c$  mittels eines MATHEMATICA-Programms erkennt man, da die Gleichheit der drei Werte nur fur  $q = 1$  gegeben ist. In diesem Fall sind bereits die drei oben aufgefuerten Werte  $T'_c$  gleich und gerade

$$T'_c = T_c^* = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} = 2.26918 \dots$$

Die  $q$ -Abhangigkeit der transformierten kritischen Temperaturen ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Die drei Kurven fur die drei Energie-Offsets  $K_0$  schneiden sich bei  $q = 1$  und laufen fur niedrige  $q$  sowie fur hoheren  $q$  wieder auseinander. Allerdings steigen die Kurven fur  $q > 1$  so stark, da dieses Verhalten in einem fur eine Abbildung geeigneten Mastab nicht sichtbar ist.

Dieses Ergebnis und die Untersuchungen des vorangegangenen Abschnitts unterstutzen also die Aussage von Lima et al. [46], da das zweidimensionale Ising-Modell einen Phasenbergang bei einer endlichen Temperatur  $T$  nur fur den Fall  $q = 1$  aufweist und zeigt, da das von Cannas und Tsallis in [45] durch Renormierungsgruppentransformationen gefundene Verhalten, da namlich das zweidimensionale Ising-Modell auf einem selstdualen, hierarchischen Gitter in Abhangigkeit von  $T'$  kritisches Verhalten fur alle  $q$  zeigt, die groer als ein gewisser Schwellenwert  $q^*$  sind, in Abhangigkeit von der Temperatur  $T$  nicht auftritt.

# Kapitel 5

## Das $XY$ –Modell in zwei Dimensionen

Als Beispiel eines statistischen Systems, das bisher noch nicht in der Tsallis–Statistik untersucht worden ist, wird in diesem Kapitel das  $XY$ –Modell in zwei Dimensionen betrachtet. Insbesondere dient es auch zum Testen der Broad Histogram–Methode für kontinuierliche Systeme. Das Hauptaugenmerk liegt jedoch auch in diesem Fall auf der Fragestellung, ob es im nichtextensiven Bereich  $q \neq 1$  einen Phasenübergang bei einer endlichen Temperatur gibt.

Das Kapitel gliedert sich in zwei Teile, wovon der erste sich mit dem Vergleich von Ergebnissen befaßt, die mit unterschiedlichen Monte–Carlo–Methoden erhalten worden sind. Im zweiten Abschnitt wird das Verhalten des Systems in Abhängigkeit von Temperatur und  $q$ –Parameter untersucht.

### 5.1 Test der Monte–Carlo–Methoden

#### 5.1.1 Vergleich der AS– und BHMC–Ergebnisse

Um die Zuverlässigkeit der mit der AS– bzw. Metropolis–Methode erhaltenen Ergebnisse testen zu können, wurde zunächst eine Simulation für  $q = 1$  durchgeführt. Für diesen Fall können die erhaltenen Werte mit bereits veröffentlichten Ergebnissen verglichen werden. Gupta und Baillie [47] haben ein System aus  $N = 64^2$  Spins untersucht, das beschrieben wird durch

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j),$$

wobei speziell  $J = 1$  gewählt wurde.

Den dort erhaltenen Werten sind in Tabelle 5.1 die Ergebnisse von Standard–Metropolis–Rechnungen gegenübergestellt. Man erkennt eine gute Übereinstimmung der Werte für die innere Energie. Die Werte für die spezifische Wärme

$T$	$U/N$ [47]	$U/N$	$C/N$ [47]	$C/N$
1/0.70	0.8296(10)	0.8296(1)	0.754(7)	0.765(8)
1/0.74	0.8927(10)	0.8925(1)	0.878(7)	0.868(10)
1/0.78	0.9576(7)	0.9573(2)	1.002(5)	1.00(13)
1/0.82	1.0243(8)	1.0239(2)	1.127(7)	1.11(2)
1.10	1.1752(7)	1.1753(3)	1.393(7)	1.38(3)
1.07	1.2178(7)	1.2178(3)	1.457(7)	1.42(3)
1.04	1.2623(8)	1.2612(4)	1.494(8)	1.51(3)
1.03	1.2772(6)	1.2770(4)	1.512(7)	1.55(4)
1.02	1.2922(10)	1.2924(3)	1.489(9)	1.48(4)
1.01	1.3070(10)	1.3056(4)	1.464(9)	1.49(4)
1.00	1.3213(10)	1.3208(3)	1.409(8)	1.44(4)
0.99	1.3353(9)	1.3351(3)	1.375(7)	1.37(4)
0.98	1.3487(9)	1.3492(2)	1.310(7)	1.29(4)
0.97	1.3614(9)	1.3602(2)	1.260(7)	1.28(5)
0.96	1.3738(9)	1.3743(2)	1.209(6)	1.17(5)
0.95	1.3855(8)	1.3853(2)	1.159(5)	1.17(5)
0.94	1.3969(8)	1.3959(2)	1.107(5)	1.16(5)
0.93	1.4081(8)	1.4078(1)	1.075(5)	1.06(5)
0.92	1.4185(8)	1.4183(1)	1.034(4)	1.03(6)
0.91	1.4289(7)	1.4283(1)	1.002(4)	1.01(6)
0.90	1.4388(7)	1.4387(1)	0.994(4)	0.99(6)
0.89	1.4485(7)	1.4482(1)	0.968(4)	0.96(6)

Tab. 5.1: Vergleich der erhaltenen Ergebnisse mit den Werten aus [47]

stimmen im Rahmen der Fehler überein.

Um im folgenden das Verhalten des XY-Modells für  $q \neq 1$  untersuchen zu können, ohne auf rechnerische Schwierigkeiten aufgrund der Wahl der Energieskala zu stoßen, wird von nun an die Hamilton-Funktion

$$H/J = \sum_{\langle i,j \rangle} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$$

benutzt. Der Kopplungsparameter  $J$  wird wie gehabt auf  $J = 1$  gesetzt.

Durch die Übereinstimmung der erhaltenen Ergebnisse für  $q = 1$  mit den Literaturwerten von der Funktionstüchtigkeit des Programms überzeugt, wurden nach Ersetzung der Metropolis-Akzeptanzwahrscheinlichkeit durch den AS-Ausdruck Rechnungen für  $q \neq 1$  durchgeführt. Abbildung 5.1 zeigt die Ergebnisse für ein System der Größe  $N = 10 \times 10$  und drei verschiedene  $q$ .

In derselben Abbildung sind auch Ergebnisse von Broad-Histogram-Simulationen dargestellt. Dazu wurde das im zweiten Teil von Abschnitt 2.2.2 eingeführte Verfahren benutzt. Da das XY-Modell ein kontinuierliches Energiespektrum auf-

weist, ist es notwendig, eine Diskretisierung einzuführen, um die benötigten Größen  $\langle N(\dots) \rangle$  berechnen zu können. Im vorliegenden Fall wurde der gesamte Energiebereich in 8000 Intervalle der Breite  $\Delta E = 0.05$  aufgeteilt. Da kein endlicher Wert für die Entartung des Grundzustands anzugeben ist, wurde  $g(E_0 = 0) = 1$  gesetzt, so daß die Methode für jede Energie  $E$  die Größe  $g(E)/g(0)$  liefert. Dies beeinflußt die Berechnung der Erwartungswerte

$$\langle\langle \mathcal{O} \rangle\rangle_q = \frac{\sum_E g(E) O(E) p^q(E)}{\sum_E g(E) p^q(E)}$$

nicht.

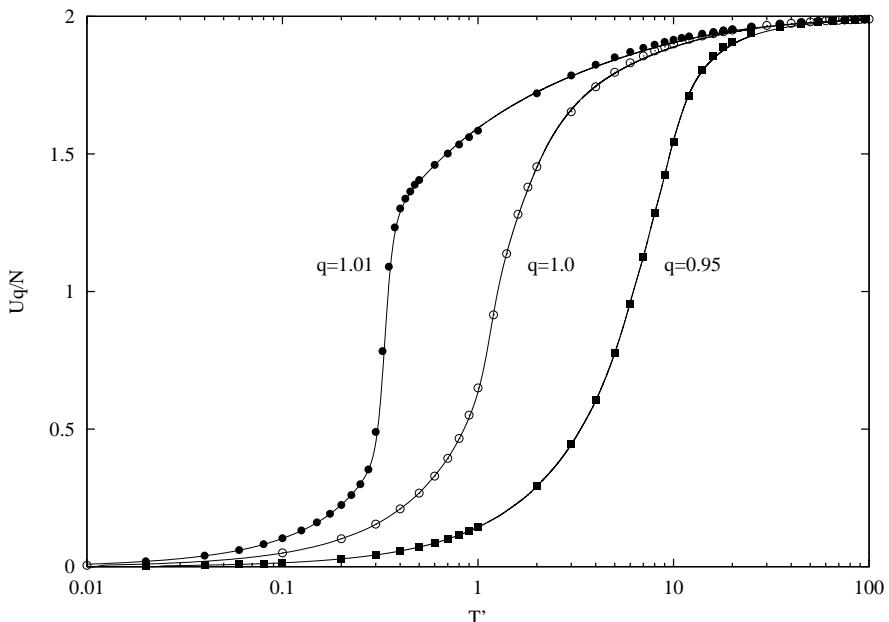


Abb. 5.1: Innere Energie eines zweidimensionalen  $XY$ -Modells mit  $N = 10 \times 10$  Spins für drei verschiedene  $q$ . Die einzelnen Datenpunkte stellen die Ergebnisse der AS-Methode dar, die durchgezogenen Kurven wurden mit der Broad-Histogram-Methode berechnet.

