

# Koexistenz vom klassischen und schwachen Chaos im Pottsmodell

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

vorgelegt von  
**Jesper Heide**

Kiel, im September 2000

*Meiner Mutter*

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b><math>q</math>-<math>\bar{q}</math>-Potts-Modell auf dem Bethe-Gitter und seine Grundlagen: Erweiterung des Zeemannterms</b>	<b>8</b>
2.1	Das $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell auf dem Bethe Gitter . . . . .	8
2.2	Rekursive Berechnung des zentralen Ordnungsparameters $x$ . . . . .	13
2.3	Magnetisierung $m$ ausgedrückt durch den Ordnungsparameter $x$ . . . . .	16
2.4	Fixpunkte, Fixzyklen und deren Stabilität . . . . .	18
2.4.1	Reskalierung . . . . .	18
2.4.2	Paramagnetische Phase . . . . .	19
2.4.3	Ferromagnetische Phase . . . . .	20
2.4.4	Antiferromagnetische Phase: Fixzyklen und Chaos . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Spieltheoretische Interpretationsmöglichkeiten</b>	<b>30</b>
3.1	Evolutionstheoretischer Diversifikationsprozeß . . . . .	32
3.2	Wirtschaftswissenschaftliches Konkurrenzmodell . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Thermodynamische Eigenschaften des Modells</b>	<b>34</b>
4.1	Korrelationsfunktion im Fall $\tau \leq 2$ . . . . .	34
4.2	Freie Energie des Modells . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Chaosphänomene</b>	<b>41</b>
5.1	Die Entwicklung der Iterationsgleichung und die Analogie zur logistischen Abbildung im Perkulationslimes $\varepsilon \rightarrow 0$ . . . . .	41
5.2	Chaosphänomene bei Reskalierung . . . . .	42
5.2.1	Beschreibung des Algorithmus zur Gewinnung von Fixpunkt- diagrammen und des Liapunov-Exponenten . . . . .	43
5.2.2	Simulationsergebnisse . . . . .	44
5.3	Bestimmung der Feigenbaumkonstanten $\alpha$ und $\delta$ für $z \geq 3$ . . . . .	55
5.3.1	Beschreibung des Algorithmus . . . . .	55
5.3.2	Ergebnisse . . . . .	56
5.4	Die obere Grenze $\varepsilon_c$ für Erhalt von Chaos bei $z = 3$ . . . . .	58
5.5	Periodennäherung der endlichen Zyklen . . . . .	58

<b>6</b>	<b>Erweiterung der Nachbar-Wechselwirkung des Modells</b>	<b>63</b>
6.1	Erweiterung im Fall $z = 3$ und $\bar{q} = 1$ . . . . .	64
6.2	Stabilitätsmatrix und Liapunov-Exponent . . . . .	69
6.3	Das Isingmodell mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung . . . . .	72
6.3.1	Skizze der Herleitung der Rekursionsgleichungen . . . . .	73
6.3.2	Freie Energie . . . . .	74
6.3.3	Analytische Voraussagen zum Phasendiagramm und ihre Bestätigung durch Simulationen . . . . .	75
6.4	Das $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung . . . . .	83
6.4.1	Skizze der Herleitung der Rekursionsformeln . . . . .	83
6.4.2	Phasendiagramme für $q \geq 3, \bar{q}$ ganzzahlig bei $K > 0, K < 0$ und Simulationsergebnisse . . . . .	85
6.5	Spieltheoretische Erweiterung . . . . .	108
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>109</b>
<b>A</b>	<b>Magnetisierung als Ableitung der Freien Energie</b>	<b>112</b>
<b>B</b>	<b>Direkt-Nachbar-Korrelation als Ableitung der Freien Energie</b>	<b>115</b>
<b>C</b>	<b>Äquivalenz der Rekursionsgleichung zur Logistischen Abbildung im Perkollationslimes <math>\varepsilon \rightarrow 0</math></b>	<b>118</b>
<b>D</b>	<b>Zusammenhang des <math>q - \bar{q}</math>-Potts-Modells mit Perkollation</b>	<b>120</b>
<b>E</b>	<b>Perkollationslimes <math>q \rightarrow 1</math> mit Übernächst-Nachbar- Wechselwirkung</b>	<b>123</b>
<b>F</b>	<b>Der Limes <math>z \rightarrow \infty</math></b>	<b>128</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>129</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Seit fast 50 Jahren ist das  $q$ -state-Potts-Modell als Verallgemeinerung des Ising-Modells von 2 auf  $q$  Systemzustände bekannt. Nachdem es zunächst nur wenig Aufmerksamkeit auf sich zog, wurde es in den letzten Jahren zunehmend untersucht, da gezeigt werden konnte, daß es zahlreiche interessante Phänomene aufweist (Wu, 1982). Zudem wurden Anwendungsbeispiele gerade aus dem Bereich der Festkörperphysik bekannt (Zia et al., 1975), (Wallace et al., 1977). Einen historischen Abriß der aufgetretenen Probleme und Erkenntnisse liefert Kapitel 2.2.

Bei dem  $q$ -state-Potts-Modell

- wechselwirkt jeder Spin mit den direkten Nachbarspins und
- wird durch ein äußeres Magnetfeld beeinflusst.

Sowohl die Spinwechselwirkung als auch die Einwirkung des Magnetfeldes erfahren in dieser Arbeit naheliegende Verallgemeinerungen, die beide zu strukturellen (keinen zeitlichen) Chaosphänomenen führen.

In Kapitel 2 wird das in weiten Teilen dieser Arbeit behandelte  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell auf dem Bethe-Gitter eingeführt. In diesem Modell wird die Einwirkung des äußeren Magnetfeldes verallgemeinert. Anstatt nur eine Spinstellung wie im klassischen Potts-Modell mit dem Magnetfeld wechselwirken zu lassen, werden jetzt  $\bar{q}$  Spinstellungen mit  $\bar{q} \leq q$  ausgezeichnet. Die Wechselwirkung mit den Nachbarspins bleibt hierbei zunächst unberührt.

Es wird die Herleitung einer Rekursionsabbildung gezeigt. Die Anwendung dieser Abbildung spiegelt den rein topologischen Anbau einer weiteren Schale des Cayley-Baumes wider und beschreibt die Variation des Ordnungsparameters  $x$  bei diesem Vorgehen. Mit Hilfe dieses Parameters läßt sich die Magnetisierung ausdrücken.

---

Es zeigt sich, daß die Bifurkationsdiagramme, die sich durch wiederholte Anwendung der Iterationsgleichung auf beliebige Startwerte ergeben, bei gleichen Werten des Parameters  $\varepsilon = \frac{q}{4} - 1$  identisch sind. Nach einer Reskalierung erfolgt eine Untersuchung der Phasengrenzen, die durch die Stabilität der Fixpunkte der Rekursionsabbildung ermittelt werden. Anschließend werden getrennt die Fixpunkte und -zyklen der paramagnetischen, ferromagnetischen und antiferromagnetischen Phase untersucht.

In Kapitel 3 wird zum Aufzeigen von Anwendungsmöglichkeiten des Modells ein evolutionstheoretisches und ein wirtschaftliches Konkurrenzmodell kurz skizzenhaft vorgestellt. Der klare Schwerpunkt dieser Arbeit liegt aber auf der statistischen Bearbeitung der Modelle. Der Versuch, anwendungsbezogene, weiterreichende Schlußfolgerungen aus diesen beiden Modellansätzen zu ziehen, wird somit nicht unternommen.

In Kapitel 4 wird die Bestimmung einiger statistischer Größen des  $q$ - $\bar{q}$ -Modells wie der Korrelationsfunktion oder der Freien Energie im Fall eines Fixpunktes der Rekursionsformel hergeleitet.

Kapitel 5 beschäftigt sich mit den gefundenen Chaosphänomenen, welche die Rekursionsabbildung des Modells zeigt. Im ersten Abschnitt wird zu ihrer Plausibilisierung die gefundene Iterationsgleichung transformiert und so die Gleichheit mit der logistischen Abbildung im Grenzfall  $q \rightarrow \bar{q}$  gezeigt. Anschließend werden nach einer kurzen Vorstellung der Simulationsalgorithmen ihre Ergebnisse präsentiert. Der Frage nach Universalität geht der folgende Abschnitt nach. In den Simulationen wurde gesehen, daß nicht für alle Werte des Kontrollparameters  $\varepsilon$  ein Bifurkationsübergang ins Chaos gefunden werden kann. Dies ist Thema des anschließenden Abschnitts, der eine sehr gute Näherung der sich ergebenden Grenze  $\varepsilon_c$  liefert. Den Abschluß dieses Kapitels bildet ein Abschnitt, der sich mit der Lokalisierung der Fenster beschäftigt, die im Vergleich zur logistischen Abbildung auch ohne Wechsel der Skala in großer Anzahl auszumachen sind. Durch den Übergang von der diskreten Differenzgleichung zur Differenzialgleichung wird eine Näherungsformel für das Auftreten gefunden, die durch Simulationen bestätigt wird.

Im abschließenden Kapitel 6 erfolgt die zweite Verallgemeinerung des klassischen  $q$ -state-Potts-Modells, eine Verallgemeinerung der Spinwechselwirkung. Hier wird die Kopplung der direkten Nachbarn (NN-Kopplung) zusätzlich auf die übernächsten Nachbarn (NNN-Kopplung) ausgedehnt. Durch das Betrachten dieses erweiterten Modells erhöht sich die Anzahl der "Ordnungsparameter"  $x$  auf drei im Fall des erweiterten Ising-Modells, auf vier im Fall des erweiterten  $q$ -state-Potts-Modells und auf fünf im Fall des erweiterten  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells. Diese Größen ergeben in Kombination die lokale Magnetisierung, die Bezeichnung Ord-

nungsparameter ist somit irreführend, wird aber als Bezeichnung in dieser Arbeit eingeführt. Die Erweiterung bewirkt im Fall einer antiferromagnetischen NNN-Kopplung Frustrationseffekte.

Nachdem in den ersten beiden Abschnitten der Weg zu den Rekursionsformeln skizziert und das Prinzip des eindimensionalen Liapunov-Exponenten auf unsere mehrdimensionalen Modelle übertragen wird, beschäftigt sich der folgende Abschnitt mit dem einfachsten Fall, dem Ising-Modell mit NNN-Kopplung. Es kann in diesem Fall die Freie Energie gewonnen und Voraussagen zum Phasendiagramm analytisch gemacht werden. Diese werden schließlich mit dem numerisch erhaltenen Diagramm bestätigt. Durch Simulationen der Bifurkationsdiagramme und des Liapunov-Exponenten wird gezeigt, daß hier ausschließlich Fixzyklen endlicher Länge und große Bereiche schwachen Chaos (Chern et al. a, 1994), (Chern et al. b, 1994) gefunden werden. Dieser Ausdruck wird in dieser Arbeit als Bezeichnung übernommen, die Natur der Erscheinung des "schwachen Chaos" aber noch genauer untersucht. Gemeint ist mit dem Begriff ein Intervall, in dem der Liapunov-Exponent numerisch exakt Null ist. Bei diesem wird kein Übergang mittels Bifurkationen beobachtet.

Der anschließende Abschnitt verallgemeinert dieses Beispiel auf das in den vorigen Kapiteln behandelte  $q-\bar{q}$ -Modell mit NNN-Kopplung. Hier werden durch Wegfall der Isingsymmetrie des vorangegangenen Abschnittes die Fälle einer ferro- und einer antiferromagnetischen NN-Kopplung getrennt behandelt, zeigen aber qualitativ identisches Verhalten. Es findet somit eine Konzentration auf den ferromagnetischen Fall statt. Es zeigt sich ferner, daß bei gegebenem  $q \in \mathbb{N}$  die Wahl von  $\bar{q} \in \mathbb{N}$  keinen Einfluß auf die Phasengrenzen und die Grenzen der Fenster hat. Es wird folglich in dieser Arbeit ausschließlich der Fall  $\bar{q} = 1$  betrachtet, da sich hier die Anzahl der Ordnungsparameter von fünf auf vier verkleinert.

Am Beispiel  $q = 3$  wird bei höheren Temperaturen schwaches Chaos gefunden. Es zeigt sich, daß die Iterierten der Rekursionsabbildungen in dem Bereich des schwachen Chaos auf einem Attraktor landen, der die Form einer geschlossenen Raumkurve im vierdimensionalen Phasenraum hat. Diese hat eine nahezu ebene, ovalförmige Gestalt. Der Attraktor ist abhängig von den Systemparametern wie der Temperatur, aber unabhängig von den Startwerten der Iteration.

Es zeigt sich, daß die Iterationspunkte den Attraktor quasiperiodisch durchwandern und so in den Bifurkationsdiagrammen ein Intervall (pro Ordnungsparameter) gleichmäßig schwärzen. Die Größe dieses Intervalls ist dabei durch die Ausdehnung des Attraktors in dieser Raumrichtung gegeben. Es wird gezeigt, daß der Abstand zweier eng benachbarter Startwerte um den anfänglichen Wert  $\Delta x(0)$  in einem kleinen (auf der Skala von  $\Delta x(0)$ ) Intervall fluktuiert und so ein exponentielles Separieren wie auch eine Konvergenz zu einem Fixpunkt nicht

---

ermöglicht. Die quasiperiodische Natur der Iterationsabbildungen verhindert das Annehmen eines Zyklus und somit einen negativen Liapunov-Exponenten. Insgesamt erklärt dies das Verschwinden dieser Größe.

Fenster innerhalb des schwachen Chaos, das seine Ursache also in der Quasiperiodizität der Iterationsabbildungen findet, zeigen einen temperaturabhängigen Übergang zur Periodizität.

Bei deutlicher Verkleinerung der Temperatur verformt sich zunehmend der Attraktor. Durch lokale Streckungen und Stauchungen erhält er große "Ausbuchtungen", die schnell mit der Temperatur wachsen. Es wird veranschaulicht, daß sie verhindern, daß weiterhin die Iterationspunkte vollkommen gleichmäßig den Attraktor überdecken. Ein Vergleich des Iterationsverhaltens eng benachbarter Anfangspunkte bei hohen und bei niedrigeren Temperaturen (im schwachen und im klassischen Chaos) zeigt den kontinuierlichen Verlust des quasiperiodischen Verhaltens, das sich in Form von nahezu gleichbleibenden Abständen zeigt. Bei niedrigen Temperaturen wächst  $\Delta x(0)$  schließlich exponentiell mit Zunahme der Iterationen und führt somit zu einem positiven Liapunov-Exponenten.

In den Übergangsbereichen zwischen schwachen und klassischen Chaos finden sich neben interessant anmutenden Gebilden in den Bifurkationsdiagrammen auch Übergänge ins harte, klassische Chaos ohne Bifurkationskaskaden.



# Kapitel 2

## $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell auf dem Bethe-Gitter und seine Grundlagen: Erweiterung des Zeemannterms

Die Berechnung der Zustandssumme  $Z$  ist in allen realistischen statistischen Problemen hoffnungslos schwierig. Somit ist man dazu gezwungen,

1. Näherungsverfahren einzusetzen und nur noch die für entscheidend gehaltenen Eigenschaften in die Berechnung eingehen zu lassen oder
2. das reale System durch einfache Idealisierungen, sogenannte Modelle, zu ersetzen. Diese können naturgemäß die Wirklichkeit nicht mehr in allen Belangen wiedergeben, lassen aber vor allem einige qualitative Schlußfolgerungen zu.

In diesem Kapitel wird zunächst ein neues Modell, das  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell auf dem Bethe-Gitter, eingeführt und seine exakte Lösbarkeit in manchen Punkten gezeigt.

### 2.1 Das $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell auf dem Bethe Gitter

Das ursprüngliche  $q$ -State-Potts-Modell (Potts, 1952), (Kosterlitz et al., 1978), (Nelson, 1979), (Barber, 1980) wurde vor fast 50 Jahren als Generalisierung des Ising-Modells vorgeschlagen, da es statt der dualen Zustandsmöglichkeiten jedes Spins verallgemeinert  $q$  Möglichkeiten besitzt. Das sich ergebende kritische Verhalten ist reichhaltiger und genereller, als es das Ising-Modell allein zeigt (Wu, 1982). Seine Wichtigkeit ist zudem begründet in der großen Verwandtschaft zu einer Reihe offener Problemstellungen in der Gitter-Statistik und es ist ein wichtiges Testbeispiel für diverse Methoden und Vorgehensweisen in der Theorie

des Kritischen Verhaltens (Wu, 1982).

Nachdem zunächst geglaubt wurde, daß das Modell rein akademischen Charakter hat, wurden später praktische Realisierungen bekannt. So wurden verschiedene Anwendungsmöglichkeiten bei unterschiedlichen magnetischen Systemen gefunden. Für  $q = 2$  sei auf (de Jongh et al., 1974), für  $q = 3$  auf (Mukamel et al., 1974) und (Barabara et al., 1978) und für  $q = 4$  auf (Domany et al., 1978) verwiesen.

Die Hamilton-Funktion  $\mathcal{H}$  zerfällt beim  $q$ -State-Potts-Modell in zwei Teile:

1. einem Teil, der die Wechselwirkungen zwischen den Komponenten des Systems beinhaltet, und
2. einem, der die Wechselwirkung mit dem äußeren Magnetfeld wiedergibt.