Wie man sieht, stimmen die Ergebnisse der beiden Methoden für große  $T'$  gut überein. Das Verhalten bei niedrigen  $T'$  wird in Abschnitt 5.1.2 näher untersucht. Um nun das Verhalten des Systems in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  betrachten zu können, muß—wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln—die  $T-T'$ -Transformation vorgenommen werden. Dazu gibt es zwei Möglichkeiten: Für die Ergebnisse der BHMC-Rechnung kann die Transformation direkt ausgeführt werden, da nun eine Näherungslösung für die Zustandsdichte  $g(E, \Delta E)$  vorliegt. Die AS-Datenpunkte können mit Hilfe der Salazar-Methode transformiert werden, wobei allerdings ein Problem auftritt. Im Gegensatz zum Fall des

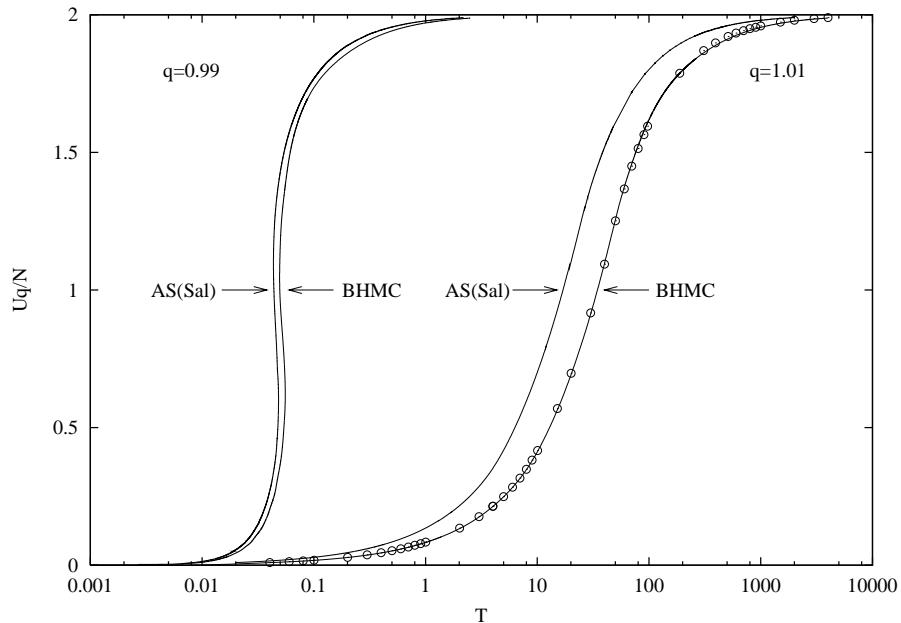


Abb. 5.2: Ergebnisse der  $T-T'$ -Transformation: BHMC-Werte, Salazar-transformierte Histogramm-Daten und skalierte Salazar-Werte ( $\circ$ )

Ising-Modells kann hier die Entropie des Grundzustands nicht ohne weiteres angegeben werden. Deshalb wurde (willkürlich)  $S_q(T'_0 = 0) = 0$  gesetzt. Die so erhaltenen  $T-T'$ -Beziehungen sollten sich dann nur durch einen  $q$ - und  $N$ -abhängigen, aber ansonsten konstanten Skalierungsfaktor unterscheiden. In Abbildung 5.2 sind für  $q = 0.99$  und  $q = 1.01$  die Ergebnisse der Transformation dargestellt. Die Kurven repräsentieren die BHMC- und die mit der Salazar-Methode transformierten Histogrammdaten, die aus AS-Simulationen gewonnen wurden. Die einzelnen Datenpunkte wurden aus der Salazar-Kurve durch Skalierung der  $T-T'$ -Beziehung mit einem konstanten Faktor erhalten. Durch Ausprobieren findet man, daß die Salazar- und die BHMC-Kurve für  $q = 1.01$  aufeinander liegen, wenn  $S_q(T'_0 = 0) \approx 51$ . Um die Kurven für  $q = 0.99$  zur Deckung zu bringen, ist es notwendig  $S_q(T'_0 = 0) < 0$  zu wählen. Nach Kapitel 1 ist die Tsallis-Entropie  $S_q$  jedoch immer größer oder gleich Null. Der Grund für die Abweichungen der oben abgebildeten Kurven kann also nicht nur die Unkenntnis der Entropie des Systems im Grundzustand sein. Dies wird im folgenden Abschnitt näher untersucht.

### 5.1.2 Einfluß der Diskretisierung

Bei genauerer Betrachtung der  $U_q(T')$ -Kurven im Bereich niedriger Werte des Parameters  $T'$  fallen Abweichungen zwischen AS- und BHMC-Werten auf, wie im oberen linken Teil der folgenden Abbildung gezeigt wird. In beiden darge-

stellten Fällen— $q = 0.99$  und  $q = 1.01$ —fallen die BHMC-Kurven zu niedrigen  $T'$ -Werten hin deutlich schneller ab als die entsprechenden AS-Werte, die im dargestellten  $T'$ -Bereich annähernd lineares Verhalten zeigen. Um die Ursachen dieser Abweichungen zu ermitteln, wurde der Einfluß des  $q$ -Wertes, der Größe der bei der Diskretisierung des Energiespektrums benutzten Intervalle  $\Delta E$  und der Systemgröße untersucht. So zeigt der obere rechte Teil der Abbildung 5.3 den entsprechenden Ausschnitt aus der  $U_q(T')$ -Kurve mit  $\Delta E = 0.05$  für verschiedene  $q$ . Man erkennt, daß die auftretende Energiestufe mit steigendem  $q$  größer wird und zu niedrigeren  $T'$ -Werten wandert.

Im unteren linken Teil der Abbildung sind für den festen Wert  $q = 0.99$  die  $U_q(T')$ -Kurven für verschiedene  $\Delta E$  (Zahlen an den Kurven) gezeichnet. Die Energiestufen werden mit fallendem  $\Delta E$  kleiner und wandern zu niedrigeren  $T'$ -Werten. Für große  $T'$  liefern die Rechnungen mit verschiedenen  $\Delta E$  annähernd identische Ergebnisse.

Schließlich zeigt der untere rechte Teil der Abbildung den Einfluß der Systemgröße. Für  $q = 0.99$  und  $\Delta E = 0.05$  sind die  $U_q(T')$ -Kurven für die Systemgrößen  $N \in \{4 \times 4, 6 \times 6, 8 \times 8, 10 \times 10, 12 \times 12\}$  dargestellt. Mit fallender Systemgröße wandern die Energiestufen zu niedrigeren  $T'$  und sind im Fall  $N = 4$  gar nicht mehr vorhanden.

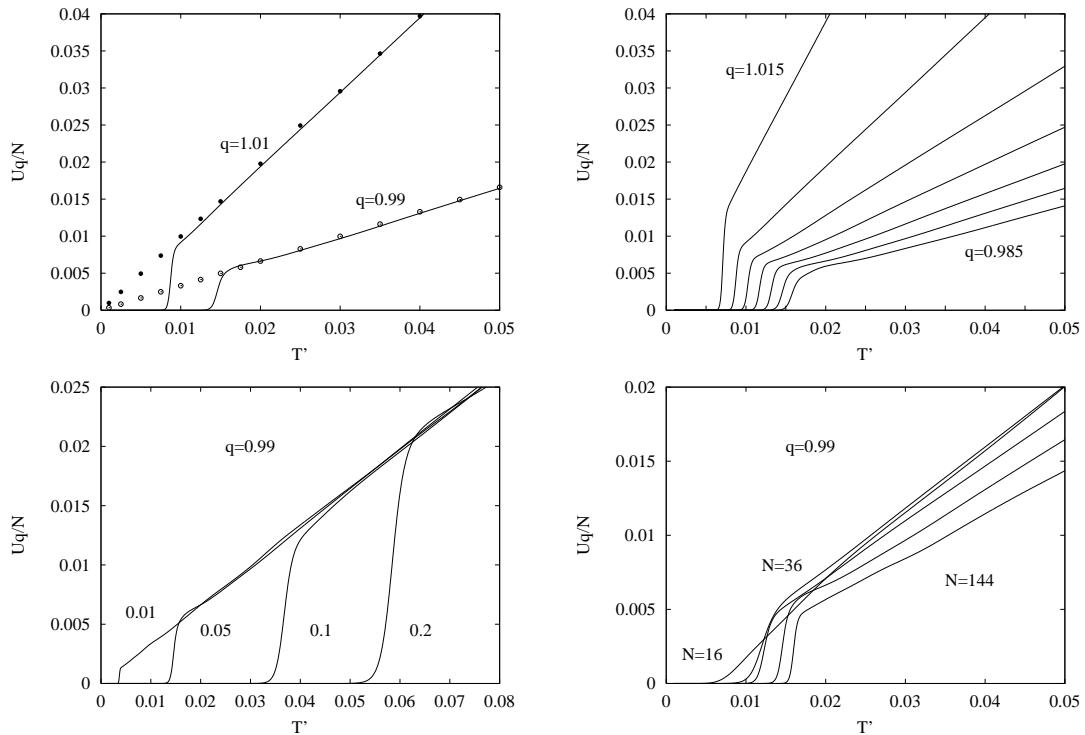


Abb. 5.3:  $U_q(T')/N$  für (o. l.)  $N = 10 \times 10$ ,  $q = 0.99$  und  $q = 1.01$ ,  $\Delta E = 0.05$ , AS- und BHMC-Werte, (o. r.)  $N = 10 \times 10$ , verschiedene  $q$ ,  $\Delta E = 0.05$ , (u. l.)  $N = 10 \times 10$ ,  $q = 0.99$  und verschiedene  $\Delta E$ , (u. r.)  $\Delta E = 0.05$ ,  $q = 0.99$  und verschiedene  $N$

Die Ursache für dieses Verhalten ist die Eigenschaft der Broad–Histogram–Methode in der benutzten Implementierung, für sehr kleine Energien notorisch schlechte Werte zu liefern. Dieses Verhalten wurde bereits in [37] beobachtet. Alle Simulationen wurden bei der Grundzustandsenergie  $E_0 = 0$  gestartet, so daß die Systemenergie—da die Zustandsdichte  $g(E, \Delta E)$  auf der Hälfte des Energiebereichs eine sehr rasch steigende Funktion der Energie ist—sehr schnell anwächst und nicht für alle Intervalle des diskretisierten Energiespektrums tatsächlich Meßwerte erhalten werden. Da es grundsätzlich die niedrigsten positiven Energieintervalle sind, die von dieser Eigenschaft der BHMC–Dynamik betroffen sind, ist klar, daß die Energie des ersten nicht–leeren Energiekanals umso kleiner ist, je kleiner man die Intervalle  $\Delta E$  wählt. Dies äußert sich dann darin, daß die auftretende Energiestufe umso niedriger wird, je kleiner  $\Delta E$  ist.

Bereits beim eindimensionalen Ising–Modells wurde anhand von Abbildung 3.6 gesehen, daß die Kurven der inneren Energie umso steiler werden, je größer der  $q$ –Faktor gewählt wird, und daß der Anstieg der Kurven gleichzeitig bei immer niedrigeren  $T'$ –Werten beginnt. Dasselbe Verhalten erkennt man im oberen rechten Teil von Abb. 5.3.

Es wurden mehrere verschiedene Implementierungen der BHMC–Methode versucht (Creutz, HOW, RW), die bei niedrigen Temperaturen jedoch alle vergleichbar schlechte Ergebnisse liefern. Auch bei sehr kleinen Systemen, die den beschriebenen Energiesprung nicht aufweisen (vgl.  $N = 16$  in Abb. 5.3 u. r.), weichen die BHMC–Kurven von den AS–Werten ab. Im folgenden wird diskutiert, wie sich diese Schwierigkeiten auf die  $T$ – $T'$ –Transformation auswirken.