Analog wird diese Funktion bei der Verallgemeinerung, dem  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell, konstruiert. Hierbei betrachten wir zunächst die über weite Teile dieser Arbeit betrachtete Nächste-Nachbar-Wechselwirkung (auch NN-Kopplung genannt), die auf die Kopplung direkt benachbarter Knoten (auch "sites" genannt) beschränkt ist. Diese drückt sich im Term  $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$  aus. Stärke und Art der Wechselwirkung wird durch den Parameter  $K = \frac{J}{k_B T}$  wiedergegeben. Hierbei wird wie üblich unterschieden zwischen ferromagnetischer ( $K > 0$ ) und antiferromagnetischer ( $K < 0$ ) Wechselwirkung. In der Hamilton-Funktion wird er schließlich über die Menge aller nächsten Nachbarpaare  $\langle i, j \rangle$  summiert. Die Nachbarschafts-Relation und somit die Bestimmung dieser Menge ist dabei von der Art des verwendeten Gitters abhängig. (Erst im Kapitel 6 wird dieser Teil der Wechselwirkung erweitert und eine Interaktion mit den übernächsten Nachbarn (NNN-Kopplung) zusätzlich betrachtet)

Der zweite Teil des Hamiltonians, die Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld  $L$ , bildet den Unterschied zum konventionellen  $q$ -State-Potts-Modell. Das Feld  $L$ , das über das gesamte Gitter konstant ist, tritt im ursprünglichen Modell mit einer speziellen Spinstellung  $\bar{\sigma}$  in Wechselwirkung, ausgedrückt in der Hamilton-Funktion durch den Term  $L\delta_{\sigma, \bar{\sigma}}$ . Beim  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell hingegen wechselwirkt dieses Feld mit einer ganzen Teilmenge mit Mächtigkeit  $\bar{q}$  ( $\bar{q} \leq q$ ). Wir definieren

$$Q \stackrel{Def}{=} \{1, 2, \dots, \bar{q}\}, \quad (2.1)$$

die Menge der Spinstellungen, bei denen der Zeeman-Term im Hamiltonian  $\mathcal{H}$  auftritt, und

$$\bar{Q} \stackrel{Def}{=} \{\bar{q} + 1, \dots, q\}, \quad (2.2)$$

das Komplement. Mit der Definition

$$\Delta_\sigma \stackrel{Def}{=} \delta_{\sigma, 1} + \delta_{\sigma, 2} + \dots + \delta_{\sigma, \bar{q}} = \begin{cases} 1 & \text{für } \sigma \leq \bar{q} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3)$$

kann diese homogene Wechselwirkung knapp formuliert werden, und wir erhalten die Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}(K, L)$  des  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells

$$-\beta\mathcal{H}(K, L) = K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i} \quad (2.4)$$

mit

$$K = \frac{J}{k_B T} \quad L = \frac{H}{k_B T} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2.5)$$

Hier läuft die erste Summe über alle nächsten Nachbarn, die zweite über alle sites.

Auf die übliche Weise erhält man aus der Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  die Zustandssumme, die in ihrer Bedeutung von John Willard Gibbs erst 1902 entdeckt wurde und deren Berechnung seither das zentrale Problem der Gleichgewichts-Thermodynamik ist. Sie ergibt sich als Summe über die Boltzmannfaktoren  $P(\underline{\sigma})$  aller Spinkonfigurationen  $\underline{\sigma}$  auf dem gesamten Gitter

$$Z = \sum_{\underline{\sigma}} P(\underline{\sigma}), \quad (2.6)$$

wobei

$$P(\underline{\sigma}) = e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i}}. \quad (2.7)$$

Dieses Modell betrachten wir auf dem Bethe-Gitter, einem unendlich ausgedehnten Cayley-Tree. Der Name Bethe-Gitter rührt daher, daß die Bethe-Approximation, ein Näherungsverfahren zur Behandlung des Magnetismus, auf dieser topologischen Struktur (aufgrund der fehlenden loops) exakt ist (Bethe, 1935), was auch für mean-field-Rechnungen gilt. Kennzeichnend für dieses Gitter ist, daß

1. es keine geschlossenen Loops gibt,
2. jeder Knoten (Spin) genau  $z$  Nachbarn hat.

Hierbei wird  $z$  die Koordinationszahl genannt.

Der Cayley-Tree hingegen, für den ein Beispiel in Abbildung 2.1 zu sehen ist, kann als das Innere eines Bethe-Gitters angesehen werden (Chen et al., 1974), (Baxter, 1982). Zu ihm gehören Randpunkte, für die Punkt 2 nicht mehr gilt. Dieser Sachverhalt macht eine Extrapolation von Ergebnissen, die auf dem Cayley-Tree gewonnen wurden, auf das Bethe-Gitter sehr schwierig.

Wir werden zunächst die topologische Vorgehensweise beschreiben, um diese schließlich in unsere mathematische zu übersetzen. Durch sukzessiven Anbau neuer Verzweigungen erhält man "neue Schalen" oder Generationen  $G$ . Diese Generationen, die in der Abbildung durch gestrichelte Kreise angedeutet sind, sind

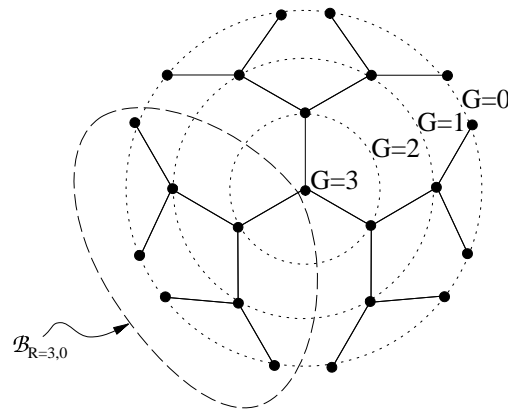


Abbildung 2.1: Beispiel eines Cayley Trees oder kurz Trees  $\mathcal{T}_{R,0}$  mit Koordinatinszahl  $z = 3$  und drei Schalen bzw. Generationen. Hier hat jeder Punkt, abgesehen von der nicht vernachlässigbaren Anzahl von Oberflächenpunkten, genau  $z = 3$  Nachbarn.

von  $G = 0$  am Rand bis  $G = R$  im Ursprung des Trees gekennzeichnet.

Es werden hier zunächst drei Bemerkungen zu dieser topologischen Struktur gemacht, die eng miteinander verwandt sind.

1. Wenn man die Anzahl von Randknoten auf einem Cayley-Baum betrachtet, so ergibt sich diese zu

$$N_{\text{edge}} = z(z-1)^{R-1}, \quad (2.8)$$

die Anzahl der inneren Knoten ergibt sich zu

$$\begin{aligned} N_{\text{internal}} &= 1 + z + z(z-1) + z(z-1)^2 + \dots + z(z-1)^{R-1} \\ &= 1 + \frac{z}{z-2} [(z-1)^{R-1} - 1]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Als Verhältnis erhält man für große  $R$

$$\frac{N_{\text{edge}}}{N_{\text{internal}}} = (z-2) \left[ 1 + \frac{1}{(z-1)^{R-1}} \right] \quad (2.10)$$

und somit im Grenzfall eines unendlich großen Gitters

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left( \frac{N_{\text{edge}}}{N_{\text{internal}}} \right) = z - 2. \quad (2.11)$$

Man sieht, daß die Zahl der Randknoten für  $z > 2$  auch bei größer werdendem Gitter einen nicht verschwindenden Anteil der Gesamtknotenanzahl annimmt. Das in der statistischen Physik sonst übliche Vorgehen, durch Erhöhung der Gesamtknotenanzahl im thermodynamischen Limes den Einfluß des Randes vernachlässigen zu können, wird hier also fehlschlagen. Wir werden uns somit mit dem Trick behelfen, nur Eigenschaften tief im Innern des

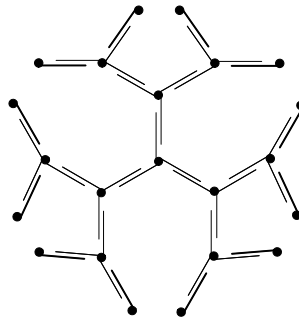


Abbildung 2.2: Die Homogenitätshypothese  $\frac{N_{sites}}{N_{bonds}} = \frac{z}{2}$  ist nur für die inneren Punkte eines Cayley-Trees richtig.

Cayley-Trees zu betrachten, um das Bethe-Gitter mit seinen Eigenschaften anzunähern. Bei Wahl eines sehr großen Trees werden nach Durchwandern einer “Transientenregion”, in der die Eigenschaften zunächst noch stark von der Wahl der Randbedingungen abhängen, die Zustandsgrößen den bei unendlicher Ausdehnung erreichten Zyklen beliebig nahe kommen. Der Kern des Cayley-Trees wird somit im Innern eine sehr gute numerische Approximation des Bethe-Gitters liefern. Dies werden wir bei unseren numerischen Betrachtungen in der Folge immer wieder verwenden.

2. Als zweites wird die Dimensionalität einer solchen topologischen Struktur betrachtet. Bekanntlich wächst die Oberfläche einer  $d$ -dimensionalen Kugel mit  $r^{d-1}$ , ihr Volumen hingegen mit  $r^d$ . Verwendet man diesen Sachverhalt zur Definition der Dimension  $d$ , so erhalten wir folgende Überlegung

$$\text{Oberfläche} \propto \text{Volumen}^{1-\frac{1}{d}}. \quad (2.12)$$

(Gleiches gilt für Hyperwürfel.) Das in der vorigen Bemerkung erzielte Ergebnis (2.11) zeigt aber schon im Fall  $z = 3$ , daß das Verhältnis Oberfläche zum Volumen bei größer werdenden Cayley-Trees gegen 1 strebt, was nach Gleichung (2.12) einer Dimension  $d = \infty$  entspricht.

3. Als Konsequenz der Betrachtung von ausschließlich inneren Punkten wird in der Literatur von der Homogenitätshypothese Gebrauch gemacht. Diese besagt, daß die Anzahl von bonds sich zur Anzahl der sites im Cayley-Tree verhält wie

$$\frac{\text{bonds}}{\text{sites}} = \frac{z}{2}. \quad (2.13)$$

Daß diese Hypothese nur für innere Punkte eines Cayley-Trees sinnvoll ist, zeigt Abbildung 2.2. Sie wird im Gegensatz zu der Mehrzahl der Literatur in dieser Arbeit nicht explizit verwendet, ergibt sich aber später aus der Rechnung. Eine kritische Betrachtung zu der Hypothese liefert (Eggarter, 1974a).

## 2.2 Rekursive Berechnung des zentralen Ordnungsparameters $x$

In diesem Abschnitt wird die rekursive Berechnung des Ordnungsparameters  $x$  hergeleitet, mit deren Hilfe sich beispielsweise die Magnetisierung ausdrücken läßt. (Dies wird in Kapitel 2.3 gezeigt.) Die exakte Lösbarkeit ist auf das rekursive Vorgehen beim Abbau des Bethe-Gitters zurückzuführen, in dem jeder Knoten genau  $z$  Nachbarn hat und keine loops existieren.

Historisch wurde dieses Problem für das  $q$ -state-Potts-Modell, also dem Spezialfall  $\bar{q} = 1$  dieses Modells, sehr kontrovers bearbeitet. Rechnungen mittels loop-Entwicklungen nullter Ordnung und Bethe-Peierls Näherungen führten zu einem Phasenübergang zweiter Ordnung bei der noch zu definierenden Bethe-Peierls-Temperatur  $K_c$  für alle  $q$  und  $z > 2$  (Domb, 1960), (Wheeler et al., 1967), (Southern et al., 1979), (Wang et al., 1976), (Tsallis et al., 1982). Andererseits fanden (Mittag et al., 1974) und (Staley et al., 1973) durch Verwenden der Landau-Theorie bei einer höheren Temperatur  $K_c''$  einen Phasenübergang erster Ordnung für  $q > 2$ . Zusätzliche Verwirrung schafften die Arbeiten von (Eggarter, 1974b) und (Müller-Hartmann, 1974). Eine teilweise Aufklärung schafften schließlich die Arbeiten von (Peruggi et al., 1983) und (Peruggi et al., 1987), die die Freie Energie pro site rekursiv auf einem Bethe-Gitter berechnen konnten. Sie fanden für  $q > 2$  einen Phasenübergang zweiter Ordnung oberhalb der Bethe-Peierls-Temperatur (siehe auch (Essam et al., 1995)).

Die Arbeit von (Peruggi et al., 1983) ließ aber die Frage offen, wie dieses Ergebnis durch Extrapolation eines Cayley-Trees gewonnen werden kann. In einem ersten Versuch schaffte es (Gujrati, 1995), eine Rekursionsformel für einen Cayley-Tree beliebiger Größe zu erhalten. Analoge Methoden wurden später in (Aguiar, 1998) vorgeschlagen. Durch den ausschließlichen Gebrauch von Fixpunkten konnten so die Ergebnisse von (Peruggi et al., 1983) bestätigt werden. In dieser Arbeit wurde aber nicht die Stabilität dieser Fixpunkte untersucht. Diese Vorgehensweise wird nun hier in der vorliegenden Arbeit zum Auffinden der Phasengrenzen verwendet und wird durch Simulationsergebnisse vollständig bestätigt werden.

Zur Herleitung der Rekursionsformel der Zustandsgröße  $x$ , die eine zentrale Stelle dieser Arbeit bildet, werden zunächst einige Definitionen vereinbart:

1. Ein vollständiger Cayley-Tree, der mit Generation  $R$  im Ursprung beginnt und mit Generation 0 am Rand endet, wird im folgenden nur als Tree  $\mathcal{T}_{R,0}$  bezeichnet. Hier ist definiert
  - $\underline{\sigma}$  als eine komplette Verteilung von Spinstellungen auf dem Tree  $\mathcal{T}_{R,0}$ ,
  - $P(\underline{\sigma})$  als Boltzmannfaktor einer solchen Spinverteilung  $\underline{\sigma}$ ,

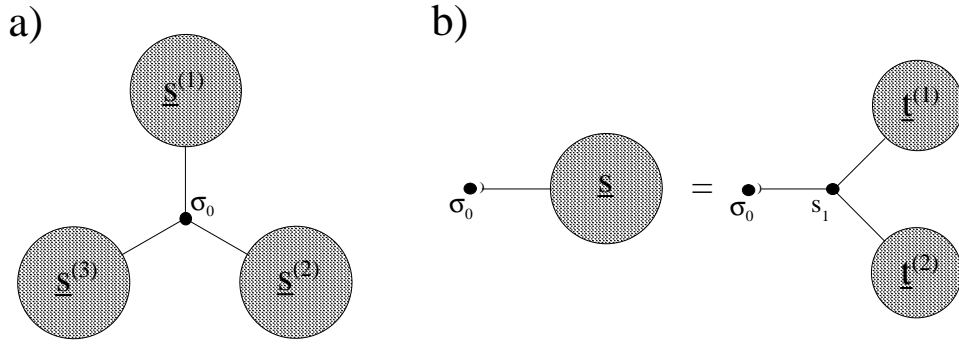


Abbildung 2.3: Die topologische Beschaffenheit eines Cayley-Trees  $\mathcal{T}_{R,0}$  ermöglicht die rekursive Berechnung der Zustandssumme. a) Gesamter Tree zerfällt in  $z$  Branches  $\mathcal{B}_{R,0}$ , die sich um den Ursprung  $\sigma_0$  gruppieren. b) Schematische Darstellung der rekursiven Vorgehensweise: Jeder der  $z$  ursprünglichen Branches zerfällt unter Reduktion einer Generation in  $z-1$  (Unter-)Branches  $\mathcal{B}_{R-1,0}$ . Dadurch wird ein site  $s_1$  "freigelegt".

- $Z_{R,0}(K, L) = Z_n(K, L)$  die Zustandssumme eines Trees  $\mathcal{T}_{R,0}$  mit  $n$  Schalen.
2. Ein Teil oder Zweig eines solchen Trees  $\mathcal{T}_{R,0}$  wird als Branch  $\mathcal{B}_{R,0}$  bezeichnet (siehe Abbildung 2.1). Er selbst zerfällt wieder in  $z-1$  Branches  $\mathcal{B}_{R-1,0}$ . Auf diesen wird ganz analog definiert

- $\underline{s}$  und  $\underline{t}$  als eine komplette Verteilung von Spinstellungen auf dem Branch  $\mathcal{B}_{R,0}$  bzw.  $\mathcal{B}_{R-1,0}$ ,
- $Q_{R,0}(\sigma_0, \underline{s}) = Q_n(\sigma_0, \underline{s})$  als Boltzmannfaktor einer solchen Spinverteilung  $\underline{s}$  mit Anfangsspin  $\sigma_0$ ,
- $T_{R,0}(\sigma_0) = T_n(\sigma_0)$  als die Summe der Boltzmannfaktoren über alle denkbaren Spinverteilungen  $\underline{s}$  mit Anfangsspin  $\sigma_0$  auf dem Branch  $\mathcal{B}_{R,0}$ .

Der Caley-Tree legt eine rekursive Berechnung der Zustandssumme, die wir in Gleichung (4.21) definiert haben, nahe (siehe Abbildung 2.3).