Der linke Teil von Abbildung 5.4 zeigt noch einmal den entsprechenden Bereich der  $U_q(T')$ –Kurve für  $N = 10 \times 10$ ,  $\Delta E = 0.05$  und  $q = 0.99$ . Die Kurven stellen die BHMC–Ergebnisse (mit der Energiestufe) und die AS–Werte samt der daraus gewonnenen Histogramm–Kurve dar. Man erkennt, daß ab einem gewissen  $T'$  die Ergebnisse gut übereinstimmen. Die rechte Seite zeigt die  $T$ – $T'$ –Beziehungen des Systems für die drei  $q$ –Werte  $q = \{1.01, 1.0, 0.99\}$  und jeweils drei verschiedene Diskretisierungen  $\Delta E$ . Von außen nach innen sind dies  $\Delta E = \{0.05, 0.1, 0.2\}$ . Für  $q = 0.99$  sind im unteren Bildteil auch zwei Salazar–transformierte Histogramm–Kurven mit unterschiedlichem  $S_q(T'_0)$  eingezeichnet.

Man erkennt durch Vergleich mit Abbildung 5.3, daß die Energiestufen (wie nach Gleichung (3.2) zu erwarten) Stufen in der  $T(T')$ –Beziehung verursachen, die in den Histogramm–Kurven nicht auftreten. Oberhalb der  $T'$ –Werte dieser Stufen zeigen die zum gleichen  $q$  gehörenden BHMC–Kurven (und auch die Histogramm–Kurven) das gleiche Verhalten, unterscheiden sich jedoch um einen Skalierungsfaktor.

Für  $q > 1$  weisen die Kurven wieder einen Bereich auf, in dem sich die Temperatur  $T$  in Abhängigkeit von  $T'$  sehr stark ändert, der in einen Bereich schwachen Anstiegs übergeht. Daher sind wieder „Knicke“ in der  $U_q(T)$ –Kurve zu erwarten. Im Fall  $q < 1$  gibt es wegen der Energiestufen nun zwei Bereiche, in denen Mehrdeutigkeiten in der  $U_q$ – $T$ –Beziehung auftauchen, wovon nur der bei höheren  $T$  ge-

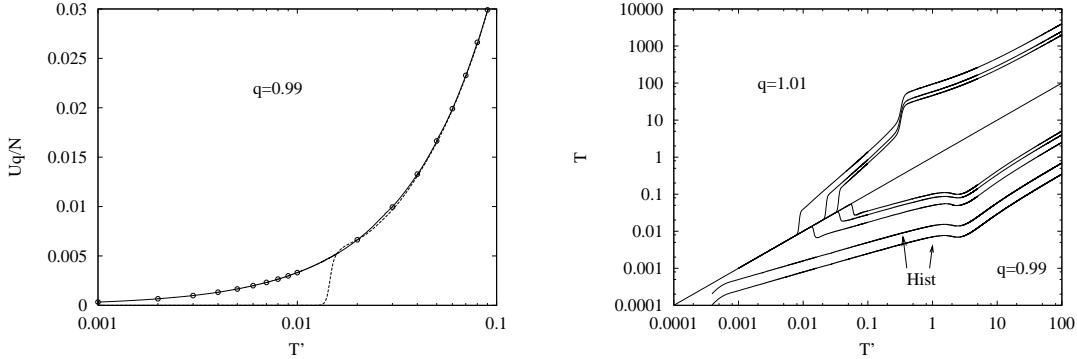


Abb. 5.4:  $U_q(T')/N$  für  $N = 100$ ,  $q = 0.99$ ,  $\Delta E = 0.05$ : BHMC- und Histogramm-Kurven, AS-Punkte (links);  $T(T')$  für  $q = \{1.01, 1.0, 0.99\}$ ,  $\Delta E = \{0.05, 0.1, 0.2\}$ : BHMC- und Histogramm-Kurven

legene aus einer Eigenschaft der Tsallis–Statistik bzw. der  $T$ – $T'$ –Transformation resultiert.

## 5.2 Eigenschaften des Systems

Die linke Seite der folgenden Abbildung zeigt die  $T$ – $T'$ –Beziehung für  $q = 0.985$ . Das mit (1) bezeichnete Kurvenstück ist das Resultat eines Eingriffs, der den Zweck erfüllt, das durch die im vorigen Abschnitt erwähnten Energiestufen eingeführte mehrdeutige Verhalten der  $U_q(T)$ – und  $F_q(T)$ –Kurven zu eliminieren. Das Kurvenstück (2) ist das Ergebnis der Entfernung der im rechten Bildteil gezeichneten geschlossenen Schleife in der freien Energie.

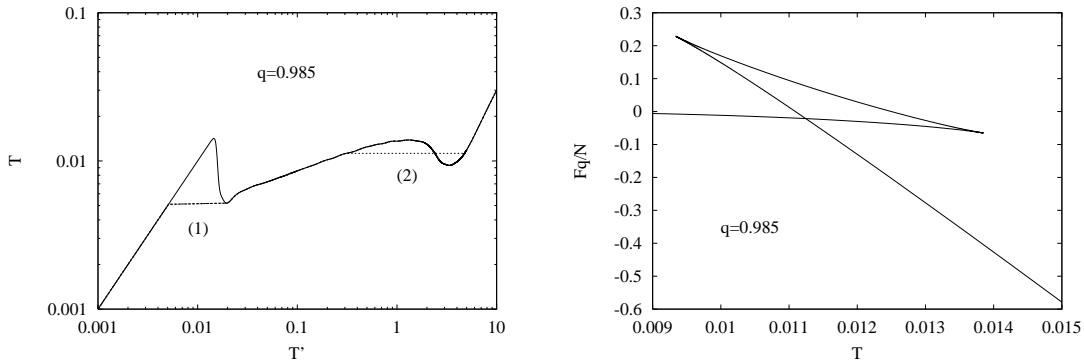


Abb. 5.5:  $T(T')$  für  $q = 0.985$ ,  $N = 100$  und  $\Delta E = 0.05$  (links);  $F_q(T)/N$  für dasselbe System (rechts)

Durch den Eingriff entstehen wieder Diskontinuitäten der inneren Energie und der Entropie für  $q < 1$ . Man erhält also wie auch bei den bisher betrachteten Systemen einen „Phasenübergang“ durch die  $T$ – $T'$ –Transformation. Abb. 5.6 zeigt für

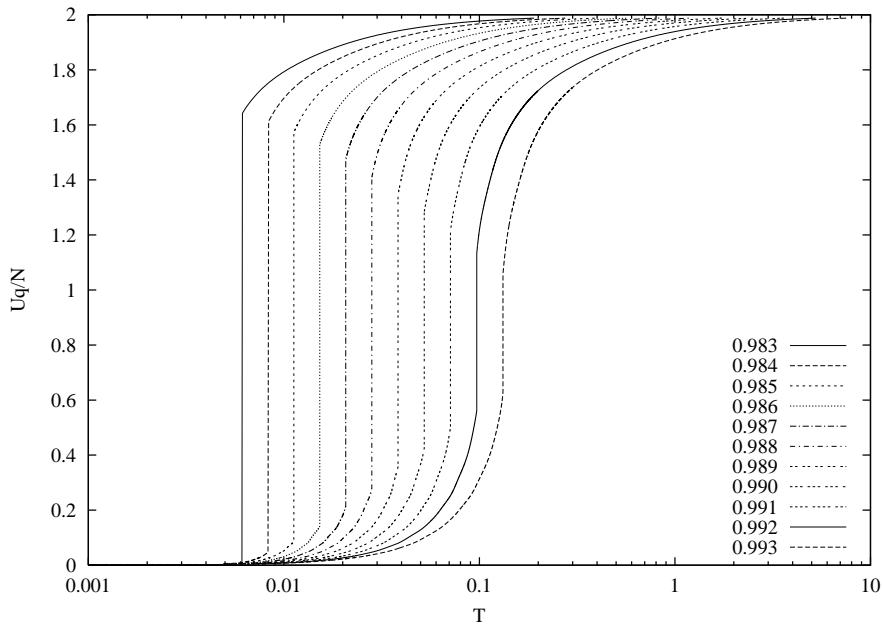


Abb. 5.6: Innere Energie  $U_q(T)/N$  nach Wiederherstellung der thermodynamischen Stabilität durch Entfernung der geschlossenen Schleife in der Kurve der freien Energie

einige  $q$ -Werte die resultierenden Kurven der inneren Energie. Sie zeigen das bereits von den beiden zuvor betrachteten Systemen bekannte Verhalten: Nach der Wiederherstellung der thermodynamischen Stabilität macht die innere Energie bei einer Temperatur  $T_t$  einen Sprung, dessen Größe mit fallendem  $q$  wächst. Eine Untersuchung des Verhaltens im thermodynamischen Limes wie in den vorigen beiden Kapiteln ist jedoch mit der BHMC-Methode nicht möglich, da (wie in Abschnitt 5.1.2 gesehen) Lage und Höhe der Energiestufen in der  $U_q$ - $T'$ -Beziehung auch von der Systemgröße abhängen und somit zu einer unterschiedlichen Skalierung der Kurven bezüglich  $T$  führen. Auch mit der Salazar-Methode ist es nicht möglich, Aussagen über die absolute Lage der Übergangstemperaturen zu treffen, und insbesondere kann die Abhängigkeit der Übergangstemperaturen von der Systemgröße nicht angegeben werden, da die Entropie des Systems im Grundzustand nicht nur unbekannt, sondern auch  $N$ -abhängig ist.

Daher werden zunächst die Eigenschaften des Systems in Abhängigkeit von  $T'$  untersucht. Abbildung 5.7 zeigt für verschiedene  $q$  die Größe  $\langle |\vec{m}| \rangle = N^{-1} \langle |\sum_i \vec{s}_i| \rangle$ , die Stärke der mittleren Magnetisierung pro Spin, in Abhängigkeit vom Parameter  $T'$ . Man erkennt deutlich einen Übergang von einem Zustand hoher Magnetisierungsstärke bei tiefen Temperaturen zu einem Zustand geringerer Magnetisierungsstärke für hohe  $T'$ . Die gezeigten Daten sind mit der Histogramm-Methode aus AS-Rechnungen gewonnen worden. Man sieht, daß die Magnetisierungskurven umso steiler werden und umso weiter zu niedrigen  $T'$  wandern, je größer der  $q$ -Faktor wird.