Hierzu schreiben wir den Boltzmannfaktor  $P(\underline{\sigma})$  einer kompletten Spinverteilung um:

$$P(\underline{\sigma}) = e^{L\Delta\sigma_0} \prod_{r=1}^z Q_n(\sigma_0, \underline{s}^{(r)}) \quad (2.14)$$

mit

$$Q_n(\sigma_0, \underline{s}^{(r)}) = e^{K\delta_{\sigma_0, s_1} + L\Delta s_1} \prod_{r=1}^{z-1} Q_{n-1}(s_1, \underline{t}^{(r)}). \quad (2.15)$$

Die Summe aller Boltzmannfaktoren  $Q_n(\sigma_0, \underline{s})$  über sämtliche Spinkonfigurationen bildet den Teil der Zustandssumme, der auf den Branch  $\mathcal{B}_{R,0}$  erzielt wird. Diese

Größe  $T_n(\sigma_0)$  bei  $n$  Schalen nennen wir im weiteren Verlauf "Partialzustandssumme".

$$T_n(\sigma_0) = \sum_{\{\underline{s}\}} Q_n(\sigma_0, \underline{s}) \quad (2.16)$$

Somit hat die gesamte Zustandssumme die einfache Form

$$Z(K, L) = \sum_{\sigma_0} e^{L\Delta\sigma_0} T_n(\sigma_0)^z. \quad (2.17)$$

Da die Hamiltonfunktion nur unterscheidet, ob ein Spin in  $\underline{Q} = \{1, \dots, \bar{q}\}$  liegt oder nicht, ist die Annahme

$$T_n(\sigma_0) = T_n(\sigma'_0) \text{ für alle } \sigma_0, \sigma'_0 \in \underline{Q} \quad (2.18)$$

und

$$T_n(\sigma_0) = T_n(\sigma'_0) \text{ für alle } \sigma_0, \sigma'_0 \in \overline{Q} \quad (2.19)$$

sinnvoll und wird in Zukunft gemacht. Es ist somit die Schreibweise

$$T_n(\underline{Q}) \text{ für alle identischen } T_n(\sigma) \text{ mit } \sigma \in \underline{Q} \quad (2.20)$$

beziehungsweise

$$T_n(\overline{Q}) \text{ für alle identischen } T_n(\sigma) \text{ mit } \sigma \in \overline{Q} \quad (2.21)$$

sinnvoll. Zuletzt definieren wir das Verhältnis

$$x_n = \frac{T_n(\overline{Q})}{T_n(\underline{Q})}, \quad (2.22)$$

das unter der eben getätigten Annahme eine wohldefinierte Größe ist. Als triviale Zerlegung sei notiert, daß für beliebiges  $\sigma \in \{1, \dots, q\}$  gilt

$$T_n(\sigma) = T_n(\underline{Q}) (\Delta_\sigma + x_n (1 - \Delta_\sigma)). \quad (2.23)$$

Die Zustandssumme ergibt sich hiermit nach Gleichung (2.17) und der Idempotenz von  $\Delta_\sigma$  zu

$$\begin{aligned} Z(K, L) &= \sum_{\sigma_0} e^{L\Delta\sigma_0} T_n(\sigma_0)^z \\ &= T_n(\underline{Q})^z (\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_n^z). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Um für diese Zustandsgröße  $x$  eine Rekursionsformel zu erhalten, formen wir zunächst  $T_n(\underline{Q})$  und  $T_n(\overline{Q})$  um. Dazu erhalten wir aus Gleichung (2.15)

$$T_n(\sigma_0) = \sum_{s_1} e^{K\delta_{\sigma_0, s_1} + L\Delta_{s_1}} \underbrace{\prod_{r=1}^{z-1} \sum_{\underline{t}^{(r)}} Q_{n-1}(s_1, \underline{t}^{(r)})}_{T_{n-1}(s_1)^{z-1}}. \quad (2.25)$$



Die Summation über  $s_1$  läßt sich durch eine einfache Fallunterscheidung ausführen:

$$T_n(\underline{Q}) = (e^{K+L} + (\bar{q} - 1)e^L) T_{n-1}(\underline{Q})^{z-1} + (q - \bar{q})T_{n-1}(\bar{Q})^{z-1} \quad (2.26)$$

und

$$T_n(\bar{Q}) = (e^K + q - \bar{q} - 1) T_{n-1}(\bar{Q})^{z-1} + \bar{q}e^L T_{n-1}(\underline{Q})^{z-1} \quad (2.27)$$

Diese Vorgehen wird durch Abbildung 2.3 auf Seite 14 veranschaulicht. Man erhält so letztlich die Rekursionsformel

$$x_n = \frac{(e^K + q - \bar{q} - 1) x_{n-1}^{z-1} + \bar{q}e^L}{e^L (e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q})x_{n-1}^{z-1}}. \quad (2.28)$$

Für Fixpunkte gilt also

$$x = \frac{(e^K + q - \bar{q} - 1) x^{z-1} + \bar{q}e^L}{e^L (e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q})x^{z-1}}. \quad (2.29)$$

## 2.3 Magnetisierung $m$ ausgedrückt durch den Ordnungsparameter $x$

Die Freie Energie  $f$  eines thermodynamischen Systems der Größe  $N$  ist definiert durch

$$f \stackrel{Def}{=} -k_b T \frac{1}{N} \ln Z = \frac{1}{\beta N} \ln \left( \sum_{\underline{\sigma}} e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i}} \right). \quad (2.30)$$

Die Differentiation nach  $H = -\frac{L}{\beta}$  kann als Definition der Magnetisierung  $\tilde{m}$  genommen werden

$$\begin{aligned} \tilde{m} &\stackrel{Def}{=} \frac{\partial f}{\partial H} \\ &= -\frac{1}{\beta N} \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \frac{\partial L}{\partial H} \sum_i \Delta_{\sigma_i} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \frac{1}{N} \sum_i \Delta_{\sigma_i} e^{-\beta \mathcal{H}} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Wegen der Translationsinvarianz in einem Bethe-Gitter folgt weiter

$$\frac{\partial f}{\partial H} = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \Delta_{\sigma_0} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (2.32)$$

Nach der allgemeinen Definition des thermodynamischen Erwartungswertes einer Observablen  $X$

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} X(\underline{\sigma}) e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (2.33)$$

folgt der Zusammenhang

$$\tilde{m} = \langle \Delta_{\sigma_0} \rangle. \quad (2.34)$$

Dieser allgemeine Zusammenhang läßt sich in unserem  $q$ - $\bar{q}$ -Modell auswerten. Hierzu bemerken wir zunächst die Unabhängigkeit von  $T_n(\sigma_0, x_n)$  von  $\sigma_0$ , sofern dieser in  $\underline{Q}$  liegt. Also folgt

$$\tilde{m} = \langle \Delta_{\sigma_0} \rangle = \bar{q} \langle \delta_{\sigma_0,1} \rangle. \quad (2.35)$$

Nach Definition eines Erwartungswertes gilt

$$\langle \delta_{\sigma_0,1} \rangle = \frac{1}{Z} e^L T_n(\underline{Q})^z, \quad (2.36)$$

und mit Gleichung (2.24) folgt für die Magnetisierung im Fall eines Fixpunktes

$$\begin{aligned} \tilde{m}(x) &= \bar{q} \langle \delta_{\sigma_0,1} \rangle \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \bar{q} \frac{e^L T_n(\underline{Q})^z}{T_n(\underline{Q})^z (\bar{q} e^L + (q - \bar{q}) x_n^z)} \\ &= \frac{\bar{q} e^L}{\bar{q} e^L + (q - \bar{q}) x^z}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Als Ordnungsparameter ist diese Magnetisierung  $\tilde{m}$  nicht zu verwenden, da sie bei unkorrelierten, gleichverteilten Spinstellungen einen von Null verschiedenen Wert ergibt

$$\tilde{m} \rightarrow \frac{\bar{q}}{\bar{q} + (q - \bar{q}) \cdot 1} = \frac{\bar{q}}{q} \quad \text{für } K \rightarrow 0 \quad (x \rightarrow 1). \quad (2.38)$$

Von einem Ordnungsparameter  $m$  erwarten wir aber, daß

1.  $m = 0$  in der paramagnetischen Phase,
2.  $m = 1$  für  $T \rightarrow 0$ .

Durch eine lineare Transformation erhalten wir einen Ordnungsparameter  $m$  mit den gewünschten Eigenschaften

$$m = \frac{q}{q - \bar{q}} \left( \tilde{m} - \frac{\bar{q}}{q} \right), \quad (2.39)$$

oder ausgedrückt mit der expliziten Form von  $\tilde{m}$

$$m = \frac{\bar{q} (e^L - x^z)}{\bar{q} e^L - (q - \bar{q}) x^z}. \quad (2.40)$$

## 2.4 Fixpunkte, Fixzyklen und deren Stabilität

Zur Bestimmung der Phasen unseres Systems mit Hilfe von stabilen Fixpunkten gehen wir bei der Fixpunktgleichung (2.29) zu einer reskalierten Form über. Diese vereinfacht die mathematische Untersuchung und reduziert die Anzahl der Freiheitsgrade von zwei ( $q$  und  $\bar{q}$ ) auf einen ( $\varepsilon = \frac{q}{\bar{q}} - 1$ ), ohne Information zu verlieren. Dies hat seine Ursache darin, daß für verschiedene Werte von  $q$  und  $\bar{q}$ , aber gleichem Verhältnis, also gleichem  $\varepsilon$ , die entstehenden Fixpunktszenarien identisch sind. Anschließend an diese Umskalierung untersuchen wir getrennt die ferromagnetischen und die antiferromagnetischen Fixpunktlösungen.

### 2.4.1 Reskalierung

Zur Untersuchung der bei einem gegebenen  $K$ -Wert auftretenden Fixpunkte und -zyklen reskalieren wir das Modell. Hierzu definieren wir folgende neue Größen

$$K' = \ln \left( 1 + \frac{e^K - 1}{\bar{q}} \right) \quad (2.41)$$

und

$$\varepsilon = \frac{q}{\bar{q}} - 1. \quad (2.42)$$

Durch Gleichung (2.41) ergibt sich ein physikalisch sinnvoller Bereich für  $K'$  von

$$e^{K'} \geq 1 - \frac{1}{\bar{q}}, \quad (2.43)$$

da für  $K' < 1 - \frac{1}{\bar{q}}$  die Temperatur komplex wird und wir somit das physikalisch motivierte  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell verlassen. Dies werden wir in wesentlichen Teilen dieser Arbeit tun. Die Motivation für dieses Vorgehen ist

- das neue, interessante und reichhaltige Chaosszenario perse. Der vollzogene Wechsel vom  $q$ - $\bar{q}$ -Modell zum  $\varepsilon$ -Modell zeigt eine Fülle an neuen Chaos-Phänomenen und ist beispielsweise als Modell der Spieltheorie, wie in Kapitel 3 angedeutet, leicht motivierbar. Aber auch
- das in Kapitel ?? hergeleitete mathematisch komplexe  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell mit Nebenbedingungen, das es durch eine zusätzliche Bedingung an die Spin-Verteilung erlaubt, diese neuen Szenarien auf das ursprüngliche Modell zu übertragen.

Wir werden in Zukunft von der gestrichenen Größe  $K'$  zur ungestrichenen übergehen.

Mit diesen Abkürzungen erscheint die Rekursionsformel (2.28) in neuer Gestalt

$$x_n = f(x_{n-1}) \stackrel{Def}{=} \frac{(e^K + \varepsilon - 1) x_{n-1}^{z-1} + e^L}{e^{K+L} + \varepsilon x_{n-1}^{z-1}}. \quad (2.44)$$

Da eine analytische Lösung der hieraus entstehenden Fixpunktgleichung nur im Fall eines verschwindenden Feldes zu erhalten ist, wird im weiteren Verlauf ausschließlich der Fall  $L = 0$  betrachtet, also die Rekursionsformel

$$x_n = \frac{1 + (e^K + \varepsilon - 1) x_{n-1}^{z-1}}{e^K + \varepsilon x_{n-1}^{z-1}}. \quad (2.45)$$

Die Stabilität der anschließend betrachteten Fixpunkte ist durch die Bedingung

$$\left| \frac{\partial x_n}{\partial x_{n-1}} \right| < 1, \quad (2.46)$$

die eines Fixzyklusses der Länge  $\tau$  durch

$$\left| \prod_{t=1}^{\tau} \frac{\partial x_t^*}{\partial x_{t-1}^*} \right| < 1 \quad (2.47)$$

gegeben.

## 2.4.2 Paramagnetische Phase

Der Fixpunktgleichung

$$x = \frac{(e^K + \varepsilon - 1) x^{z-1} + 1}{e^K + \varepsilon x^{z-1}} \quad (2.48)$$

ist leicht anzusehen, daß sie für alle  $z$ ,  $\varepsilon$  und  $K$  den Fixpunkt  $x = 1$  hat. Dieser hat laut Gleichung (2.37) bei fehlendem Feld die Magnetisierung  $m = 0$  und charakterisiert somit der paramagnetischen Phase. Er ist aber nur für  $K'_c < K < K_c$  stabil, wobei sich die Stabilität mit Bedingung (2.46) ergibt. Dazu differenzieren wir Gleichung (2.44) und erhalten

$$\frac{\partial x_n}{\partial x_{n-1}} = \frac{(e^K - 1)(z - 1)(e^K + \varepsilon)}{(e^K + \varepsilon x_{n-1}^{z-1})^2} x_{n-1}^{z-1}. \quad (2.49)$$

Für den Fixpunkt  $x = 1$  ist diese Ableitung für  $K > 0$  positiv, hingegen für  $K < 0$  negativ und man erhält Stabilität nach Gleichung (2.46) im Intervall

$$\frac{z - 1 - \varepsilon}{z} = e^{K'_c} < e^K < e^{K_c} = \frac{z - 1 + \varepsilon}{z - 2}, \quad (2.50)$$

was den Gültigkeitsbereich der paramagnetischen Phase angibt.

### 2.4.3 Ferromagnetische Phase

Zur weiteren Untersuchung der Fixpunktgleichung auf zusätzliche Fixpunkte setzen wir  $z = 3$ . (Diesen Fall werden wir in dieser Arbeit vornehmlich betrachten. Einen kurzen Ausblick auf den Limes  $z \rightarrow \infty$  gibt Anhang F.) Dieses Vorgehen ermöglicht die exakte analytische Lösbarkeit. Prinzipiell ändert sich aber im ferromagnetischen Fall bei anderen Werten für  $z$  der Aufbau der Fixpunktdiagramme nicht. Auch ein gerades  $z$  liefert ein identisches Verhalten, was beispielsweise in Abbildung 2.7 für  $z = 4$  zu sehen ist.

Wir erhalten hier die zusätzlichen Fixpunkte

$$x_+ = \frac{1}{2\varepsilon} \left( e^K - 1 + \sqrt{(e^K - 1)^2 - 4\varepsilon} \right) \quad (2.51)$$

und

$$x_- = \frac{1}{2\varepsilon} \left( e^K - 1 - \sqrt{(e^K - 1)^2 - 4\varepsilon} \right). \quad (2.52)$$

Ihre Stabilität unterscheidet sich und ist abhängig von  $\varepsilon$ . Mit den Definitionen

$$e^{K_c''} = 1 + 2\sqrt{\varepsilon} \quad (2.53)$$

und

$$e^{K_c} = 2 + \varepsilon \quad (2.54)$$

gilt die Stabilität (vergleiche hierzu (Wagner et al., 1999), (Wang et al., 1976), (Aguiar, 1998))

1. bei  $\varepsilon < 1$

- $x_+$  im Intervall  $[K_c'', \infty)$
- $x_-$  im Intervall  $[K_c, \infty)$

2. bei  $\varepsilon > 1$

- $x_+$  im Intervall  $[K_c, \infty)$
- $x_-$  im Intervall  $[K_c'', \infty)$

Hierbei macht der bei  $K_c''$  aufwachende Fixpunkt einen Phasenübergang erster Ordnung mit anfänglichem Wert von

$$x_{\pm} \Big|_{K=K_c''} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (2.55)$$

Es können somit im Intervall  $[K_c'', K_c]$  die paramagnetische als auch die ferromagnetische Phase auf dem Gitter angenommen werden. Die Anfangsbedingungen bestimmen, welche der zwei Lösungen realisiert wird. Im Fall  $\varepsilon = 1$ , also im allgemeinen Ising-Fall, entstehen beide Fixpunkte  $x_+$  und  $x_-$  beim selben  $K$ -Wert

mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung.

Die Ursache für die Art des Überganges ist am funktionellen Verlauf der Rekursionsformel in den Abbildungen 2.5 und 2.6 leicht zu sehen. Die analytisch gewonnenen Ergebnisse im Fall  $z = 3$  wurden in Abbildung 2.10 dargestellt und mit der Numerik verglichen.

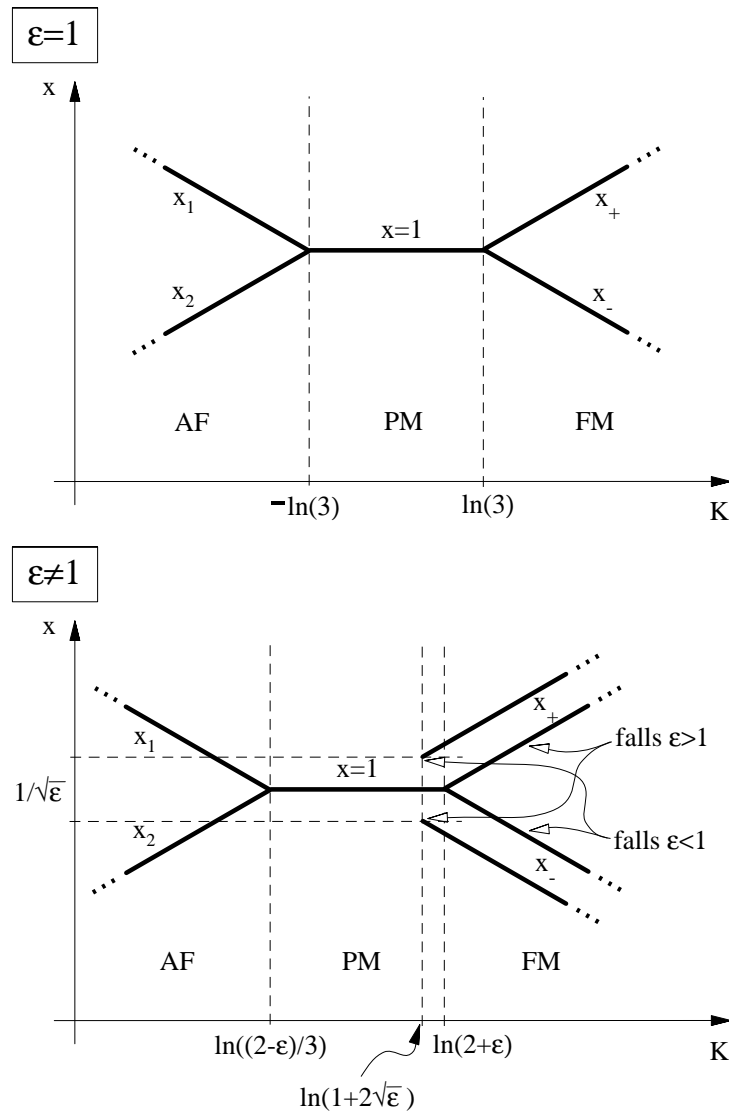


Abbildung 2.4: Schematische Stabilitätsverhältnisse in der Umgebung des stabilen Fixpunktes  $x = 1$  im Isingfall  $\varepsilon = 1$ , bei dem die Isingsymmetrie zu erkennen ist, und in den übrigen Modellklassen.

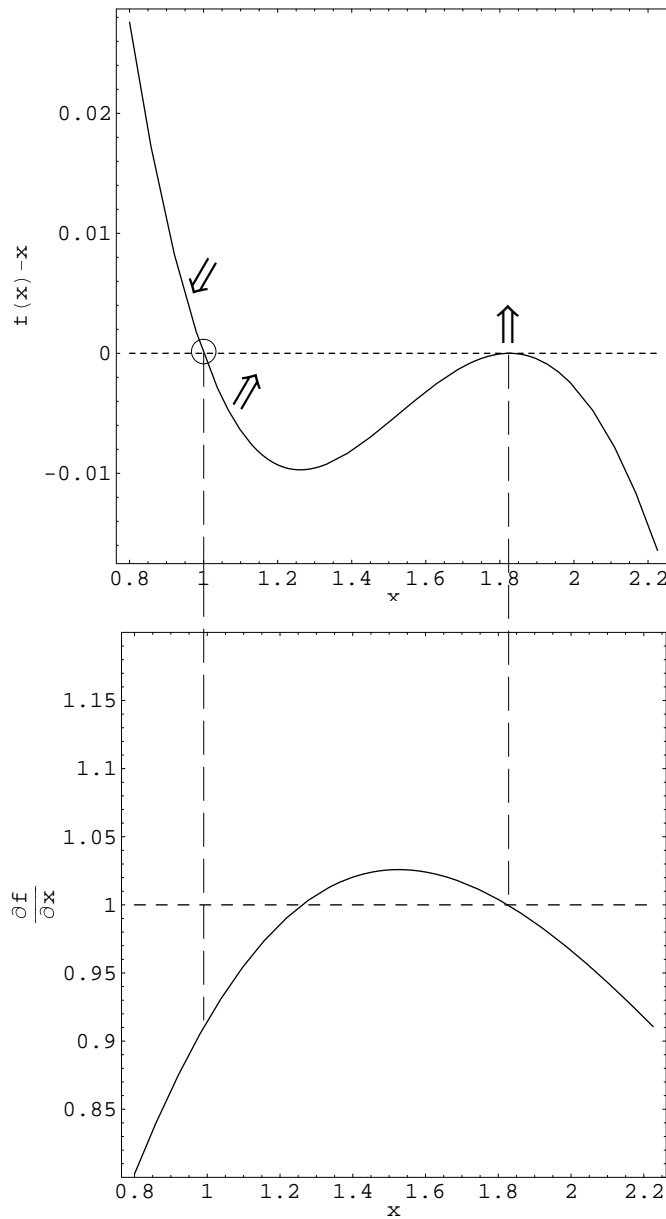


Abbildung 2.5: Verlauf der Fixpunktgleichung  $f(x) - x$  bei  $\varepsilon = 0.3$  und  $z = 3$  und ihre Ableitung. Die Richtung der Pfeile deutet die Veränderung der Funktion beim Anwachsen des  $K$ -Wertes an. Gezeigt ist das kritische  $K_c'' = 0.74$ , bei dem die Funktion gerade die Linie  $f(x) - x = 0$  diskontinuierlich aus dem negativen Bereich kommend bei  $x_+ = 1.83$  (vgl. Gl.(2.55)) durchstößt und so mit einem Phasenübergang 1.Ordnung den neuen Fixpunkt  $x_+$  erwirkt. Der Punkt  $x = 1$  ist für alle  $K$ -Werte ein Fixpunkt, was durch den Kreis symbolisiert sein soll. Die angedeutete "Rotation" der Funktion um diesen Punkt führt bei  $K_c$  zu einem Phasenübergang 2.Ordnung (siehe hierzu Abb. 2.6).

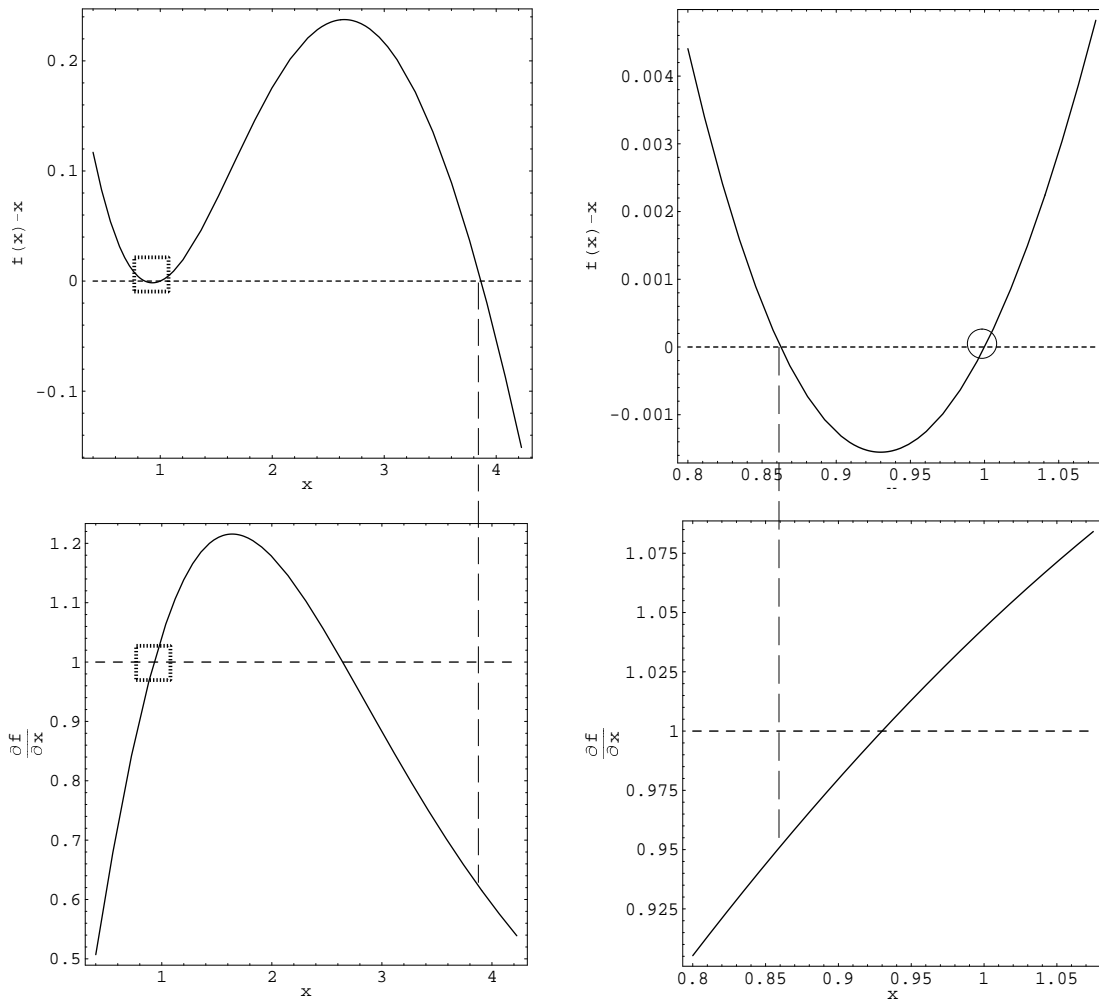


Abbildung 2.6: Verlauf der Fixpunktgleichung  $f(x) - x$  bei  $\varepsilon = 0.3$  und  $z = 3$  bei  $K$  knapp oberhalb von  $K_c = 0.83$ , bei dem der Fixpunkt  $x_-$  sich kontinuierlich aus dem nun instabilen  $x = 1$  entwickelt und so die Magnetisierung des Gitters nach Gleichung (2.40) zeigt. Die unteren Abbildungen geben erneut die Ableitungen wieder. Links sind sämtliche Fixpunkte und ihre Stabilität, rechts sind vergrößert die umküstelten Bereiche im Detail gezeigt.



### 2.4.4 Antiferromagnetische Phase: Fixzyklen und Chaos

Die Unabhängigkeit des Szenarios vom Wert von  $z$  ändert sich, wenn wir den antiferromagnetischen Bereich betrachten. Die Funktionen zeigen hier prinzipielle Unterschiede bei  $z$  gerade und  $z$  ungerade, so daß die beiden Fälle getrennt behandelt werden.

#### Koordinationszahl $z$ gerade (am Beispiel $z = 4$ )

Im Fall  $z$  gerade ist der Fixpunktgleichung (2.48) schnell anzusehen, daß sie für

$$x^{z-1} = -\frac{e^K}{\varepsilon} \quad (2.56)$$

eine Singularität aufweist. Diese vererbt sich auf die folgenden Iterierten und sorgt dafür, daß die Anzahl der stabilen Fixpunkte bzw. -zyklen stets  $\leq 2$  ist. Dies wird in Abbildung 2.8a exemplarisch gezeigt. In Abbildung 2.7 wird der resultierende Fixpunktbaum für  $z = 4$  und  $\varepsilon = 0.0$ ,  $\varepsilon = 0.12$ ,  $\varepsilon = 0.4$  und  $\varepsilon = 0.6$  gezeigt. Zu erkennen ist, daß maximal vier Fixpunkte bzw. -zyklen gleichzeitig stabil werden können, nämlich  $x_1$  und  $x_2$  und eine Bifurkation des Fixpunktes  $x_-$  im antiferromagnetischen Bereich. Höhere Iterierte werden nicht stabil. Der prinzipielle Aufbau des Baumes ändert sich bei anderen geraden Werten für  $z$  nicht. Diese Bifurkation von  $x_-$  ist charakteristisch für  $z$  gerade und ist bei  $z$  ungerade nicht zu beobachten.

#### Koordinationszahl $z$ ungerade (am Beispiel $z = 3$ )

Im Fall  $z = 3$  verliert der Fixpunkt  $x = 1$  nach Gleichung (2.51) bei  $K'_c$  seine Stabilität. Zur Findung weiterer, nun stabiler Fixpunkte wird die zweifach iterierte Gleichung betrachtet. Sie liefert neben den drei bereits bekannten Fixpunkten die zusätzlichen

$$x_1 = -A + \sqrt{A^2 - 1 - \frac{(\varepsilon - 1)(\varepsilon - 2e^K - 2)}{B}} \quad (2.57)$$

und

$$x_2 = -A - \sqrt{A^2 - 1 - \frac{(\varepsilon - 1)(\varepsilon - 2e^K - 2)}{B}} \quad (2.58)$$

mit

$$A = \frac{(e^K - 1)(e^K - \varepsilon)}{2B} \quad (2.59)$$

und

$$B = (e^K + \varepsilon - 1)^2 + \varepsilon e^K. \quad (2.60)$$

Diese werden ab  $K'_c$  stabil. Ab einem charakteristischen  $K$ -Wert  $< K'_c$  werden aber auch diese für  $\varepsilon < \varepsilon_c$ , für das noch in Kapitel 5.4 eine gute Näherung bestimmt werden wird, instabil. Im weiteren Verlauf wird aufeinanderfolgend in

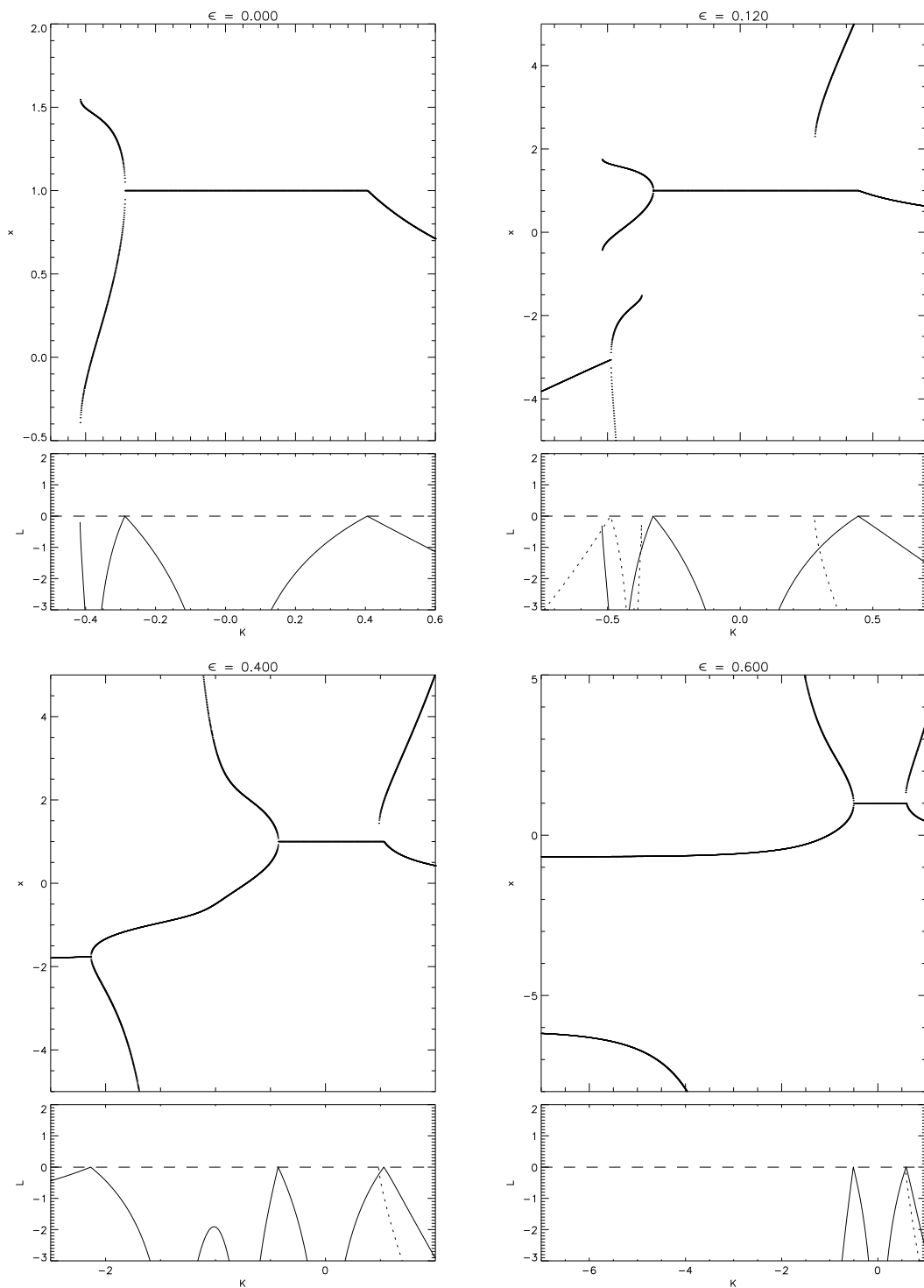


Abbildung 2.7: Der Bifurkationsbaum und der zugehörige Liapunov-Exponent bei  $z = 4$  für verschiedene  $\epsilon$ -Werte. Der bei  $\epsilon = 0$  noch nicht vorhandene Fixpunkt  $x_-$  im antiferromagnetischen Bereich verschmilzt bei größer werdendem  $\epsilon$  mit der zweifach iterierten. Der Bifurkationspunkt dieses Fixpunktes wandert dabei gegen  $K = -\infty$ , so daß der untere Ast schließlich verschwindet.