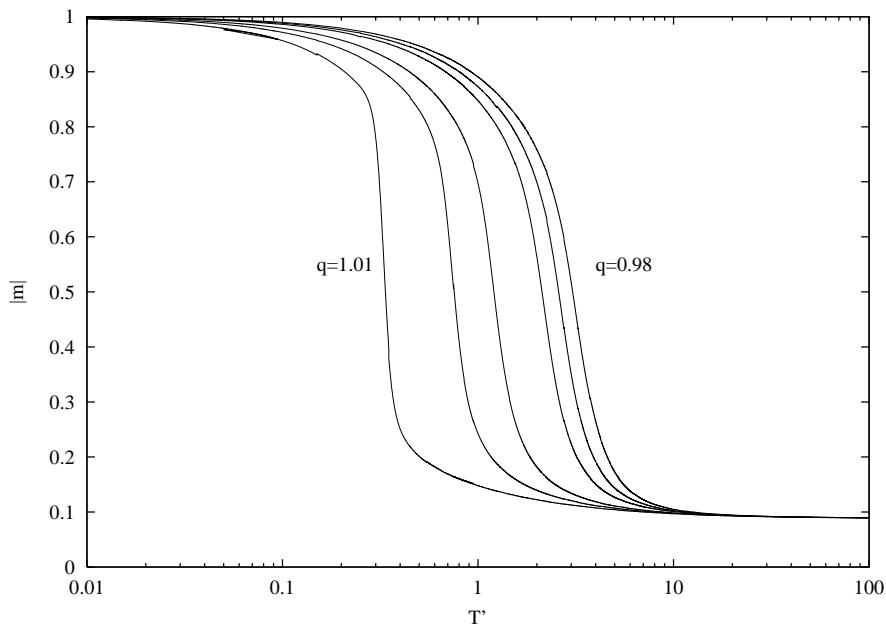


Abb. 5.7: Mittlere Stärke der Magnetisierung  $m(T')$  für  $N = 10 \times 10$  und verschiedene  $q$

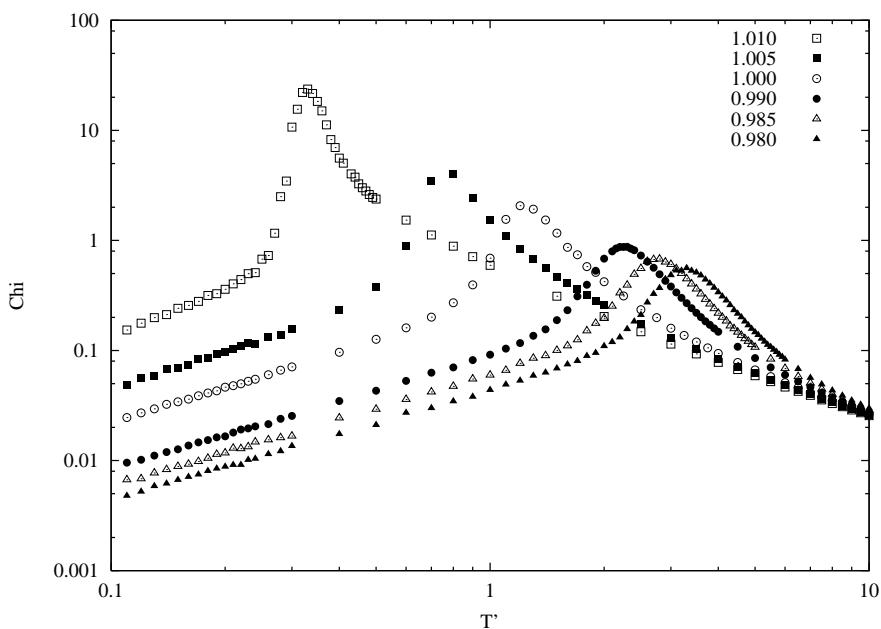


Abb. 5.8: Magnetische Suszeptibilität  $\chi(T')$  für  $N = 10 \times 10$  und verschiedene  $q$

Mermin und Wagner [48] haben gezeigt, daß es bei rotationsinvarianten zweidimensionalen Systemen keine spontane Magnetisierung geben kann. Wegen der Wechselwirkung der Spins und der Translationsinvarianz des Gitters ist der Grundzustand (besser: das Kontinuum der Grundzustände) des XY-Modells anfällig gegen Spinwellen. Das heißt, daß sich kleine Störungen des Grundzustandes wellenartig über das gesamte Gitter ausbreiten können. Daher kann es keinen über große Bereiche geordneten Zustand bei endlichen Temperaturen geben. Der Erwartungswert der Magnetisierung  $\langle \vec{m} \rangle = N^{-1} \langle \sum_i \vec{s}_i \rangle$  verschwindet für alle  $T' > 0$ . Es ist damit klar, daß es keinen Phasenübergang von einem Zustand verschwindender zu einem Zustand endlicher Magnetisierung wie beim Ising-Modell gibt. In Abbildung 5.8 ist für dieselben Systeme die magnetische Suszeptibilität  $\langle \chi \rangle$  gegen die Größe  $T'$  aufgetragen, wobei  $\chi$  aus den Fluktuationen der Magnetisierung berechnet worden ist. Die Maxima der Suszeptibilität, die bei im folgenden mit  $T'_c$  bezeichneten Temperaturen liegen, werden mit steigendem  $q$  höher und schmäler und wandern zu niedrigeren  $T'$ . Es ist interessant zu untersuchen, wie sich die Systeme in der Nähe dieser Temperatur verhalten.

Dazu wurde die magnetische Suszeptibilität  $\chi$  für dieselben  $q$ , aber größere Systeme berechnet. Abbildung 5.9 zeigt  $\chi(T')$  für  $N = 30 \times 30$ . Zunächst einmal erkennt man, daß die Kurven mit wachsender Systemgröße höher und breiter werden, und daß die Maxima für  $q < 1$  zu höheren und für  $q > 1$  zu niedrigeren  $T'$  wandern.

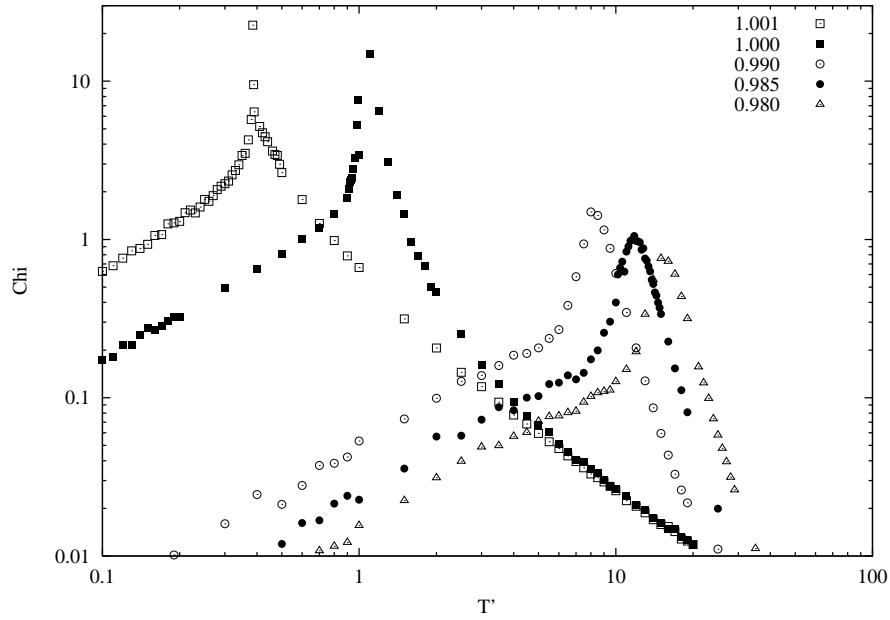


Abb. 5.9: Magnetische Suszeptibilität  $\chi(T')$  für  $N = 30 \times 30$  und verschiedene  $q$

Für diese Systemgröße und  $q = 0.985$  wurde bei verschiedenen  $T'$  die Zweipunkt-Korrelationsfunktion  $\Gamma(x)$  berechnet;  $x$  bezeichnet dabei den Abstand zweier

Spins auf dem Gitter. Es ist klar, daß  $\Gamma(0) = 1$  ist. Wegen der periodischen Randbedingungen fällt  $\Gamma(x)$  für  $x \leq L/2$  und steigt dann wieder an;  $\Gamma(x)$  ist periodisch mit Periode  $L$ . Daher ist in den nachfolgenden Abbildungen nur die Hälfte der ersten Periode, also der Bereich  $x \in [0, L/2]$  dargestellt. Abbildung 5.10 zeigt die Korrelationsfunktionen für verschiedene  $T < T_c$ , Abbildung 5.11 für  $T > T_c$ . Die beiden Fälle zeigen deutlich unterschiedliches Verhalten. Während im Bereich  $T < T_c$  die Korrelationen potenzartig abfallen, folgt  $\Gamma(x)$  für  $T > T_c$  einem exponentiellen Gesetz.

Dieses Verhalten ist bekannt im Zusammenhang mit dem Kosterlitz–Thouless–(KT)–Übergang, den das XY–Modell im extensiven Grenzfall zeigt [49, 50]. Die Thermodynamik des XY–Modells wird von zwei Beiträgen bestimmt: niederenergetische Anregungen (Spinwellen) und metastabile, langsam variierende Konfigurationen (Vortices). Die Spinwellen sind—wie bereits erwähnt—for die Nicht–Existenz von über größere Bereiche geordneten Zuständen verantwortlich, die Vortices verursachen den KT–Phasenübergang. Unterhalb der kritischen Temperatur  $T'_c$  treten Vortices nicht isoliert, sondern in Vortex–Antivortex–Paaren auf, die wegen der Analogie zum zweidimensionalen Coulomb–Gas auch als Dipole bezeichnet werden. Die Phase für  $T < T_c$  heißt daher auch Dipolphase. Mit steigender Temperatur bilden sich immer mehr Dipole, so daß man es schließlich bei  $T > T_c$  mit einem „Plasma“ gleich vieler (abgeschirmter) entgegengesetzter „Ladungen“ (Vorzeichen) zu tun hat.

Die bisher erhaltenen Ergebnisse schließen die Möglichkeit nicht aus, daß das zweidimensionale XY–Modell für  $q \neq 1$ —betrachtet in Abhängigkeit von  $T'$  und für eine endliche Systemgröße—einen KT–Übergang aufweist. Die Existenz des Übergangs für  $q = 1$  ist bekannt.

Durch Vergleich des Verhaltens der Korrelationsfunktion  $\Gamma(x)$  im Bereich der möglichen Übergangstemperatur  $T_c$  für verschiedene  $q$  erkennt man, daß der Übergang von potenzartigem zu exponentiellem Verhalten für  $q \geq 1$  sehr scharf ist, mit fallendem  $q < 1$  jedoch immer weniger deutlich ausgeprägt wird. Für  $q < 1$  tritt in einem Temperaturintervall um  $T_c$  herum ein Verhalten auf, das weder rein potenzartig, noch rein exponentiell ist. Es scheint also für diese  $q$  keinen scharfen Übergang, sondern ein Crossover–Verhalten zu geben.

Den Einfluß der Systemgröße für  $q < 1$  zeigt die Abbildung 5.12 für den Fall  $q = 0.985$  anhand der Kurven der Magnetisierung und der inneren Energie für  $N = \{10 \times 10, 30 \times 30, 50 \times 50\}$ . Man erkennt, daß die Kurven mit wachsender Systemgröße immer langsamer ansteigen. Damit werden auch die Kurven der Suszeptibilität immer breiter und flacher und der Crossover–Bereich wird größer. Im thermodynamischen Limes kann man daher im Fall  $q < 1$  nicht von einem Phasenübergang sprechen.