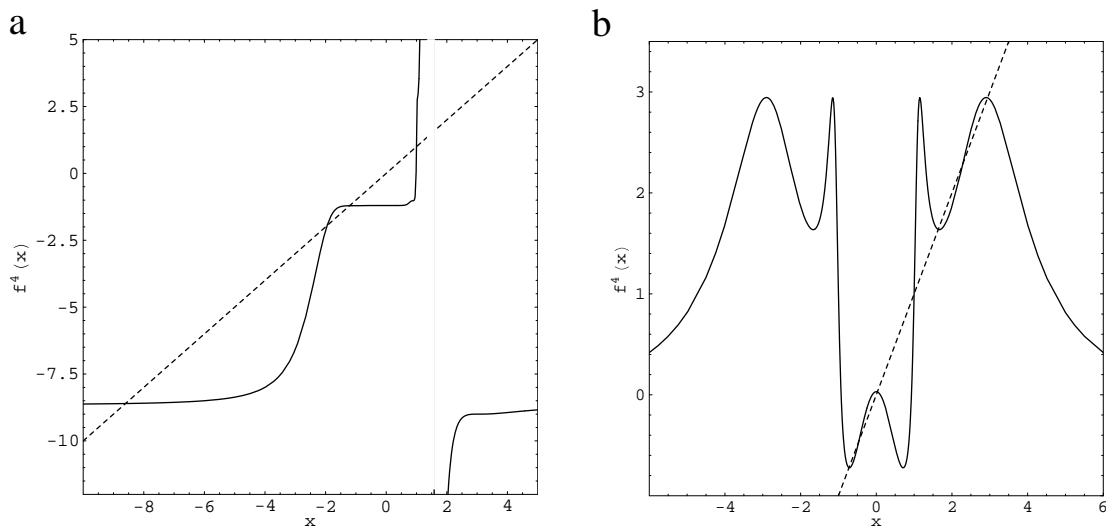


Abbildung 2.8: Die vierfach iterierte Rekursionsfunktion für  $\varepsilon = 0.3$ ,  $K = -1.08$  und a)  $z = 4$  bzw. b)  $z = 3$ . Sie liefert bei  $z = 4$  keine neuen Fixpunkte gegenüber der zweifach iterierten, während bei  $z = 3$  der zu sehende 4er-Zyklus den 2er-Zyklus abgelöst hat. Gestrichelt ist wieder die Funktion  $f(x) = x$  eingezeichnet.

kleinen Intervallen die  $2^n$ -fach Iterierte stabil, die von der  $2^{n+1}$ -fach Iterierten abgelöst wird. Dieses Szenario ist als die Feigenbaumroute ins Chaos bekannt. Ihr analytischer Verlauf läßt sich nun nicht mehr exakt gewinnen. Die dahinterstehende Komplexität im funktionellen Verlauf der höheren Iterierten wird exemplarisch in Abbildung 2.8 für das Beispiel  $z = 3$ ,  $\varepsilon = 0.3$  und  $K = -1.08$  gezeigt. Sie ermöglicht neue, stabile Fixpunkte und so vielfältige Fixpunktdiagramme, wie sie in den Abbildungen 5.2- 5.11 gezeigt werden.

Neben dieser Kaskade von Fixpunkten der höheren Iterierten existieren für  $K < \tilde{K}_c$  mit

$$\tilde{K}_c = \ln(1 - 2\sqrt{\varepsilon}) \quad (2.61)$$

die aus dem ferromagnetischen Bereich bekannten Fixpunkte  $x_-$  und  $x_+$  nach Gleichung (2.51) und (2.52). Hier ist  $x_-$  bis  $K = -\infty$  stabil, während  $x_+$  immer instabil ist. Diese Instabilität hat gravierende Konsequenzen. Kommt in den abstoßende Bereich von  $x_+$  ein Zyklenelement einer höheren Iterierten, so macht der Fixpunkt diesen instabil, indem er ihn zum stabilen Fixpunkt  $x_-$  "stößt". Da die Elemente zyklisch durchlaufen werden, läßt er somit den gesamten Zyklusbaum bei der ersten Berührung verschwinden. Dies wird in Abbildung 2.9 a) und b) für die folgenden Fälle gezeigt

1.  $\varepsilon \leq \frac{1}{9}$ : der gemeinsame Endpunkt der Fixpunkte  $x_-$  und  $x_+$  bei  $\tilde{K}_c = \ln(1 - 2\sqrt{\varepsilon})$  und  $x = -1/\sqrt{\varepsilon}$  liegt außerhalb des Bifurkationsbereiches. Das Ende des Bifurkationsbaumes ist durch den Schnittpunkt der Begrenzenden

mit  $x_+$  gegeben und liegt bei

$$K_f = \ln \left( \frac{1}{4} (1 + \sqrt{1 - 8\varepsilon}) \right). \quad (2.62)$$

Man erhält ihn leicht durch Ausnutzung der Fixpunkteigenschaft von  $x_+$ , der Abbildungseigenschaft des Operators  $f^{-1}$  und der analytischen Form der begrenzenden Kurven, die weiter unten durch Gleichung (2.66) angegeben wird.

2.  $\frac{1}{9} \leq \varepsilon < \frac{1}{4}$ : der gemeinsame Endpunkt der Fixpunkte liegt innerhalb des Bifurkationsbereiches. Somit wird im gesamten Bereich, in dem der instabile Fixpunkt  $x_+$  existiert, ein Bifurkationsszenario verhindert. Sein Ende liegt somit bei

$$K_f = \ln(1 - 2\sqrt{\varepsilon}). \quad (2.63)$$

Das kritische  $\varepsilon = \frac{1}{9}$  ist gerade der Wert, bei dem das Abbruchkriterium wechselt, an dem also der Endpunkt von  $x_+$  in den Bifurkationsbereich tritt. In der Zeichnung ist auch der funktionelle Verlauf des  $K_f$ -Wertes in Abhängigkeit von  $\varepsilon$  gezeigt, bei dem dieses Abschneiden auftritt. Schwach zu erkennen ist die Unstetigkeit in der ersten Ableitung bei  $\varepsilon = \frac{1}{9}$ .

Für  $\varepsilon \geq \frac{1}{4}$  existiert der Fixpunkt  $x_+$  im gesamten Temperaturintervall nicht, und das Chaos breitet sich somit bis  $\frac{J}{k_B T} = K = -\infty$  aus. Ab  $\varepsilon = \frac{1}{4}$  wird aber das Chaosszenario auch weiterhin gestreckt, so daß schließlich bei  $\varepsilon_c = 0.5680$  nur noch der Fixpunkt  $x = 1$  und der stabile Zweierzyklus bis  $T = 0$  übrig bleibt. Dies wird im Abschnitt 5.4 gezeigt.

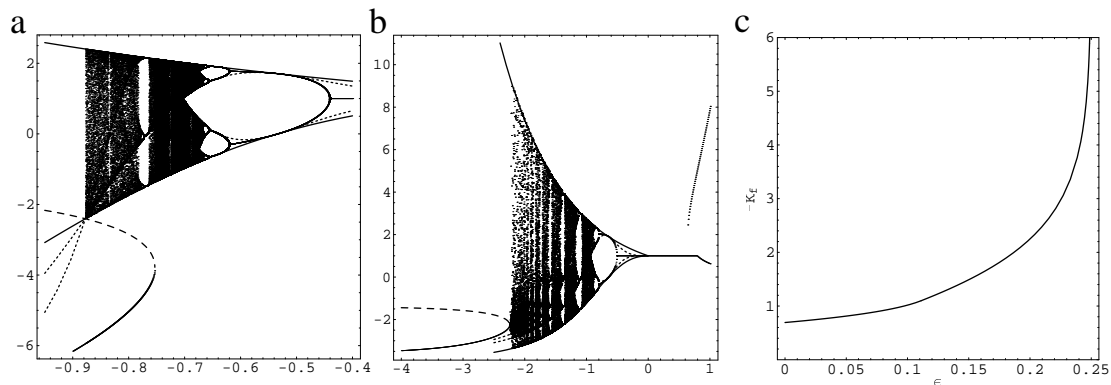


Abbildung 2.9: In Teil a) ist das Bifurkationsdiagramm bei  $\varepsilon = 0.07 < 1/9$  und die Begrenzungskurven nach Gleichung (2.65) und (2.66) aufgetragen. In Abbildung b) ist dies für  $\varepsilon = 0.2 > 1/9$  gezeigt. Abbildung c) zeigt zusammenfassend den Wert  $K_f$ , bei dem der instabile Fixpunkt  $x_+$  den Diagramm abschneidet.

### Die Begrenzungskurven des Chaos

Um die nach Abbildung 2.9 offensichtlich sehr gute Näherung für die Begrenzungskurven des Bifurkationsbaumes zu erhalten, betrachten wir die superstabilen Zyklen. Ein superstabiler Zyklus der Länge  $\tau$  entsteht bei  $K = K^*$ , wenn die Bedingung

$$\left. \frac{d}{dx_0} f^{2^n}(x^*) \right|_{K=K^*} = \prod_{i=1}^{\tau} \left. f'(x_i) \right|_{K=K^*} = 0 \quad (2.64)$$

erfüllt ist. Da nach Gleichung (2.49) einzig bei  $x = 0$  die Ableitung verschwindet, enthält jeder superstabile Zyklus somit das Zykloselement  $x = 0$ . Das Bild dieses superstabilen Elementes wird auf

$$f_{max}(K) \stackrel{Def}{=} f(0) = e^{-K} \quad (2.65)$$

abgebildet, das das Maximum des Zyklus bildet. Eine weitere Abbildung dieses Elementes ergibt das Minimum des Zyklus, das also durch

$$f_{min}(K) \stackrel{Def}{=} f^2(0) = f(e^{-K}) = \frac{(e^K + \varepsilon - 1) e^{-(z-1)K} + 1}{e^K + e^{-(z-1)K} \varepsilon} \quad (2.66)$$

gegeben ist.

Diese Betrachtung stimmt exakt nur für superstabile Zyklen, also für die  $K$ -Werte, an denen der Baum den Wert  $x = 0$  enthält. Die Folge dieser Temperaturen  $K_n$ , an denen der Zyklus der Länge  $n$  superstabil wird, besetzt aber die  $K$ -Achse immer dichter bis zu seinem Grenzwert  $K_\infty$ . Zudem ergeben die  $K$ -Punkte der Fenster, in denen Zyklen und inverse Zyklen superstabil werden, eine dichte Menge, bei der diese Betrachtung exakt ist. Die sehr gute Übereinstimmung dieser Näherung mit den numerischen Ergebnissen, wie sie in Abbildung 2.9 zu sehen ist, war somit zu erwarten.

Abbildung 2.10 zeigt zusammenfassend den Vergleich der numerisch gewonnenen Ergebnisse mit den analytischen.

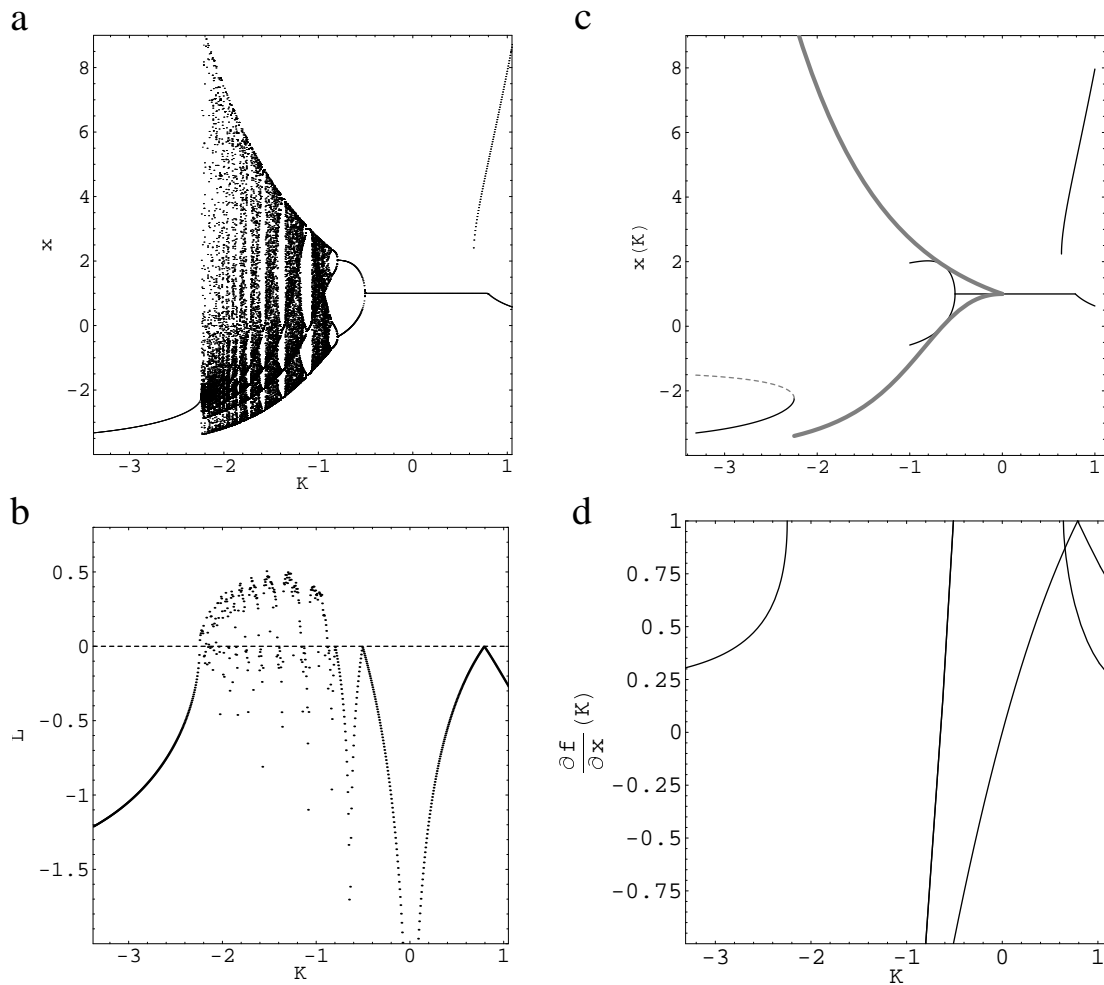


Abbildung 2.10: Abbildung a) zeigt das Fixpunktdiagramm, das man bei  $z = 3$  und  $\varepsilon = 0.2$  erhält, b) den Liapunov-Exponenten und c), d) die analytischen Ergebnisse. Eingezeichnet sind links der Fixpunkt  $x_+$  (gestrichelt) und  $x_-$  der Einfach-Iterierten im antiferromagnetischen Bereich, dick eingezeichnet sind die begrenzenden Einhüllenden. Weiter sind die Fixpunkte  $x_1$  und  $x_2$  der Zweifach-Iterierten, der Fixpunkt  $x = 1$  und  $x_+$  und  $x_-$  im ferromagnetischen Bereich zu sehen. Abbildung d) zeigt die analytisch gewonnenen Stabilitäten.

# Kapitel 3

## Spieltheoretische Interpretationsmöglichkeiten

In diesem Kapitel wird auf den Anwendungsnutzen des hier behandelten  $q-\bar{q}$ -Modells eingegangen, bevor die Thermodynamik und das sich zeigende Chaos untersucht wird. Hierzu muß man sich von dem ursprünglichen, physikalisch motivierten  $q-\bar{q}$ -Modell lösen und zum reskalierten Modell übergehen. Die hier gezeigten zwei Beispiele sollen auf die praktische Relevanz hinweisen, ohne den Anspruch zu erheben, ein vollständiges Modell zu bilden.

Grundlegend für die spieltheoretische Interpretation ist hierbei die antiferromagnetische Wechselwirkung, bei der die im Folgenden gezeigten Chaosphänomene in Erscheinung treten. Zur Motivation dieser im wirtschaftlichen Konkurrenzmodell wird zunächst ein Fall betrachtet, bei dem auf dieses Konkurrenzvermeidungsprinzip verzichtet wird. Es zeigt sich, daß dadurch die Situation eines “kontinuierlichen Gefangenendilemmas” entstehen kann, bei der der Gesamtnutzen deutlich unter dem optimalen Wert bleibt.

Man denke sich an einem Sommertag einen Strandbesucher, der sich durch ein Eis erfrischen möchte. Hinderlich sind hierbei die aus der Praxis wohlbekannt langen Wege zu einem naheliegenden Kiosk.