Für  $q > 1$  werden die  $U_q$ – und  $M_q$ –Kurven mit steigender Systemgröße immer steiler und die Übergangstemperaturen gehen gegen Null. Dies tun sie umso schneller, je größer  $q$  wird. Bereits bei der Systemgröße  $N = 30 \times 30$  kann für  $q = 1.005$  mit den benutzten Monte–Carlo–Methoden kein von Null verschiedener Wert für

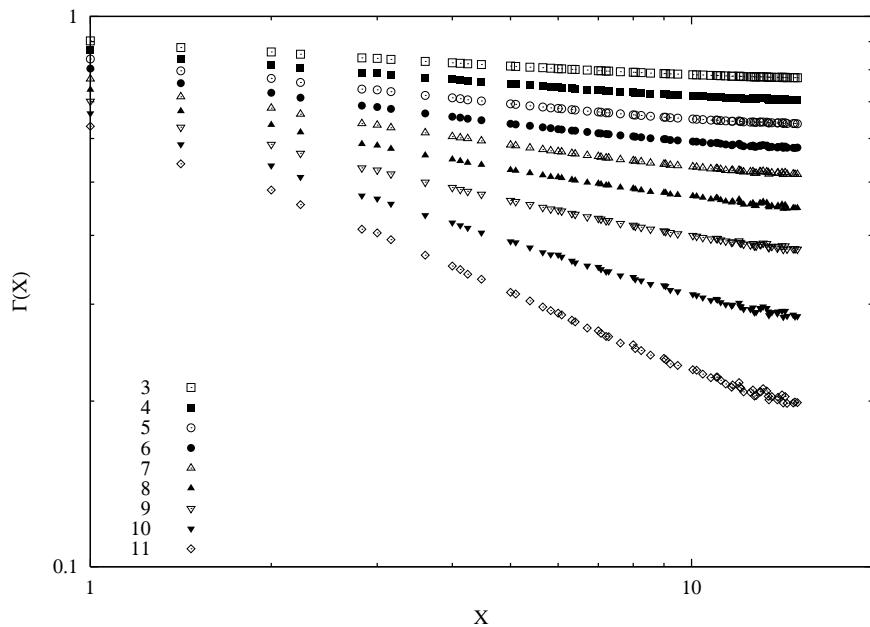


Abb. 5.10: Korrelationsfunktion  $\Gamma(x)$  für  $N = 30 \times 30$ ,  $q = 0.985$  und verschiedene  $T < T_c$ . Man erkennt potenzartigen Abfall von  $\Gamma$ .

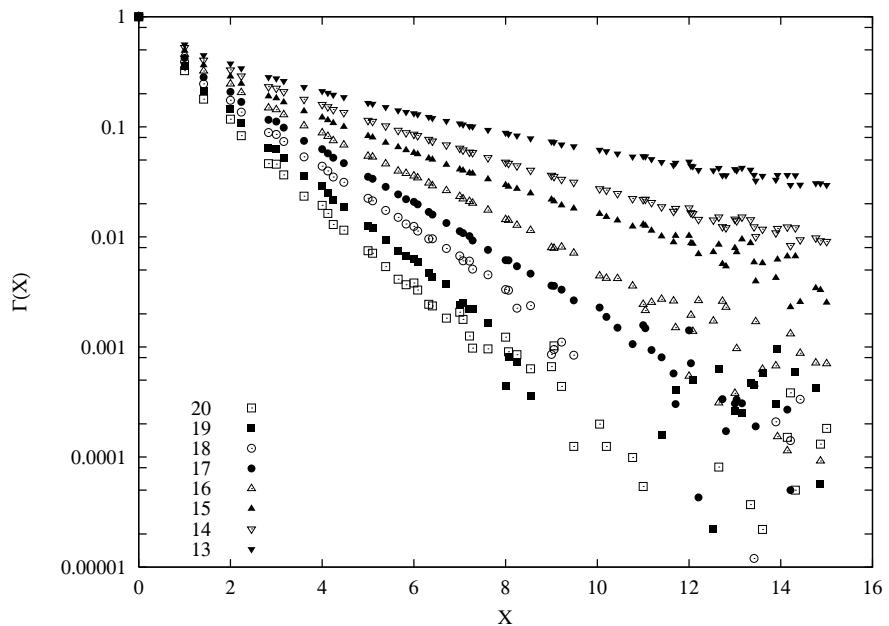


Abb. 5.11: Korrelationsfunktion  $\Gamma(x)$  für  $N = 30 \times 30$ ,  $q = 0.985$  und verschiedene  $T > T_c$ . Man erkennt ein annähernd exponentielles Verhalten.

die Übergangstemperatur mehr bestimmt werden. Im thermodynamischen Limes gibt es daher für  $q > 1$  keinen Phasenübergang bei einer endlichen Temperatur.

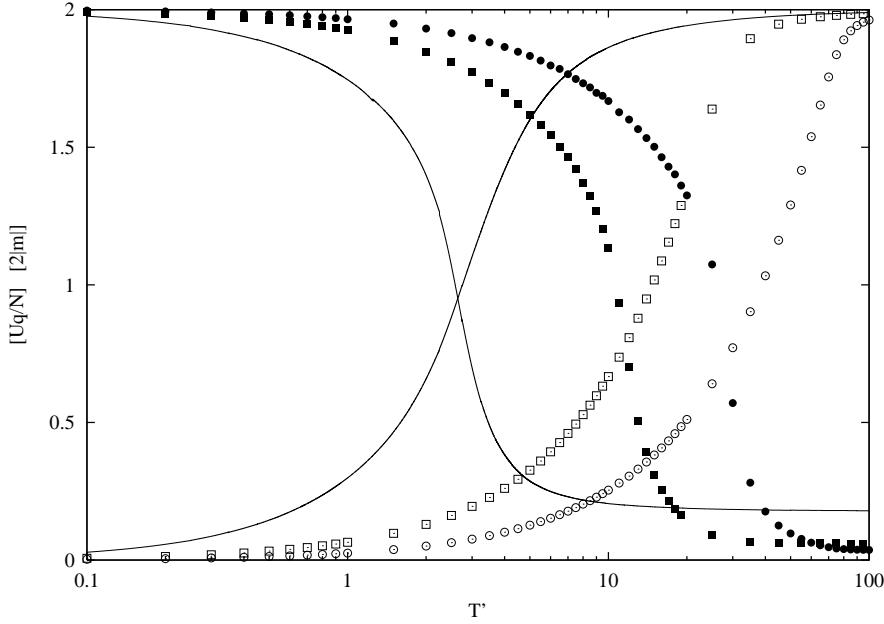


Abb. 5.12: Innere Energie  $U_q/N$  und Magnetisierung  $|\vec{M}|/N$  in Abhängigkeit von  $T'$  für  $N = \{10 \times 10, 30 \times 30, 50 \times 50\}$  (jeweils v. l. n. r.)

Es wurde bereits zu Beginn dieses Abschnitts erkannt (und in Abbildung 5.6 gesehen), daß die  $T-T'$ -Transformation für  $q < 1$  ein instabiles Verhalten des Systems bewirkt, das durch einen Eingriff in die Kurve der freien Energie beobauen werden muß. Obwohl die genauen Werte der Temperaturen  $T_t$ , an denen die Kurven der hier betrachteten thermodynamischen Größen  $U_q$  und  $|\vec{M}|$  durch diesen Eingriff abgeschnitten werden, nicht angegeben werden können, ist nach den Erkenntnissen, die bis zu diesem Zeitpunkt über die  $T-T'$ -Transformation gewonnen wurden, klar, daß diese Temperaturen mit den  $T'$ -Werten korrespondieren, bei denen die  $U_q(T')$ -Kurven den stärksten Anstieg aufweisen. Dies sind aber auch gerade die Bereiche, in denen die Maxima der Suszeptibilität und die möglichen KT-Übergänge liegen. Abbildung 5.13 zeigt die Ergebnisse von Salazar-Transformationen der Suszeptibilitätswerte mit drei verschiedenen  $S_q(0)$  für  $N = 10 \times 10$  und  $q = 0.99$ . Man erkennt bei der linken und der mittleren Kurve eine geschlossene Schleife in der Suszeptibilität. Nach der Wiederherstellung der thermodynamischen Stabilität erhält man eine unstetige Kurve wie sie ganz rechts gezeigt ist. Durch die  $T-T'$ -Transformation führt also gerade der Übergangsbereich zu einem instabilen, unphysikalischen Verhalten des Systems.

Wenn es hier auch aus den genannten Gründen nicht bewiesen werden kann, legt die Ähnlichkeit des Verhaltens des XY-Modells mit den zuvor untersuchten

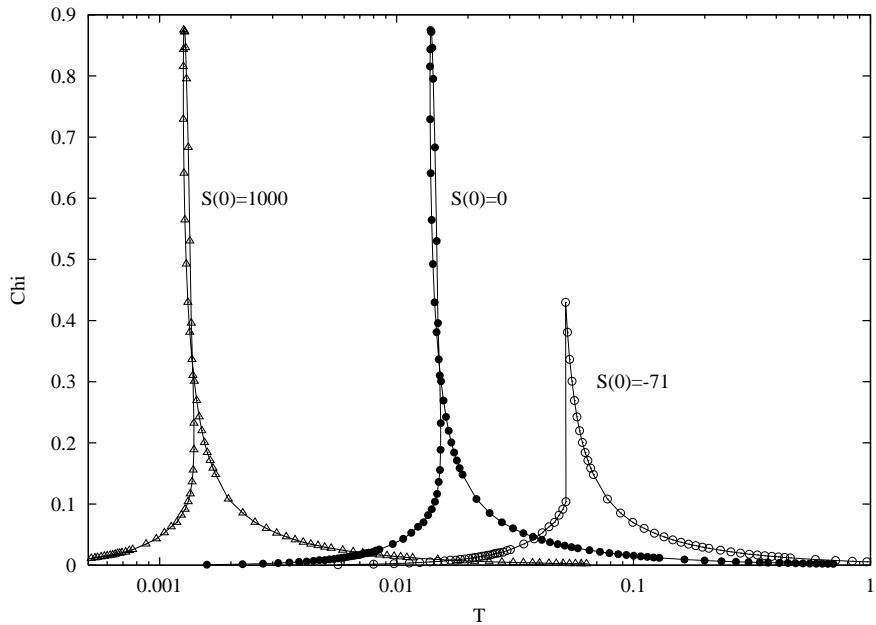


Abb. 5.13: Magnetische Suszeptibilität  $\chi$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  für  $N = 10 \times 10$  und  $q = 0.99$ . Die Kurven wurden durch Salazar–Transformation mit drei verschiedenen  $S_q(T'_0 = 0)$  berechnet. Die linken beiden Kurven zeigen das Verhalten vor dem Eingriff in die Kurve der freien Energie, die rechte Kurve zeigt das Ergebnis. Die Linien dienen zur Leitung des Blickes, sie stellen keine Interpolation zwischen den Datenpunkten dar.

Ising–Systemen (betrachtet in Abhängigkeit von  $T$ ) die Vermutung nahe, daß die im Fall  $q < 1$  durch die Eingriffe in die freie Energie entstandenen Unstetigkeiten in den thermodynamischen Zustandsgrößen auch in diesem Fall im thermodynamischen Limes verschwinden.

Anhand von Abbildung 5.4 sieht man, daß die  $T$ – $T'$ –Beziehung im Fall  $q > 1$  dort, wo die  $U_q(T')$ –Kurve steil ansteigt, auf einem kleinen  $T'$ –Intervall einen weiten  $T$ –Bereich überspannt. Der  $T$ –Bereich wird dabei umso größer und das  $T'$ –Intervall wird umso kleiner, je steiler die innere Energie ansteigt. Es ist aber gerade dieses  $T'$ –Intervall, in dem die KT–Übergangstemperaturen liegen. Durch die Transformation von  $T'$  auf  $T$  wird dabei also der schmale Übergangsbereich auf ein Intervall gestreckt, das umso breiter wird, je schärfer der Übergang auf der  $T'$ –Skala ist. Dies spricht dafür, daß der KT–Übergang bei  $q > 1$  nach  $T$ – $T'$ –Transformation im thermodynamischen Limes nicht erhalten bleibt.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

### 6.1 Ergänzung

In der unmittelbaren Vergangenheit haben S. Abe et al. [55] gezeigt, daß die physikalische Temperatur bei Verwendung der dritten Formulierung der kanonischen Gleichgewichtsgesamtheit nicht—wie in dieser Arbeit angenommen—das Inverse des Lagrange-Parameters  $\beta$  ist, sondern eine leicht modifizierte Größe. Das sieht man wie folgt:

In einem System, das aus zwei unabhängigen Subsystemen  $A$  und  $B$  in thermischem Kontakt aufgebaut ist, gilt für die Entropie nach (1.11)

$$S_q^{A \cup B} = S_q^A + S_q^B + \frac{1-q}{k} S_q^A S_q^B .$$

Thermisches Gleichgewicht ist dadurch ausgezeichnet, daß die Entropie bei fester Gesamtenergie  $U_q^{A \cup B} = U_q^A + U_q^B$  maximal ist. Nach der vorigen Gleichung heißt das

$$0 = \delta S_q^{A \cup B} = \left(1 + \frac{1-q}{k} S_q^B\right) \frac{\partial S_q^A}{\partial U_q^A} \delta U_q^A + \left(1 + \frac{1-q}{k} S_q^A\right) \frac{\partial S_q^B}{\partial U_q^B} \delta U_q^B .$$

Da die Gesamtenergie konstant ist, gilt  $\delta U_q^A = -\delta U_q^B$  und damit

$$\frac{k\beta^A}{1 + \frac{1-q}{k} S_q^A} = \frac{k\beta^B}{1 + \frac{1-q}{k} S_q^B} \equiv k\beta^\dagger , \quad (6.1)$$

wobei nach Gleichung (1.25)  $k\beta = \partial S_q / \partial U_q$  ersetzt wurde. Gleichung (6.1) ist die thermische Gleichgewichtsbedingung, und die physikalische Temperatur ist damit

$$T_{\text{phys}} = \frac{1}{k\beta^\dagger} = \frac{k\beta}{\sum_i p_i^q} = k\beta Z_q^{q-1} .$$

Aus der Legendre–Struktur der verallgemeinerten statistischen Mechanik erhält man für die freie Energie dann den Ausdruck

$$F_q = U_q - TS_q = U_q - T \ln_q Z_q ,$$

wobei zu beachten ist, daß es sich bei der Größe  $T$  um das Inverse des Lagrange–Parameters  $\beta$  und nicht um die physikalische Temperatur handelt. Für ein eindimensionales Ising–System ist eine exemplarische  $F_q(T_{\text{phys}})$ –Kurve auf der linken Seite der folgenden Abbildung dargestellt. Man erkennt deutlich den Unterschied zu den in den vergangenen Kapiteln betrachteten Kurven: Es tauchen keine geschlossenen Schleifen mehr auf. Trotzdem gibt es weiterhin Mehrdeutigkeiten in der  $F_q$ – $T_{\text{phys}}$ –Beziehung, die dadurch beseitigt werden, daß immer der Zustand mit der niedrigsten freien Energie gewählt wird [60].

Die rechte Seite der Abbildung zeigt die zugehörige Kurve der inneren Energie  $U_q(T_{\text{phys}})$  vor und nach dem beschriebenen Eingriff (rechts) und zum Vergleich die Kurve  $U_q(T)/N$  (links).

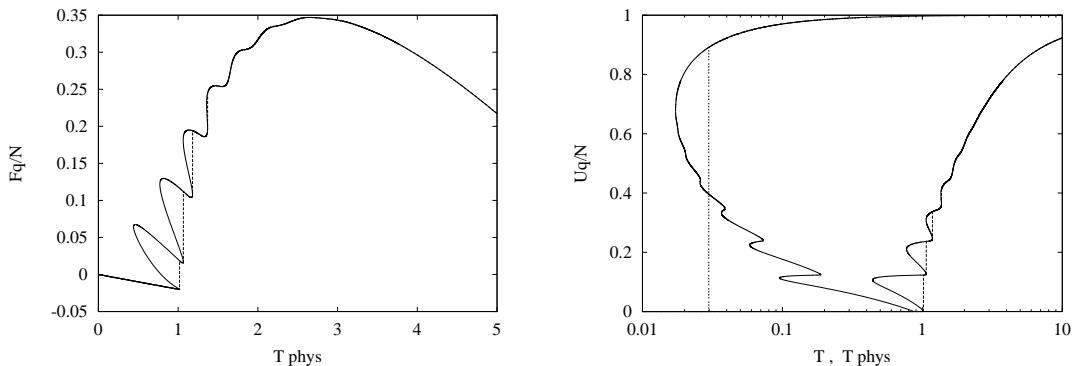


Abb. 6.1: Freie Energie  $F_q(T_{\text{phys}})/N$  (linke Abbildung) und innere Energie  $U_q(T_{\text{phys}})/N$  bzw.  $U_q(T)/N$  für eine Kette von  $N = 32$  Ising–Spins und  $q = 0.75$ : instabile Zustände (durchgezogene Linien) und Ergebnisse der Korrektur (gestrichelt)

Man erkennt, daß die thermodynamischen Größen  $F_q$  und  $U_q$  in Abhängigkeit von den beiden verschiedenen Temperaturen  $T$  und  $T_{\text{phys}}$  sehr unterschiedliches Verhalten zeigen. Insbesondere besitzt die freie Energie  $F_q(T_{\text{phys}})$  nun nach dem beschriebenen Eingriff nicht nur eine diskontinuierliche Ableitung, sondern ist auch selbst diskontinuierlich. Dies ist jedoch kein physikalisch sinnvolles Verhalten, und es stellt sich die Frage, ob die oben gegebene Definition der freien Energie eine günstige ist.

Martinez et al. [57] haben einen alternativen Ansatz gewählt. Zunächst haben sie festgestellt, daß bei Optimierung der Tsallis–Entropie (1.1) unter der dritten Nebenbedingung für die innere Energie,

$$U_q = \langle\langle E \rangle\rangle_q = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^W p_j^q} ,$$

ein Maximum von  $S_q$  für die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.22),

$$p_i = \frac{[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q)/\sum_i p_i^q]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta(\varepsilon_j - U_q)/\sum_j p_j^q]^{\frac{1}{1-q}}},$$

nicht garantiert werden kann. Tatsächlich ist die zugehörige Hesse-Matrix nicht-diagonal. Die Idee besteht nun darin, die  $U_q$ -Nebenbedingung zwar beizubehalten, aber etwas umzuformulieren. Unter Ausnutzung der Beziehung

$$\sum_{i=1}^W p_i^q (\varepsilon_i - \langle\langle E \rangle\rangle_q) = 0$$

optimieren sie an Stelle von (1.24) den Ausdruck

$$\phi_q = \frac{S_q}{k} - \alpha \left( \sum_{i=1}^W p_i - 1 \right) - \beta^\dagger \sum_{i=1}^W p_i^q (\varepsilon_i - \langle\langle E \rangle\rangle_q)$$

und erhalten die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p_i^\dagger = \frac{[1 - (1-q)\beta^\dagger(\varepsilon_i - U_q)]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta^\dagger(\varepsilon_j - U_q)]^{\frac{1}{1-q}}}.$$

Durch Vergleich mit dem Ausdruck für die  $p_i$  erkennt man den Zusammenhang zwischen den Lagrange-Parametern  $\beta$  und  $\beta^\dagger$ :

$$\beta^\dagger = \frac{\beta}{\sum_i p_i^q}.$$

Bei diesem Vorgehen erhält man also die die von Abe eingeführte physikalische Temperatur als Inverses des Lagrangeschen Multiplikators  $\beta^\dagger$ . Darüber hinaus gilt  $p_i = p_i^\dagger$ , und die Hesse-Matrix ist nun diagonal. Martinez et al. haben gefunden, daß mit den gegebenen  $p_i^\dagger$  die Entropie  $S_q$  maximal ist für alle  $q > 0$ .

Behält man auch hier die Legendre-Struktur der verallgemeinerten Thermodynamik bei, ergibt sich nun für die freie Energie der Ausdruck

$$F_q = U_q - \frac{1}{\beta^\dagger} S_q = U_q - T_{\text{phys}} S_q.$$

Man erkennt schon an diesem Beispiel, daß die Frage, wie man in einer verallgemeinerten statistischen Mechanik die aus dem Boltzmann-Gibbs-Grenzfall bekannten thermodynamischen Größen definiert, keineswegs trivial ist. Die Lösung dieses Problems sprengt jedoch den Rahmen dieser Arbeit und wird deshalb an anderer Stelle versucht.

## 6.2 Zusammenfassung

Durch Einführung einer nichtextensiven Entropie  $S_q$ , deren reeller Parameter  $q$  den Grad der Nichtextensivität bestimmt, wurde die Boltzmann–Gibbs–Statistik erweitert und eine verallgemeinerte Thermostatistik konstruiert. Mittels verschiedener Definitionen des Erwartungswertes der inneren Energie wurden (durch das übliche Verfahren der Entropiemaximierung mit entsprechenden Nebenbedingungen) drei verschiedene Formen der kanonischen Gleichgewichtsverteilung erhalten. Während die ersten beiden Versionen explizite Gleichungen für die Wahrscheinlichkeiten liefern, erhält man im dritten Fall—von dem man heute aufgrund der Abwesenheit der in den anderen Fällen auftretenden Schwierigkeiten meint, daß er die angemessenste Beschreibung der statistischen Systeme liefert—implizite Gleichungen für die  $p_i$ . Zur Lösung dieser Gleichungen wurden zwei Verfahren vorgeschlagen: eine iterative Lösung ausgehend vom BG–Fall und die Einführung einer Hilfsgröße  $\beta'$ .