Das beschriebene Phänomen der langen Wege läßt sich vereinfacht spieltheoretisch darstellen:

Dazu gehen wir zunächst von einem einzigen Franchise-Händler der Marke EIS-FREUDEN aus. Bei einer Gesamtlänge  $S$  des Strandes konstanter Breite und bei einer als gleichmäßig angenommenen Verteilung aller Erholungsbedürftiger an einem gut besuchten Sommertag erhält man eine konstante Dichte  $\rho$  der Menschen pro Längeneinheit des Strandes. Bei großer Hitze sinkt die Bereitschaft  $P$  der potentiellen Kunden, für ein Eis eine Strecke  $s$  zurückzulegen, mit ihrer Länge  $|s|$ . Es wird bei dieser Rechnung  $P \approx \frac{S-|s|}{S}$  angenommen. Somit kann sich unser

Händler leicht überlegen, daß es am günstigsten ist, sich zentral zu positionieren. (Die generelle und lageunabhängige Bereitschaft der Strandbesucher, ein Eis zu kaufen ( $P_g \leq 1$ ) kann als konstanter Faktor angesehen werden, der die Aussagen nicht beeinflußt und somit hier nicht berücksichtigt wird.) Er erhält bei einem durchschnittlichen Ertrag  $g_E$  pro Kunden beim Eisverkauf den Gesamterlös  $E_M$  des Monopolisten von

$$E_M \approx 2 \cdot \int_0^{S/2} g_E P \varrho ds = (2 g_E \varrho S) \frac{3}{8}. \quad (3.1)$$

Bei Eintritt eines Konkurrenten desselben Franchise-Unternehmens EISFREUDEN in den ergiebigen Markt zu einem Duopol ändert sich die Ertragslage. Wir sehen hier von möglichen Absprachen (siehe hierzu (Holler et al., 1996) und (Fudenberg et al., 1991)) ab und konzentrieren uns auf andere, gesetzestreuere Möglichkeiten, den Konkurrenzdruck zu mildern.

Zuvor aber noch eine interessante Überlegung zur Standortverteilung der beiden Händler: Eine zunächst naheliegende Möglichkeit, der Konkurrenz zu begegnen, ist eine optimale Verteilung über die Länge des Strandes unter Minimierung der Wege der Kunden (und somit Maximierung der Umsätze). Daß dies aber keine stabile Strategie im Sinne von (Neumann et al., 1961) oder (Fudenberg et al., 1991) ist, zeigt schon eine einfache Betrachtung:

Zur Minimierung der Wege der Kunden sollten sich die Händler bei  $x_1 = \frac{1}{4}S$  für Händler 1 und bei  $x_2 = \frac{3}{4}S$  für Händler 2 positionieren. Dies setzt die Annahme voraus, daß jeder Kunde bei identischer Angebots- und Preispalette der Franchise-Unternehmer denjenigen auswählt, zu dem er den kürzeren Weg zurücklegen muß. Diese Annahme bedingt eine Parkettierung des Strandes in disjunkte Einzugsbereiche der Händler. Der Erlös des Einzelnen bei diesem Duopol ist gegeben durch

$$E_D^{(1,2)} \approx 2 \cdot \int_0^{S/4} g_E P \varrho ds = (2 g_E \varrho S) \frac{7}{32}. \quad (3.2)$$

Bei dieser räumlichen Verteilung der Standorte werden sich aber beide Verkäufer folgende Strategie zur Maximierung des persönlichen Ertrages überlegen:

*Bei einem Standort des konkurrierenden Verkäufers bei  $x \neq \frac{S}{2}$  ist es unter der getätigten Annahme günstig im Sinne der Gewinnmaximierung, den Standort geringfügig entfernt vom anderen Stand in Richtung des längeren Strandabschnitts zu wählen, um so einen größeren Kundenkreis zu gewinnen.*

Als einziger Fixpunkt der Iterationsgleichung zur Maximierung der einzelnen Erträge ergibt sich ( $x_1^* = \frac{S}{2}, x_2^* = \frac{S}{2}$ ). Es stellt sich also eine Gleichgewichtslösung ein, in der sich beide zum Nachteil aller (auch dem der potentiellen Kunden) in der Mitte des Strandes treffen ("kontinuierliches" Gefangenendilemma). Dabei



werden sie sich den Erlös des Monopolisten teilen,  $E_{1,2}^* = (2 g_E \varrho S) \frac{6}{32}$ , und so weniger verdienen, als bei optimaler räumlicher Verteilung.

Eine oft genutzte Möglichkeit, dieses Umsatzdefizit zu vermeiden, ist es, unterschiedliche Produktpaletten anzubieten und so verschiedene Strategien zu verfolgen. So kann einer der Händler beispielsweise sein Angebot auf Sonnenmilch, Süßigkeiten und Pommes Frites umstellen. Der über diese Produktpalette gemittelte Erlös  $g_S$  pro Kunde dürfte bei einem nun entstehenden „Geschäftszentrum“ in der Mitte des Strandes sogar deutlich unter  $g_E$  liegen, um eine Umstellung des Angebots (unter Vernachlässigung aller Fixkosten) zu empfehlen:

$$g_S \geq \frac{1}{2} g_E. \quad (3.3)$$

### 3.1 Evolutionstheoretischer Diversifikationsprozeß

Nach dieser Motivation der postulierten antiferromagnetischen Wechselwirkung kommen wir zur spieltheoretischen Interpretation des  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells auf dem Bethe-Gitter. Hier werden wir zunächst ein Modell betrachten, das den grundlegenden Prozeß der evolutionären Diversifikation betrachtet. Notwendig für die gesamte Evolution ist der Konkurrenzkampf um knappe Ressourcen. Diese Knappheit gilt es durch geschickte Überlebensstrategien zu umgehen. Hierbei ist die unmittelbare Umgebung für jedes Individuum entscheidend, da zunächst nur mit ihr ein direkter Konkurrenzkampf besteht. Es ist somit natürlich davon auszugehen, daß der Einfluß der Nachbarschaft darin besteht, sich durch sein Verhalten zu differenzieren. Dies wird am Beispiel der *Euglena virides* deutlich, dem Einzeller, der nach heutigem Stand der Evolutionsforschung am Scheidepunkt zwischen Pflanze und Tier anzusiedeln ist. Durch ihre zwei grundlegend verschiedenen Möglichkeiten, Energie aus der Umgebung aufzunehmen, ist sie in der Lage, auf ihre Umgebung optimal zu reagieren und die weniger beanspruchte Resource zu wählen: Sie hat die Möglichkeit, durch Photosynthese, aber auch durch Aufnahme bereits synthetisierter Makromoleküle ihren Bedarf zu decken. Dominiert in ihrer Nachbarschaft die Nahrungsaufnahme, schaltet der Einzeller auf die Energiegewinnung aus Licht um. Wird dieses hingegeben beispielweise durch Konkurrenten stark geschwächt, können alternativ synthetisierte Makromoleküle aufgenommen werden.

Weitere Beispiele für dieses Verhalten sind die Amphibien oder der Sonnentau. Ihn allen ist gemeinsam, daß sie durch Vermeiden der Konkurrenz und das Erschließen anderer Überlebensstrategien als ihre direkte Nachbarschaft am Scheideweg zwischen Gattungen anzusiedeln sind. Neben der Erklärung des Antiferromagnetismus durch Differenzierung, gibt folgende Liste von Analogien zum  $q$ - $\bar{q}$ -

Modell die Möglichkeit, ein biologisches “Konkurrenzmodell” darzustellen.

site $i$	$\longleftrightarrow$	Individuum
Spinstellung $\sigma$	$\longleftrightarrow$	Verhaltensstrategie
$\sigma \in \underline{Q}$	$\longleftrightarrow$	durch Selektion begünstigte Strategie
$\sigma \in \overline{Q}$	$\longleftrightarrow$	durch Selektion benachteiligte Strategie
Koordinationszahl $z$	$\longleftrightarrow$	Anzahl Konkurrenten
Temperatur $ K $	$\longleftrightarrow$	Unschärfe der Nutzenfunktion
Ordnungsparameter $x$	$\longleftrightarrow$	gemischte Strategie

Bei dieser Interpretation folgt zum Beispiel, daß bei fehlendem Evolutionsdruck ( $\varepsilon = 0$ ), was Züge von paradisischen Verhältnissen hat, durch die Fülle an Angeboten zum Überleben bei zunehmender Unschärfe der Nutzenfunktion schließlich chaotische Verhältnisse folgen. Aber auch das Fixpunktszenario bei einem größerem  $\varepsilon$  läßt sich anschaulich interpretieren: Bei der Zunahme des Anteils der nicht erfolgreichen Strategien (großes  $\varepsilon$ ) wird der Bereich der Irritation und somit des chaotischen Verhaltens ausgedehnt.

## 3.2 Wirtschaftswissenschaftliches Konkurrenzmodell

Es sei hier eine weitere Interpretationsmöglichkeit des Modells angedacht. Sie bezieht sich auf das wirtschaftliche Auffinden von unbesetzten Marktnischen, wie es zu Anfang schon als bessere Alternative zum sich ansonsten ergebenden Gefangenendilemma dargestellt wurde. Durch (“antiferromagnetische”) Wahl anderer Wirtschaftsstrategien als die räumlich unmittelbare Konkurrenz lassen sich wie gezeigt höhere Umsätze (die bei dem besprochenen Franchise-Unternehmen mit Gewinnen gleichzusetzen waren) als beim Imitieren erzielen. Es ergibt sich also sehr schnell, daß sich Kreativität auszahlt.

Ein site  $i$  entspricht hier einem Unternehmen, das  $z$  unmittelbare Konkurrenten hat. Seine Marktstrategie  $\sigma$  kann im Rahmen der bestehenden Wirtschaftsordnung erfolgsversprechend ( $\sigma \in \underline{Q}$ ) oder veraltet ( $\sigma \in \overline{Q}$ ) sein. Bei fehlender ordnender Hand, beispielsweise des Staates ( $\varepsilon = 0$ ) ergibt sich schon bei kleinen Unsicherheiten bei der Auszahlung (kleines  $K$ ) ein chaotischer Zustand des Wirtschaftssystems, während bei deutlicher Bevorzugung einiger Marktstrategien durch den Staat (großes  $\varepsilon$ ) sogar jedes Chaos vermieden werden kann, selbst bei großer Unsicherheit bezüglich der Gewinnfunktion.

# Kapitel 4

## Thermodynamische Eigenschaften des Modells

In diesem Kapitel werden die thermodynamischen Größen des Modells anhand zweier Beispiele, der Korrelationsfunktion und der Freien Energie, genauer betrachtet.

### 4.1 Korrelationsfunktion im Fall $\tau \leq 2$

Um das Verhalten thermodynamischer Systeme an ihrem kritischen Punkt zu betrachten, wird die Korrelationsfunktion  $\Gamma(i, j)$  zwischen Spins  $\sigma_i$  am Ort  $i$  und Spin  $\sigma_j$  an Ort  $j$  betrachtet. Bis auf eine noch zu bestimmende Normierung entspricht ihr die sogenannte reduzierte Zweipunktfunktion  $w_2^c(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r)$ . Bei der angenommenen räumlichen Homogenität hängt sie nur vom Abstand  $r$  der Orte ab, so daß wir erhalten

$$w_2^c(\sigma_i, x_i, \sigma_j, x_j) = \langle \Delta_{\sigma_i} \Delta_{\sigma_j} \rangle - \langle \Delta_{\sigma_i} \rangle \langle \Delta_{\sigma_j} \rangle. \quad (4.1)$$

Der erste Term in der Definition (4.1) wird als Zweipunktfunktion bezeichnet, jeder Faktor des zweiten Summanden als Einpunktfunktion.

Die Einpunktfunktion  $w_1(\sigma_i, x) \stackrel{Def}{=} \langle \Delta_{\sigma_i} \rangle$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen beliebigen Spin am Ort  $i$  mit Ausrichtung  $\sigma_i$  und dem definiertem Verhältnis  $x$  anzutreffen. Mit der Definition (2.17) der Zustandssumme und Gleichung (2.23) erhält man leicht ihre explizite Form

$$w_1(\sigma_i, x_i) = \frac{e^L \Delta_{\sigma_i} + x_i^z (1 - \Delta_{\sigma_i})}{\bar{q} e^L + (q - \bar{q}) x_i^z}. \quad (4.2)$$

Zur Berechnung der Zweipunktfunktion  $w_2(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) \stackrel{Def}{=} \langle \Delta_{\sigma_i} \Delta_{\sigma_j} \rangle$ , die die Wahrscheinlichkeit angibt, den Spin  $\sigma_0$  bei 0 und den Spin  $\sigma_r$  bei  $r$  zu finden,

wird ein wenig mehr Aufwand nötig. Mit den eingeführten Definitionen erhält man graphisch die Zweipunktfunktion

$$w_2(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) = \frac{1}{c_2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{r-1}} \begin{array}{c} \boxed{x_0} \quad \boxed{x_1} \quad \dots \quad \boxed{x_{r-1}} \quad \boxed{x_r} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \quad \dots \quad \bullet \quad \bullet \\ \sigma_0 \quad \sigma_1 \quad \dots \quad \sigma_{r-1} \quad \sigma_r \end{array} \quad (4.3)$$

wobei die Entsprechungen gelten

$$e^L \Delta_\sigma + x^{z-2} (1 - \Delta_\sigma) \quad \longleftrightarrow \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \boxed{x} \end{array} \quad (4.4)$$

für  $z-2$  weitere Bäume und

$$e^L \Delta_\sigma + x (1 - \Delta_\sigma) \quad \longleftrightarrow \quad \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \textcircled{x} \end{array} \quad (4.5)$$

für einen Baum. Die Normierungskonstante  $c_2$  erhält man aus der Bedingung

$$\sum_{\sigma_0, \sigma_r=1}^q w_2(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) = 1. \quad (4.6)$$

Zur weiteren Berechnung wenden wir die Transfer-Matrix-Methode an, die Onsager 1944 zur Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells eingeführt hat. Hierzu definieren wir die Transfermatrix  $\tau_{\sigma, \sigma'}(x)$ , wobei in der graphischen Repräsentation der unausgefüllte Kreis das Fehlen des Zeeman-Terms des entsprechenden Spins andeuten soll:

$$\tau_{\sigma, \sigma'}(x) \stackrel{Def}{=} \frac{1}{\lambda} (e^{K\delta_{\sigma, \sigma'}} (\Delta_{\sigma'} + x^{z-2} e^{-L} (1 - \Delta_{\sigma'}))) \quad \longleftrightarrow \quad \begin{array}{c} \boxed{x} \\ | \\ \textcircled{\sigma} \text{---} \bullet \\ \sigma \quad \sigma' \end{array} \quad (4.7)$$

mit

$$\lambda = e^K + \bar{q} - 1 + (q - \bar{q})e^{-L}x^{z-1}. \quad (4.8)$$

Mit Hilfe dieser Transfermatrix läßt sich die Zweipunktfunktion in eine geschlossene mathematische Form bringen

$$w_2(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) = \frac{1}{c_2} e^{L(r+1)} (\Delta_{\sigma_0} + x_0^{z-1} e^{-L} (1 - \Delta_{\sigma_0})) \times \\ \times \left( \prod_{\nu=1}^r \tau(x_\nu) \right)_{\sigma_0 \sigma_r} (\Delta_{\sigma_r} + x_r (1 - \Delta_{\sigma_r})). \quad (4.9)$$

Nach einer kurzen Rechnung mit Hilfe der Spektraldarstellung der Transfermatrix läßt sich die Darstellung der reduzierten Zweipunktfunktion entscheidend verkürzen. Dies ist aber aufgrund der Propagatoreneigenschaft der Transfermatrix, die ihre Eigenvektoren  $\Psi_1^{(1)}(x_n)$  und  $\Psi_2^{(1)}(x_n)$  einerseits zu  $\Psi_1^{(1)}(x_{n+1})$ , andererseits aber zu  $\Psi_2^{(1)}(x_{n-1})$  entwickelt, nur im Spezialfall eines Fixpunktes bzw.

eines Fixzyklus der Länge zwei möglich. Wir wechseln dazu die alternierenden topologischen Bezeichnungen zu denen eines  $A$ - $B$ -Gitters, nämlich zu Plus- ( $x_+$ ) und zu Minusschalen ( $x_-$ ). Für zwei Punkte am Ort 0 und  $r$  mit  $r = 2\rho + \mu$  mit  $\mu \in \{0, 1\}$ , wobei o.B.d.A.  $x_0$  ein Pluspunkt sein soll, ergibt sich die reduzierte Zweipunktfunktion nach kurzer Rechnung zu

$$\begin{aligned}
w_2^c(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) &= (1 - m(x_+)) \frac{x_r}{qx_+} \left[ \right. \\
&\quad (\lambda_2(x_+) \lambda_2(x_-))^\rho (\lambda_2(x_-))^\mu \left( \frac{\bar{q} + m(x_r)(q - \bar{q})}{q\bar{q}^2(q - \bar{q})} \right) (q\Delta_{\sigma_+} - \bar{q}) (q\Delta_{\sigma_+} - \bar{q}) + \\
&\quad \left. + (\lambda_3(x_+) \lambda_3(x_-))^\rho (\lambda_3(x_-))^\mu \left( \delta_{\sigma_+ \sigma_r} - \frac{1}{q - \bar{q}} \right) (1 - \Delta_{\sigma_+}) (1 - \Delta_{\sigma_r}) \right] + \\
&\quad + (\lambda_4(x_+) \lambda_4(x_-))^\rho (\lambda_4(x_-))^\mu \Delta_{\sigma_+} \Delta_{\sigma_r} \left( \delta_{\sigma_+ \sigma_r} - \frac{1}{q} \right) \frac{\bar{q} + m(x_+)(q - \bar{q})}{q\bar{q}}, \quad (4.10)
\end{aligned}$$

wobei die Eigenwerte  $\lambda_1$  bis  $\lambda_4$  gegeben sind durch

$$\lambda_1 = 1 \quad (4.11)$$

$$\lambda_2(x) = \frac{1}{\lambda} x^{z-2} e^{-L} (e^K - 1 + (q - \bar{q})(1 - x)) \quad (4.12)$$

$$\lambda_3(x) = \frac{1}{\lambda} (e^K - 1) x^{z-2} e^{-L} \quad (4.13)$$

$$\lambda_4(x) = \frac{1}{\lambda} (e^K - 1). \quad (4.14)$$

Man erhält die Korrelationsfunktion aus dieser Zweipunktfunktion auf eine analog anschauliche Weise wie den Ordnungsparameter aus der Magnetisierung

$$\begin{aligned}
\Gamma(r) &= \Gamma(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) \stackrel{Def}{=} \frac{q}{q - \bar{q}} (\langle \Delta_{\sigma_+} \Delta_{\sigma_r} \rangle - \langle \Delta_{\sigma_+} \rangle \langle \Delta_{\sigma_r} \rangle) \\
&= \frac{q}{q - \bar{q}} w_2^c(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) \quad (4.15)
\end{aligned}$$

und so die endgültige Form der Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned}
\Gamma(r) &= \left( \sum_{\sigma_+, \sigma_r=1}^q w_2^c(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) \Delta_{\sigma_+} \Delta_{\sigma_r} \right) \frac{q}{q - \bar{q}} \\
&= \left( \sum_{\sigma_+, \sigma_r=1}^{\bar{q}} w_2^c(\sigma_0, x_0, \sigma_r, x_r) \right) \frac{q}{q - \bar{q}} \\
&= (1 - m(x_+)) \frac{x_r}{x_+} \frac{\bar{q} + m(x_r)(q - \bar{q})}{q} (\lambda_2(x_+) \lambda_2(x_-))^\rho (\lambda_2(x_-))^\mu \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Formel (4.16) ist für Pluspunkte berechnet. Analoges erhält man für Minuspunkte durch den Austausch der Indizes.