In Abhängigkeit von dieser Größe sind die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  explizit berechenbar und mit denen der zweiten Version der kanonischen Gleichgewichtsverteilung identisch. Um die zur dritten Verteilung gehörige inverse Temperatur  $\beta$  zu bestimmen, bedient man sich der  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation. Die Untersuchung der Eigenschaften dieser Transformation war ein zentrales Thema dieser Arbeit.

Als Modellsysteme für die Untersuchung nicht nur dieser Transformation im speziellen, sondern auch des Verhaltens bekannter Systeme in der Tsallis–Statistik im allgemeinen, wurden das Ising–Modell in einer und in zwei Dimensionen sowie das zweidimensionale XY–Modell gewählt. Da für die Ising–Systeme exakte Gleichungen für die Zustandsdichte  $g(E)$  existieren, konnten für diese die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  in Abhängigkeit von  $\beta$  und  $\beta'$  exakt berechnet werden.

Es wurden einige Monte–Carlo–Methoden vorgestellt, die eine Untersuchung auch des XY–Modells im Rahmen der verallgemeinerten Statistik gestatten sollten. Die Zuverlässigkeit dieser Methoden wurde am Beispiel des eindimensionalen Ising–Modells durch Vergleich mit exakten Werten gezeigt.

Ebenfalls an diesem Modell wurde demonstriert, daß durch die  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation sowie durch die iterative Berechnung der  $p_i(\beta)$  für  $q < 1$  unphysikalische und metastabile Zustände entstehen, die sich insbesondere durch Mehrdeutigkeiten in der freien Energie äußern. Nach deren Entfernung wies das System die Eigenschaften eines Phasenübergangs erster Ordnung auf. Es wurde gezeigt, daß die Übergangstemperaturen für alle  $q < 1$  im thermodynamischen Limes gegen Null gehen.

Weiterhin wurde gezeigt, daß die dritte  $p$ –Verteilung im Gegensatz zu den ersten beiden invariant unter Translation des Energiespektrums des betrachteten Systems ist. Es wurde der Zusammenhang zwischen der ersten und der dritten  $p$ –Verteilung hergestellt und eine Transformation zwischen den jeweiligen Temperaturen angegeben. Dabei wurde die Fehlerhaftigkeit einer früheren Herleitung nachgewiesen. Mit dieser und der bereits bekannten  $\beta$ – $\beta'$ –Transformation

konnte gezeigt werden, daß das qualitativ sehr unterschiedliche Verhalten bei unterschiedlicher Wahl des Energienullpunktes, das Andrade am eindimensionalen Ising–Modell beobachtet hatte, bei der dritten Formulierung der kanonischen Gleichgewichtsgesamtheit nicht auftritt.

Beim Ising–Modell in zwei Dimensionen traten für  $q < 1$  dieselben Instabilitäten auf, die bereits in einer Dimension beobachtet worden waren. Als Ursache stellte sich auch in diesem Fall die  $\beta-\beta'$ –Transformation heraus, und nach Wiederherstellung der thermodynamischen Stabilität zeigte das System wiederum das Verhalten eines Phasenübergangs. Es wurde gezeigt, daß die Übergangstemperatur im thermodynamischen Limes für  $q < 1$  schnell gegen Null ging, für  $q \neq 1$  also kein Phasenübergang des zweidimensionalen Ising–Modells existiert. Anhand der Ergebnisse von da Silva et al, die gezeigt hatten, daß es bei Benutzung der zweiten Form der  $p$ –Verteilung für alle  $q$  einen Phasenübergang bei einer Temperatur gibt, die von der Wahl des Energieursprungs abhängt, wurde gezeigt, daß dieser Übergang nach Transformation auf die dritte Version des kanonischen Ensembles nur noch für  $q = 1$  zu beobachten ist.

Als Beispiel eines Systems, das im Rahmen der Tsallis–Statistik noch nicht untersucht worden war, wurde das  $XY$ –Modell in zwei Dimensionen betrachtet. Für  $q = 1$  wurde zunächst durch Vergleich mit Literaturwerten sichergestellt, daß die Monte–Carlo–Methode, die in Ermangelung einer exakten Lösung als Referenz dienen mußte, zufriedenstellende Ergebnisse lieferte. Durch Vergleich der Ergebnisse der Broad–Histogram–Methode mit den Werten der Referenzmethode wurde gezeigt, daß die Übereinstimmung für mittlere und hohe Temperaturen gut war, für tiefe  $T$  jedoch erhebliche Abweichungen auftraten, die von der Implementierung der Methode herrührten. Insbesondere wurde eine Abhängigkeit des Fehlers von der notwendigen Diskretisierung des Energiespektrums und von der Systemgröße festgestellt. Die Abweichungen wirkten sich auf die  $T-T'$ –Transformation in der Weise aus, daß Daten, die aus Simulationen mit unterschiedlicher Diskretisierung stammten, auf der  $T$ –Achse um einen Skalierungsfaktor voneinander abwichen. Dies machte es von vornherein unmöglich, die Abhängigkeit der Lage etwaiger Phasenübergänge von der Systemgröße zu untersuchen. Die alternative Methode—die numerische  $T-T'$ –Transformation nach Salazar—konnte aufgrund der Unkenntnis der Entropie des  $XY$ –Modells im Grundzustand zur Lösung dieses Problems nicht beitragen.

Bei einer festen Systemgröße und fester Diskretisierung wurde für  $q < 1$  dasselbe Verhalten gefunden, das auch bereits bei den zuvor betrachteten Systemen aufgetreten war: Durch die Transformation entstanden Mehrdeutigkeiten in den thermodynamischen Zustandsgrößen, die zur Wiederherstellung der Stabilität des Systems eliminiert werden mußten. Als Folge der Eingriffe trat wiederum ein Verhalten wie bei einem Phasenübergang erster Ordnung auf.

Durch Betrachtung der magnetischen Suszeptibilitäten und der Zweipunkt–Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von der Hilfsgröße  $T'$  wurde für alle  $q$  ein dem Kosterlitz–Thouless–Übergang, welchen das System im Grenzfall  $q = 1$  auf-

weist, ähnliches Verhalten gefunden. Es wurde argumentiert, daß diese Übergänge im thermodynamischen Limes nur für  $q = 1$  erhalten bleiben.

Weiterhin wurde erkannt, daß die Temperaturen  $T'$ , bei denen die Übergänge für  $q < 1$  zu finden waren, durch die  $T$ - $T'$ -Transformation gerade in die unphysikalischen  $T$ -Bereiche abgebildet wurden und daher zu eliminieren waren. Damit konnte die Existenz eines KT-Übergangs bei Betrachtung des Systems in Abhängigkeit von  $T$  für  $q < 1$  im thermodynamischen Limes zwar nicht ausgeschlossen werden, die starken Analogien im Verhalten des  $XY$ -Modells zu den zuvor betrachteten Systemen legten jedoch die Vermutung nahe, daß die auftretenden diskontinuierlichen Übergänge für  $N \rightarrow \infty$  nicht mehr auftreten.

Schließlich wurde argumentiert, daß die bei  $q > 1$  auftretenden KT-Übergänge in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  im thermodynamischen Limes nicht zu finden sind, da die Transformation die entsprechenden sehr schmalen  $T'$ -Intervalle, in denen die Übergänge stattfinden (die für  $N \rightarrow \infty$  zu Punkten werden), auf einen weiten  $T$ -Bereich abbildet, der für  $N \rightarrow \infty$  die gesamte Temperaturachse überstreicht.

### 6.3 Diskussion

In dieser Arbeit sind drei physikalische Systeme im Rahmen einer verallgemeinerten statistischen Mechanik untersucht worden, von denen keines in die Klasse der Systeme fällt, für die die Erweiterung der Boltzmann–Gibbs–Statistik eingeführt worden ist. Alle werden durch die Standard–Thermostatistik gut beschrieben. Um jedoch beurteilen zu können, wie exakt die vorhandene Beschreibung tatsächlich ist und ob es vielleicht Effekte gibt, die die BG–Statistik nicht erfaßt, muß diese mit den Resultaten einer geeignet erweiterten Theorie verglichen werden.

Als erweiterte Theorie diente hier die Tsallis–Statistik mit normierten  $q$ –Erwartungswerten und der  $T$ –Temperaturskala. Es wurde gesehen, daß das Verhalten der Systeme in diesem Formalismus durch den reellen Parameter  $q$  in drei Klassen geteilt wird:  $q < 1$ ,  $q = 1$  und  $q > 1$ .

Für  $q < 1$  traten im Verlauf der Rechnungen unphysikalische oder instabile Zustände auf, die aus dem System eliminiert werden mußten. Dies hatte zur Folge, daß die für  $q = 1$  bekannten Phasenübergänge, die bei  $q < 1$  immer gerade in den Intervallen der Hilfsgröße  $T'$  beobachtet wurden, welche durch die  $T$ - $T'$ -Transformation auf die unphysikalischen Bereiche abgebildet wurden, in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  nicht auftraten.

Auch im Parameterbereich  $q > 1$  bei Betrachtung der Systeme in Abhängigkeit von  $T'$  gefundene Phasenübergänge waren nach der Transformation nicht mehr zu beobachten.

Während dies für das zweidimensionale Ising–Modell anhand exakter Rechnungen gezeigt werden konnte—in einer Dimension trat für  $q \neq 1$  ebensowenig ein Phasenübergang auf wie für  $q = 1$ —, war es beim Beispiel des  $XY$ –Modells auf-

grund von Unzulänglichkeiten der dort benutzten Monte–Carlo–Methoden nicht möglich, die Transformation auf die Temperatur  $T$  verläßlich durchzuführen. Die starken Analogien, die zwischen den untersuchten Systemen bestehen, legen jedoch die Vermutung nahe, daß dies auch bei diesem System der Fall ist.

Die Schwierigkeiten, die bei der Broad–Histogram– und bei der Salazar–Methode aufgetreten sind, haben unterschiedliche Ursachen: Während das Problem der BHMC–Methode nur in der Implementierung bestand, d. h. in der Strategie, wie die für die Broad Histogram–Gleichung benötigten mikrokanonischen Erwartungswerte berechnet wurden, ist die Unzulänglichkeit der Salazar–Methode eine grundsätzliche. Für diese Methode ist es zwingend notwendig, die Entropie des betrachteten Systems in irgendeinem Zustand zu kennen, von dem gleichzeitig die Temperatur  $T'$  bekannt ist. Dies ist für die wenigsten Systeme der Fall.

Es ist grundsätzlich möglich, das BHMC–Verfahren zu verbessern, indem eine geschicktere Sampling–Strategie entworfen wird als die von Munoz et al. vorgeschlagene, die hier benutzt worden ist. Wenn dies gelingt, wird es möglich sein, die Vermutungen zu überprüfen, die hier bezüglich des XY–Modells geäußert worden sind. Sollten sich diese bestätigen, kann die Erkenntnis, daß Phasenübergänge in einer verallgemeinerten Theorie nur in einem speziellen Fall—dem extensiven Grenzfall  $q = 1$ —auftreten, als Anzeichen dafür aufgefaßt werden, daß die entsprechenden Systeme durch die Boltzmann–Gibbs–Statistik vollständig beschrieben werden.