Es sei noch angemerkt, daß die Korrelationsfunktion ebenso durch

$$\Gamma(r) = \frac{q}{q - \bar{q}} (\langle (1 - \Delta_{\sigma_+}) (1 - \Delta_{\sigma_r}) \rangle - \langle 1 - \Delta_{\sigma_+} \rangle \langle 1 - \Delta_{\sigma_r} \rangle) \quad (4.17)$$

oder

$$\Gamma(r) = \frac{q}{q - \bar{q}} (\langle (1 - \Delta_{\sigma_+}) \Delta_{\sigma_r} \rangle - \langle 1 - \Delta_{\sigma_+} \rangle \langle \Delta_{\sigma_r} \rangle) \quad (4.18)$$

oder

$$\Gamma(r) = \frac{q}{q - \bar{q}} (\langle \Delta_{\sigma_+} (1 - \Delta_{\sigma_r}) \rangle - \langle \Delta_{\sigma_+} \rangle \langle 1 - \Delta_{\sigma_r} \rangle) \quad (4.19)$$

definiert werden kann. Dies ändert aber qualitativ nichts an den Resultaten.

## 4.2 Freie Energie des Modells

In diesem Kapitel wird eine Methode (Gujrati, 1995) vorgestellt, die (bulk) Freie Energie  $f_b$  des  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell im Innern des Cayley-Tree bei einem Fixpunkt zu berechnen. Die Freie Energie wird beispielsweise bei Phasenübergängen benötigt, bei denen die Zustandsgleichung mehrere Lösungen zuläßt, oder zur Bestimmung des Gleichgewichtszustandes. Diese soll wie bei allen realistischen Modellen auf regulären Gittern insensitive bezüglich der Randbedingungen sein.

Bekanntlich zeigt die gesamte Freie Energie  $f$  auf dem Cayley-Tree ein Verhalten, das von dem auf regulären Gittern abweicht. Dies findet seine Ursache in dem auch im thermodynamischen Limes nicht verschwindenden Randanteil (Runnels, 1967), (Eggarter, 1974a), (Müller-Hartmann, 1974). Die lokale Magnetisierung im Innern ist aber, nachdem eine Transientenregion durchschritten wurde, unabhängig von den Randbedingungen und demnach auch die Freie Energie pro bond  $f_b$ . Wir definieren die Differenz  $f_O = f - f_b$  zwischen der gesamten Freien Energie  $f$  und  $f_b$ . Diese beinhaltet sämtliche Randeffekte und verschwindet für realistische Gitter im thermodynamischen Limes - ein Verhalten, das der Cayley-Tree als ganzes nicht zeigt.

Wie bereits in Kapitel 2.1 gezeigt, legt die topologische Struktur des Gitters eine rekursive Vorgehensweise bei der Berechnung der Zustandssumme nahe (Baxter, 1982), (Gujrati, 1993). Hierzu wird der Tree in  $n$  Schalen, auch Generationen genannt, zerlegt, die mit  $n - 1$  im Ursprung beginnend bis zu 0 am Rand durchnummeriert werden. Wie dort gezeigt, läßt sich so rekursiv die Partialzustandssumme  $T_n(\sigma, x_n)$  eines  $n$ -Schalen-Baumes aus den Partialzustandssummen  $T_{n-1}(\sigma', x_{n-1})$  gewinnen

$$T_n(\sigma, x_n) = \sum_{\sigma'} e^{K\delta_{\sigma, \sigma'} + L\Delta_{\sigma'}} (T_{n-1}(\sigma', x_{n-1}))^{z-1} \quad (4.20)$$

und mit ihr die vollständige Zustandssumme

$$Z_n(K, L) = \sum_{\sigma} e^{L\delta_{\sigma, \bar{\sigma}}} (T_n(\sigma, x_n))^z. \quad (4.21)$$

Offensichtlich ist sie abhängig von den Randbedingungen.

Zur Bestimmung von  $f_b$  muß man den Einfluß des Randes vermeiden. Eine vollständig richtige Methode dies auf dem Bethe-Gitter zu bewerkstelligen schlug Baxter (Baxter, 1982) für das Ising-Modell vor, bei der er Gebrauch vom Verhältnis  $\kappa$  (2.13) von bonds zu sites im Innern des Trees

$$\kappa = \frac{z}{2} \quad (4.22)$$

macht (Homogenitätshypothese) (Diese wurde von (Eggarter, 1974a) kritisch hinterfragt - für einen unendlich ausgedehnten Tree ist  $\kappa = 1$ .) Hierzu integriert er die Zustandsgleichung über das äußere Feld, von der er den Zustand bei unendlich großem Feld kennt. Nach einer geschickten Partialbruchzerlegung und dem Ausnutzen der Homogenitätshypothese erhält er die Freie Energie auf dem Bethe-Gitter. Diese Methode stellte sich aber zur Übertragung auf das allgemeinere  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell als zu schwierig heraus.

Eine alternative Vorgehensweise (Peruggi et al., 1983) führt über die Berechnung der Entropie und der Energie in Abhängigkeit von einem Ordnungsparameter.

Die hier benutzte Methode zur Berechnung von  $f_b$  (Gujrati, 1995) ist einfacher, da sie weder die Kenntnis eines Ordnungsparameters, noch eine Integration benötigt, hat aber den deutlichen Nachteil, daß sie mathematisch bisher nicht bewiesen werden konnte. In allen Fällen der Berechenbarkeit mit Hilfe anderer Methoden zeigte sich aber die Übereinstimmung mit den alten Resultaten.

Betrachten wir nun einen vollständigen Baum  $\mathcal{T}_n$ . Dieser entsteht durch 'Zusammenheften' von  $z$  Branches  $\mathcal{B}_n$  am Ursprung. Jeder dieser  $z$  Branches zerfällt für sich wieder in  $z - 1$  Branches  $\mathcal{B}_{n-1}$ . Die Differenz bei der Zahl der bonds, die diese  $z(z - 1)$  Branches  $\mathcal{B}_{n-1}$  und die  $z$  Branches  $\mathcal{B}_n$  bilden, ist gerade  $z$ , wie leicht aus Abbildung 4.1 ersichtlich ist. Aus ihr ergibt sich ebenfalls sehr anschaulich, das Verhältnis  $\kappa = z/2$ , da bei Wegfall von  $z$  bonds gerade 2 sites entfallen. Für die Zustandssumme  $Z_n$  des Trees  $\mathcal{T}_n$  erhalten wir mit den Definitionen (2.6) aus Kapitel 2.1

$$Z_n(K, L) = \sum_{\sigma} \exp \left[ K \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i} \right]$$

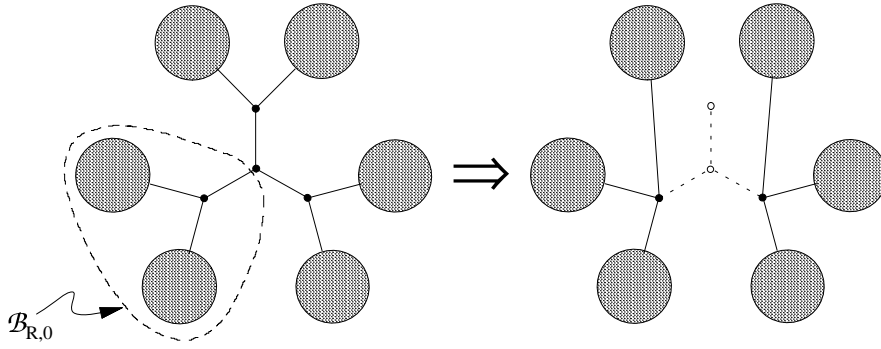


Abbildung 4.1: Herausschneiden der zentralen  $z = 3$  bonds aus dem Tree  $\mathcal{T}_n$  und Umgruppieren der verbleibenden  $z$  Branches  $\mathcal{B}_{n-1}$  zu Trees  $\mathcal{T}_{n-1}$  mit identischer Koordinationszahl  $z$ .

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma_0=1}^q e^{L\Delta_{\sigma_0}} (T_n(\sigma_0, x_n))^z \\
&= (T_n(\bar{\sigma}))^z (\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_n^z). \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Somit läßt sich der Anteil der Freien Energie pro bond nach Umgruppierung der Branches  $\mathcal{B}_{n-1}$  zu vollständigen Trees  $\mathcal{T}_{n-1}$  mit um 1 verringerter Schalenanzahl nach Abb.4.1 berechnen:

$$\begin{aligned}
f_b &= \frac{\ln Z_n(K, L)}{N_b} \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{z} (\ln Z_n(K, L) - (z - 1) \ln Z_{n-1}(K, L)) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \ln \left( \frac{Z_n(K, L)}{Z_{n-1}(K, L)^{z-1}} \right) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \ln \left[ \left( \frac{T_n(\bar{\sigma})}{T_{n-1}(\bar{\sigma})^{z-1}} \right)^z \frac{\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_n^z}{(\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_{n-1}^z)^{z-1}} \right]. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Mit

$$T_n(\sigma) = \sum_{\sigma'} e^{K\delta_{\sigma\sigma'} + L\delta_{\sigma'}} (T_{n-1}(\sigma'))^{z-1} \tag{4.25}$$

folgt weiter

$$T_n(\bar{\sigma}) = e^{K+L} (T_{n-1}(\bar{\sigma}))^{z-1} + (\bar{q} - 1)e^L (T_{n-1}(\bar{\sigma}))^{z-1} + (q - \bar{q}) (T_{n-1}(\sigma \neq \bar{\sigma}))^{z-1}, \tag{4.26}$$

also

$$\frac{T_n(\bar{\sigma})}{T_{n-1}(\bar{\sigma})^{z-1}} = e^{K+L} + (\bar{q} - 1)e^L + (q - \bar{q})x_{n-1}^{z-1}. \tag{4.27}$$

Somit folgt unter der Annahme eines Fixpunktes, i.e.  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$

$$\frac{\ln Z}{N_b} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \ln \left[ (e^{K+L} + (\bar{q} - 1)e^L + (q - \bar{q})x_{n-1}^{z-1})^z \frac{\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_n^z}{(\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x_{n-1}^z)^{z-1}} \right]$$



$$= \frac{1}{z} \ln \left[ \frac{(e^L(e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q})x^{z-1})^z}{(\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x^z)^{z-2}} \right]. \quad (4.28)$$

Wir erhalten also für die Freie Energie im bulk pro bond

$$f_b = \ln \left[ \frac{e^L(e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q})x^{z-1}}{(\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x^z)^{(z-2)/z}} \right]. \quad (4.29)$$

Durch Multiplikation mit  $\frac{z}{2}$  erhalten wir die freie Energie pro site

$$f_S = \ln \left[ \frac{(e^L(e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q})x^{z-1})^{z/2}}{(\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x^z)^{(z-2)/z}} \right]. \quad (4.30)$$

Zur Überprüfung dieser Rechnung ist in den Anhängen A und B die Freie Energie  $f(K, L)$  nach beiden Variablen  $K$  und  $L$  differenziert worden und mit den auf direkte Weise gewonnenen Ergebnissen verglichen worden. Die Übereinstimmung der Ergebnisse bestärkt somit die Hypothese von Gurjati.

# Kapitel 5

## Chaosphänomene

### 5.1 Die Entwicklung der Iterationsgleichung und die Analogie zur logistischen Abbildung im Perkulationslimes $\varepsilon \rightarrow 0$

Grundlegend für das Modell ist die reskalierte Rekursionsformel

$$x_{n+1} = f(x_n) = \frac{(e^K + \varepsilon - 1) x_n^{z-1} + 1}{e^K + \varepsilon x_n^{z-1}}. \quad (5.1)$$

Diese läßt sich durch eine Variablentransformation  $z_n = x_n - c$  in die Form bringen

$$\bar{x}_{n+1} = -\frac{4\bar{\lambda}\bar{x}_n(\bar{x}_n - 1)}{1 + 4\bar{\varepsilon} c^2 \bar{x}_n(\bar{x}_n - 1)} \quad (5.2)$$

mit

$$\nu = e^K + \varepsilon - 1 \quad (5.3)$$

$$c \text{ löst die kubische Gleichung } 1 + ce^K + c^2(\nu + \varepsilon c) = 0 \quad (5.4)$$

$$\bar{x}_n = \frac{x_n + c}{2c} \quad (5.5)$$

$$\bar{\lambda} = -\frac{c(\nu + \varepsilon c)}{2(e^K + \varepsilon c^2)} \quad (5.6)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{e^K + \varepsilon c^2}. \quad (5.7)$$

Dies wird in Anhang C gezeigt.

Für  $\varepsilon = 0$  ergibt sich hieraus die logistische Abbildung.

$$\bar{x}_{n+1} = -4\bar{\lambda}\bar{x}_n(\bar{x}_n - 1) \quad (5.8)$$

die den Übergang zum Chaos nach Feigenbaum mit Bifurkationskaskaden zeigt. Der Fall  $\varepsilon \rightarrow 0$  oder  $q \rightarrow \bar{q}$  entspricht hierbei dem Grenzfall, der den Zusammenhang zur Perkolation herstellt, wie es in Anhang F gezeigt wird. Eine genauere

Beschreibung der Perkolation im Limes  $q \rightarrow 1$  bei antiferromagnetischer Kopplung  $K < 0$  wird in (Wagner et al., 1999) gegeben.

Eine Taylorentwicklung der Rekursionsformel um  $x = 0$ , dem Maximum der Funktion, liefert

$$f(x) = e^{-K} + (1 - e^{-K})(1 + \varepsilon e^{-K}) \left[ x^2 - \varepsilon e^{-K} x^4 + (\varepsilon e^{-K})^2 x^6 - (\varepsilon e^{-K})^3 x^8 + \dots \right]. \quad (5.9)$$

Hieran ist abzulesen, daß die Funktion bei  $z = 3$  und  $x \rightarrow 0$  ein quadratisches Maximum hat.

Feigenbaum definierte seine kritischen Indizes  $\alpha$  und  $\delta$  durch das Verhältnis aufeinanderfolgender Gabelweiten an den superstabilen Punkten bzw. durch das Verhältnis aufeinander folgender Intervalle zwischen zwei Bifurkationen. Bifurkationen treten für alle Zweige des Baumes bei den gleichen Temperaturen auf, unabhängig von ihrem Abstand zur " $x = 0$ "-Achse. Dieser Achse nähert sich der Baum aber bei zunehmenden Bifurkationen. Nulldurchgänge passieren per definitionem in der Nähe der Null. Man erkennt aus dieser Betrachtung, daß die Größen der kritischen Indizes durch das Verhalten bei  $x = 0$  diktiert werden. Da dort aber die Funktion ein quadratisches Maximum zeigt, ist der Erhalt der universellen Exponenten

$$\alpha = 2.5029078750 \dots \quad (5.10)$$

und

$$\delta = 4.6692016091 \dots \quad (5.11)$$

zu erwarten. Ihre Messung erfolgt in Abschnitt 5.3.