Die in der Ergänzung 6.1 referierten jüngsten Entwicklungen machen einmal mehr deutlich, daß es keineswegs gesichert ist, daß die hier eingesetzte Erweiterung der „klassischen“ statistischen Mechanik die geeignetste ist. Sämtliche bisher untersuchten Verallgemeinerungen der BG–Statistik auf der Grundlage der Tsallis–Entropie haben gemeinsam, daß die thermodynamischen Zustandsgrößen im Grenzfall  $q \rightarrow 1$  in die entsprechenden klassischen Größen übergehen. Nur in diesem Grenzfall haben sie eine physikalische Bedeutung. Bisher fehlt leider jede physikalische Interpretation dieser Größen für  $q \neq 1$ , und es ist auch nicht klar, welchen physikalischen Situationen die Fälle  $q < 1$  und  $q > 1$  entsprechen. Der Versuch, dies zu klären, muß einer späteren Arbeit überlassen bleiben.



# Literaturverzeichnis

## Einführung der Tsallis–Statistik

- [1] C. Tsallis. *Possible Generalization of Boltzmann–Gibbs Statistics*. J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [2] E. M. F. Curado, C. Tsallis. *Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics*. J. Phys. A **24**, L69 (1991); Corrigenda: **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).
- [3] C. Tsallis, R. S. Mendes, A. R. Plastino. *The role of constraints within generalized nonextensive statistics*. Physica A **261**, 534 (1998).
- [4] C. Tsallis. *Nonextensive statistics: Theoretical, experimental and computational evidences and connections*. Braz. J. Phys. **29**, 1 (1999).

## Eigenschaften der Tsallis–Statistik

- [5] A. M. Mariz. *On the irreversible nature of the Tsallis and Renyi entropies*. Phys. Lett. A **165**, 409 (1992).
- [6] J. D. Ramshaw. *H-theorems for the Tsallis and Renyi entropies*. Phys. Lett. A **175**, 169 (1993).
- [7] J. D. Ramshaw. *Irreversibility and generalized entropies*. Phys. Lett. A **175**, 171 (1993).
- [8] R. J. V. dos Santos. *Generalization of Shannon's theorem for Tsallis entropy*. J. Math. Phys. **38**, 4104 (1997).
- [9] C. E. Shannon. *The Mathematical Theory of Communication*. Urbana, Urbana University of Illinois Press, 1962.
- [10] S. Abe. *Axioms and uniqueness theorem for Tsallis entropy*. Phys. Lett. A **271**, 74 (2000).

- [11] R. P. Di Sisto, D. Martínez, R. B. Orellana, A. R. Plastino, A. Plastino. *General thermostatistical formalisms, invariance under uniform spectrum translations, and Tsallis  $q$ -additivity*. Physica A **265**, 590 (1999).
- [12] A. Plastino, A. R. Plastino. *On the universality of thermodynamics' Legendre transform structure*. Phys. Lett. A **226**, 257 (1997).
- [13] J. D. Ramshaw. *Thermodynamic stability conditions for the Tsallis and Rényi entropies*. Phys. Lett. A **198**, 119 (1995).
- [14] C. Tsallis. *Comment on "Thermodynamic stability conditions for the Tsallis and Rényi entropies" by J. D. Ramshaw*. Phys. Lett. A **206**, 389 (1995).
- [15] B. Lesche. *Instabilities of Rényi Entropies*. J. Stat. Phys. **27**, 419 (1982).
- [16] L. R. da Silva, E. K. Lenzi, J. S. Andrade Jr., J. Mendes Filho. *Tsallis non-extensive statistics with normalized  $q$ -expectation values: thermodynamical stability and simple illustrations*. Physica A **275**, 396 (2000).
- [17] A. R. Lima, T. J. P. Penna. *Tsallis statistics with normalized  $q$ -expectation values is thermodynamically stable: illustrations*. Phys. Lett. A **256**, 221 (1999).
- [18] E. M. F. Curado. *General Aspects of the Thermodynamical Formalism*. Braz. J. Phys. **29**, 36 (1999).
- [19] A. R. Plastino, A. Plastino. *Tsallis' entropy, Ehrenfest theorem and information theory*. Phys. Lett. A **177**, 177 (1993).
- [20] A. Plastino, A. R. Plastino. *Tsallis Entropy and Jaynes' Information Theory Formalism*. Braz. J. Phys. **29**, 50 (1999).
- [21] A. Plastino, C. Tsallis. *Variational method in generalized statistical mechanics*. J. Phys. A **26**, L893 (1993).

## Monte–Carlo–Methoden

- [22] T. J. P. Penna. *Traveling salesman problem and Tsallis statistics*. Phys. Rev. E **51**, R1 (1995).
- [23] I. Andricioaei, J. E. Straub. *Generalized simulated annealing algorithms using Tsallis statistics: Application to conformational optimization of a tetrapeptide*. Phys. Rev. E **53**, R3055 (1996).
- [24] I. Andricioaei, J. E. Straub. *An efficient Monte Carlo algorithm for overcoming broken ergodicity in the simulation of spin systems*. Physica A **247**, 553 (1997).

- [25] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen. *New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions*. Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).
- [26] R. Salazar, R. Toral. *A Monte Carlo Method for the Numerical Simulation of Tsallis Statistics*. Physica A **283**, 59 (2000).
- [27] M. Creutz. *Microcanonical Monte Carlo Simulation*. Phys. Rev. Lett. **50**, 1411 (1983).
- [28] G. Bhanot, S. Black, P. Carter, R. Salvador. *A New Method for the Partition Function of Discrete Systems with Application to the 3D Ising Model*. Phys. Lett. B **183**, 331 (1987).
- [29] R. Salazar, R. Toral. *Thermostatistics of extensive and non-extensive systems using generalized entropies*. Physica A **290**, 159 (2001).
- [30] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna. *Broad Histogram Method*. Braz. J. Phys. **26**, 677 (1996).
- [31] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna, H. J. Herrmann. *Broad Histogram Monte Carlo*. cond-mat/9709064.
- [32] P. M. C. de Oliveira. *Broad Histogram Relation Is Exact*. Eur. Phys. J. B **6**, 111 (1998).
- [33] J.-S. Wang. *Is the broad histogram random walk dynamics correct?* Eur. Phys. J. B **8**, 287 (1999).
- [34] P. M. C. de Oliveira. *Broad Histogram: An Overview*. Braz. J. Phys. **30**, 195 (2000).
- [35] A. R. Lima, P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna. *A comparison between broad histogram and multicanonical methods*. J. Stat. Phys. **99**, 691 (2000).
- [36] J. D. Muñoz, H. J. Herrmann. *Extending the Broad Histogram Method for Continuous Systems*. CCP 1998, 2.–5. September 1998, Granada, Spain, auch: cond-mat/9810292.
- [37] J. D. Muñoz, H. J. Herrmann. *Broad Histogram Method for Continuous Systems: The XY–Model*. Int. J. Mod. Phys. C **10**, 95 (1999).

## Zu den betrachteten Systemen

- [38] R. F. S. Andrade. *Ising chain in the generalized Boltzmann–Gibbs statistics.* Physica A **175**, 285 (1991).
- [39] R. F. S. Andrade. *Remarks on the behavior of the Ising chain in the generalized statistics.* Physica A **203**, 486 (1994).
- [40] U. Tırnaklı, D. Demirhan, F. Büyükkılıç. *Comparison of the Standard Statistical Thermodynamics (SST) with the Generalized Statistical Thermodynamics (GST) Results for the Ising Chain.* Acta Phys. Pol. A **91**, 1035 (1997), auch: cond-mat/9612055.
- [41] F. Büyükkılıç, U. Tırnaklı, D. Demirhan. *Generalized Tsallis Thermostatistics of Magnetic Systems.* Tr. J. Phys. **21**, 132 (1997), auch: cond-mat/9611219.
- [42] K. Pinn. *Calculation of the  $g(E,M)$  (density of states) function for the 1-dimensional Ising model.* private Mitteilung.
- [43] P. D. Beale. *Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model.* Phys. Rev. Lett. **76**, 78 (1996).
- [44] L. R. da Silva, H. E. Stanley. *Duality-based approximation for the critical point of the square lattice Ising ferromagnet within Tsallis statistics.* Physica A **234**, 497 (1996).
- [45] S. A. Cannas, C. Tsallis. *Self-dual planar lattice Ising ferromagnet within generalized thermostatistics.* Z. Phys. B **100**, 623 (1996).
- [46] A. R. Lima, J. S. Sá Martins, T. J. P. Penna. *Monte Carlo Simulation of Magnetic Systems in the Tsallis Statistics.* Physica A **268**, 553 (1999).
- [47] R. Gupta, C. F. Baillie. *Critical behavior of the two-dimensional XY model.* Phys. Rev. B **45**, 2883 (1992).
- [48] N. D. Mermin, H. Wagner. *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models.* Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [49] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless. *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems.* J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [50] J. M. Kosterlitz. *The critical properties of the two-dimensional  $xy$  model.* J. Phys. C **7**, 1046 (1974).

## Anwendungen der Tsallis–Statistik

- [51] A. R. Plastino, A. Plastino. *Stellar polytropes and Tsallis' entropy*. Phys. Lett. A **174**, 384 (1993).
- [52] Q. A. Wang. *Incomplete statistics and nonextensive generalization of statistical mechanics*. cond-mat/0009343.
- [53] Q. A. Wang. *Incomplete statistical mechanics and the zeroth law of thermodynamics*. cond-mat/0009347.
- [54] Q. A. Wang. *Generalizations of statistical mechanics on the basis of an incomplete information theory*. cond-mat/0009354.
- [55] S. Abe, S. Martínez, F. Pennini, A. Plastino. *Nonextensive thermodynamic relations*. cond-mat/0011012.
- [56] S. K. Rama. *Tsallis Statistics: Averages and a Physical Interpretation of the Lagrange Multiplier  $\beta$* . Phys. Lett. A **276**, 103 (2000).
- [57] S. Martínez, F. Nicolás, F. Pennini, A. Plastino. *Tsallis' entropy maximization procedure revisited*. cond-mat/0003098.

## Lehrbücher

- [58] A. Papoulis. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*. New York, Mc Graw–Hill, 1965.
- [59] K. Huang. *Statistical mechanics*. 2nd ed. New York, John Wiley & Sons, 1987.
- [60] H. B. Callen. *Thermodynamics. An Introduction to the Physical Theories of Equilibrium Thermostatics and Irreversible Thermodynamics*. New York, John Wiley & Sons, 1960.
- [61] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. 2nd ed. New York, John Wiley & Sons, 1998.
- [62] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman. *The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford, Oxford University Press, 1992.
- [63] M. E. J. Newman, G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford, Oxford University Press, 1999.



*Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.*

*Münster, 24. Januar 2001*