## 5.2 Chaosphänomene bei Reskalierung

In diesem Abschnitt wird eine ausreichend dichte Aneinanderreihung von Simulationsergebnissen bei verschiedenen  $\varepsilon$ -Werten präsentiert, die sämtliche bisher besprochene Phänomene widerspiegelt und zudem die Veränderung mit wachsendem  $\varepsilon$  aufzeigt. Hierbei gehen wir von dem reskalierten Modell (2.45) ohne Berücksichtigung der physikalischen Grenze (2.43) aus. Eine Motivation für dieses Vorgehen kann die Schaffung eines eigenständigen Modells sein, für das dann die Frage der physikalischen Rechtfertigung zunächst offen bleibt, oder sie kann auf mathematisch komplexeren Wege erfolgen, der in Kapitel ?? nachgeholt wird.

### 5.2.1 Beschreibung des Algorithmus zur Gewinnung von Fixpunktdiagrammen und des Liapunov-Exponenten

Es werden hier die wesentlichen Grundideen zur Gewinnung der Fixpunktdiagramme und des zugehörigen Liapunov-Exponenten gezeigt.

Grundlegend ist die Tatsache, daß die auftretenden Fixpunktlinien von Zyklen stammen, daß also

$$f(x_\nu) = x_{\nu+1} \quad \text{für } \nu = 1, \dots, T \quad (5.12)$$

bei einem Zyklus der Länge  $T$ . Hierbei wird das letzte Element auf das erste abgebildet. Die Attraktionsgebiete können aber disjunkt sein, wie sich am Beispiel des antiferromagnetischen Fixpunktes  $x_-$  und des restlichen Bifurkationsbaumes zeigt.

Bei der Erstellung der Diagramme werden bei einem festen  $K$ -Wert, der somit die Iterationsgleichung festlegt, über ein sehr groß gewähltes Intervall äquidistante Startpunkte gewählt. Hierbei hat sich gezeigt, daß die genaue Größe dieses Intervalls wie die Tatsache, ob die Punkte mit gleichem Abstand oder zufällig ausgewählt werden, keinen Einfluß auf das Ergebnis hat. Jeder Startwert wurde zunächst einige Tausend mal iteriert, um die ausreichende Annäherung an den Fixpunkt zu garantieren und um schließlich die folgenden Iterationsschritte graphisch darzustellen.

Für den Liapunov-Exponenten, der die Stärke der exponentiellen Separation zweier eng benachbarter Punkte nach Abbildung 5.1 wiedergibt, gilt der formale Ausdruck (Schuster, 1994)

$$\begin{aligned} \lambda(x_0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N} \log \left| \frac{f^N(x_0 + \varepsilon) - f^N(x_0)}{\varepsilon} \right| \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left| \frac{d f^N(x_0)}{d x_0} \right|. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Er gibt somit den Logarithmus des Faktors an, um den die beiden Punkte  $x_0$  und  $x_0 + \varepsilon$  im Mittel pro Iterationsschritt auseinanderlaufen. Hierbei ist implizit von der Annahme Gebrauch gemacht worden, daß das Separieren exponentiell stattfindet. Wir werden in Kapitel 6 sehen, daß diese Annahme in aller Allgemeinheit für sämtliche Chaosphänomene zu stark ist.

Durch Verwendung der Kettenregel und der Eigenschaft der sukzessiven Abbildung der Zyklenelemente aufeinander erhält man schließlich den äquivalenten Ausdruck

$$\lambda(x_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \log |f'(x_i)|. \quad (5.14)$$

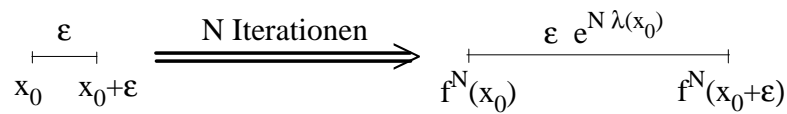


Abbildung 5.1: Zur Definition des Liapunov-Exponenten.

Diesen verwenden wir nach einigen Tausend Iterationsschritten, die die hinreichende Annäherung an den Zyklus garantieren soll, zur numerischen Berechnung dieser Größe. Die benötigte Ableitung ist uns in diesem einfachen Fall bekannt. Es sei hier darauf aufmerksam gemacht, daß die verschiedenen Einzugsbereiche des Fixpunktes  $x_-$  und des Baumes natürlich auch zu verschiedenen Liapunov-Exponenten führen. Bei der gleichzeitigen Existenz beider Attraktoren bei einer Temperatur sind somit auch beide in den Abbildungen dargestellt.

### 5.2.2 Simulationsergebnisse

Im Folgenden sind einige Simulationsergebnisse gezeigt, die die im Verlauf dieser Arbeit zu erklärenden Phänomene zeigen. Sie geben eine hinreichend lückenlose Variation des Bifurkationsdiagrammes mit wachsendem Systemparameter  $\varepsilon$  wieder.

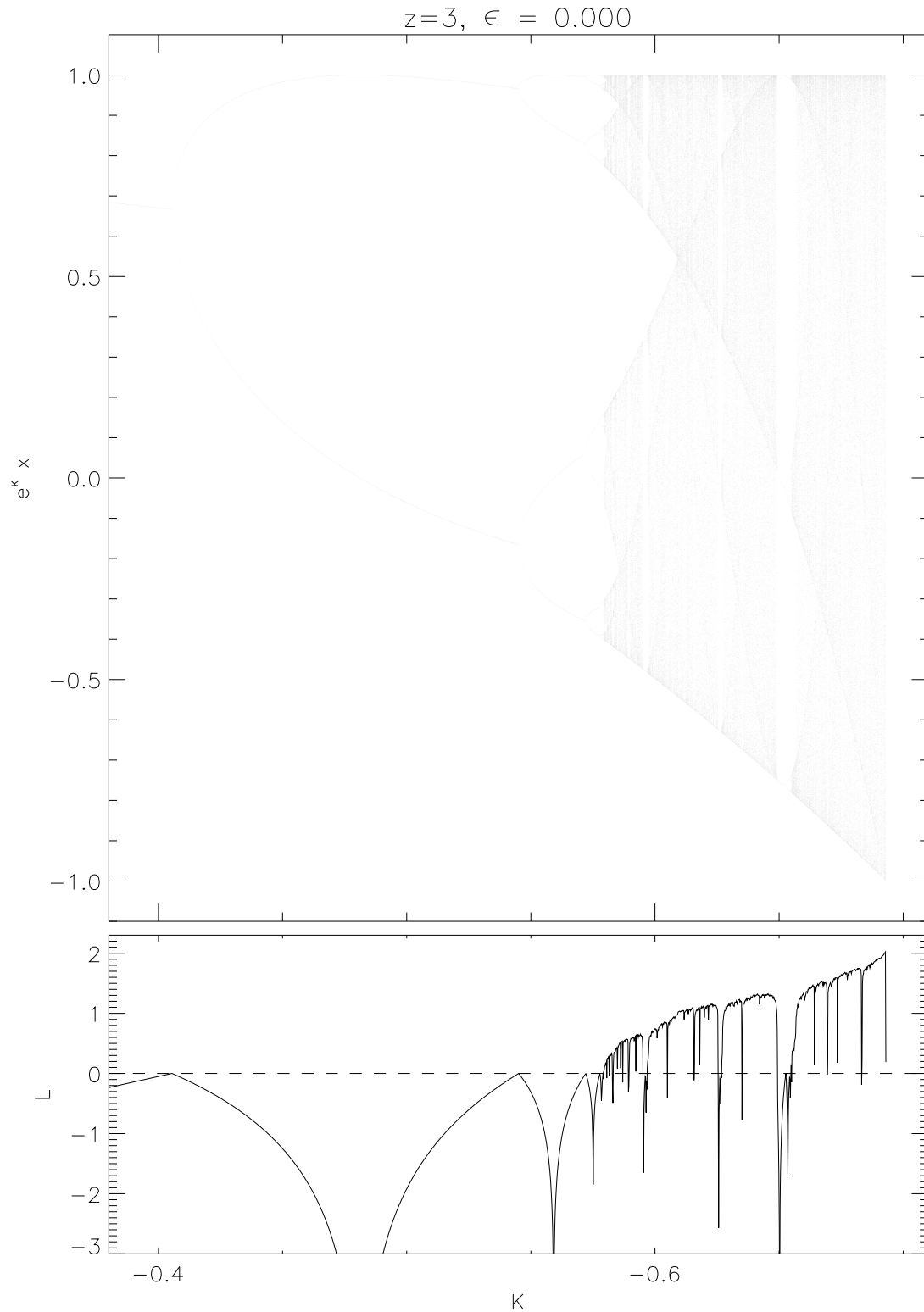


Abbildung 5.2: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.0$ . Dies entspricht nach Abschnitt 5.1 dem reskalierten Feigenbaum-Szenario. Der Endpunkt(2.61) der antiferromagnetischen Fixpunkte  $x_-$  (stabil) und  $x_+$  (instabil) liegt bei  $x = -1/\epsilon^{1/2}$  und wandert so mit  $\epsilon \rightarrow 0$  nach  $-\infty$ .

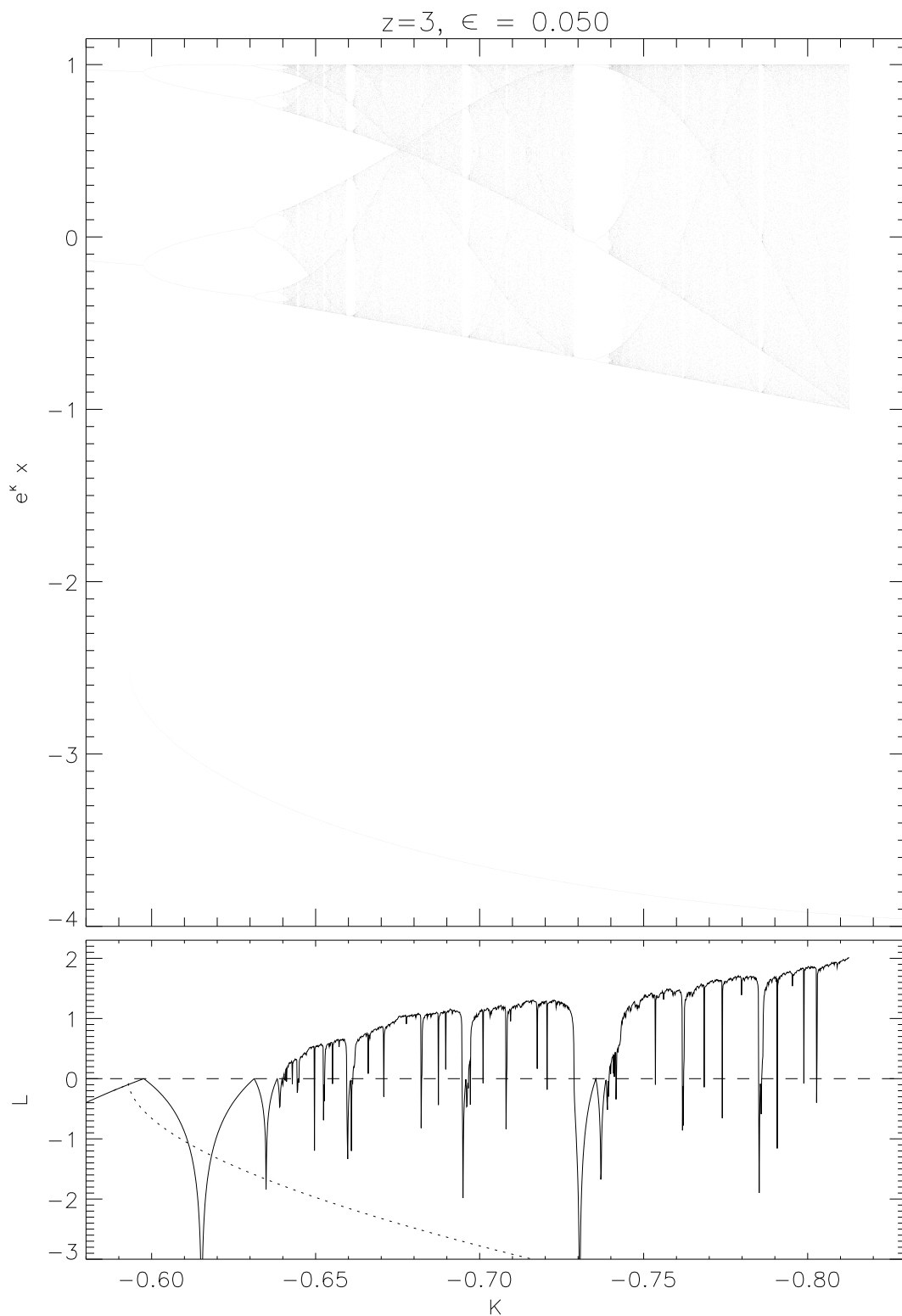


Abbildung 5.3: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.05$ . Neben den Bifurkationskaskaden und dem chaotischen Verhalten existiert der Fixpunkt  $x_-$ .

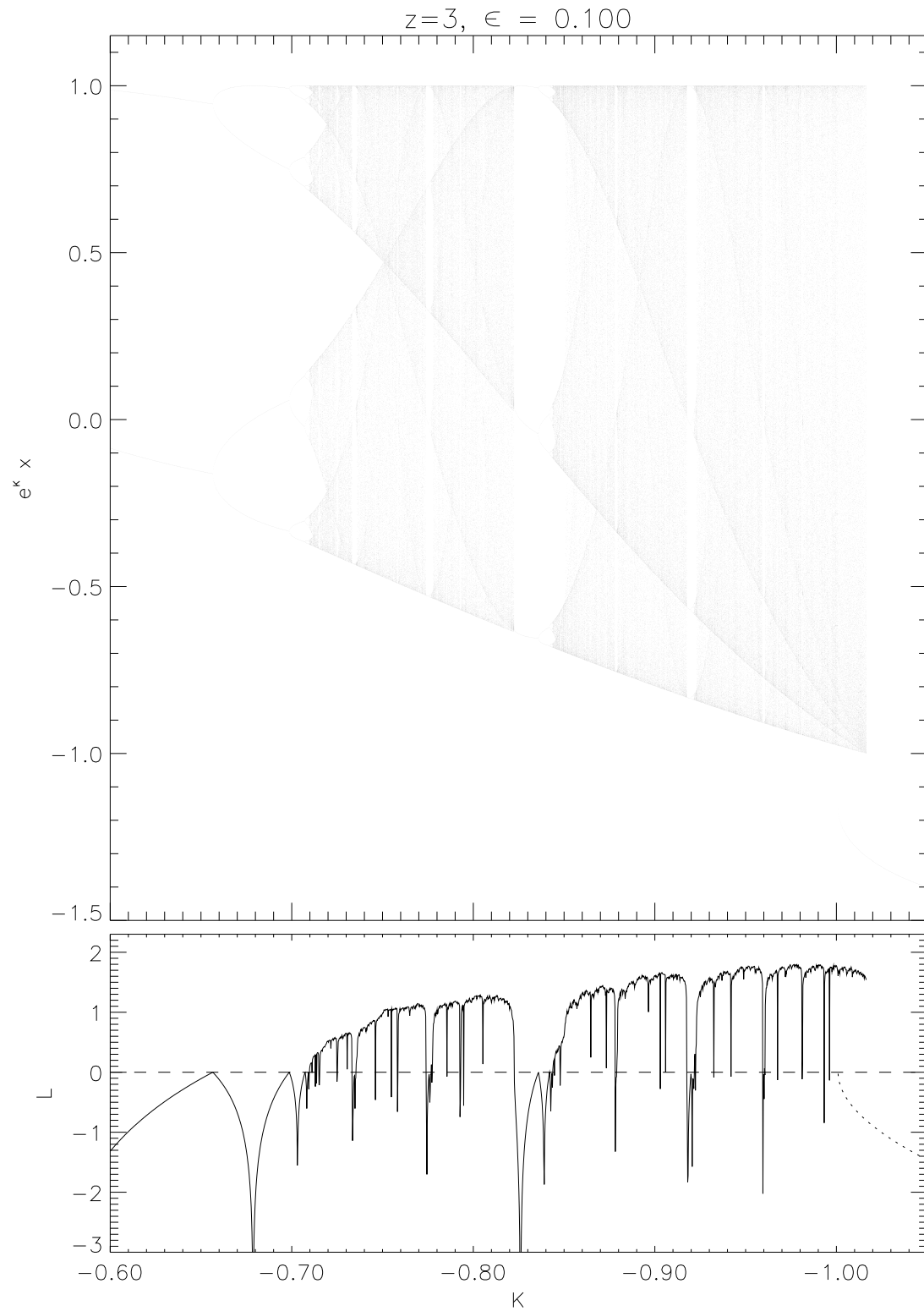


Abbildung 5.4: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.1$ . Der Startpunkt der Fixpunkte  $x_-$  und  $x_+$  ist kurz vor dem Eintritt in den chaotischen Bereich, wodurch sich das Abbruchkriterium von Gleichung (2.62) auf Gleichung (2.63) ändert.



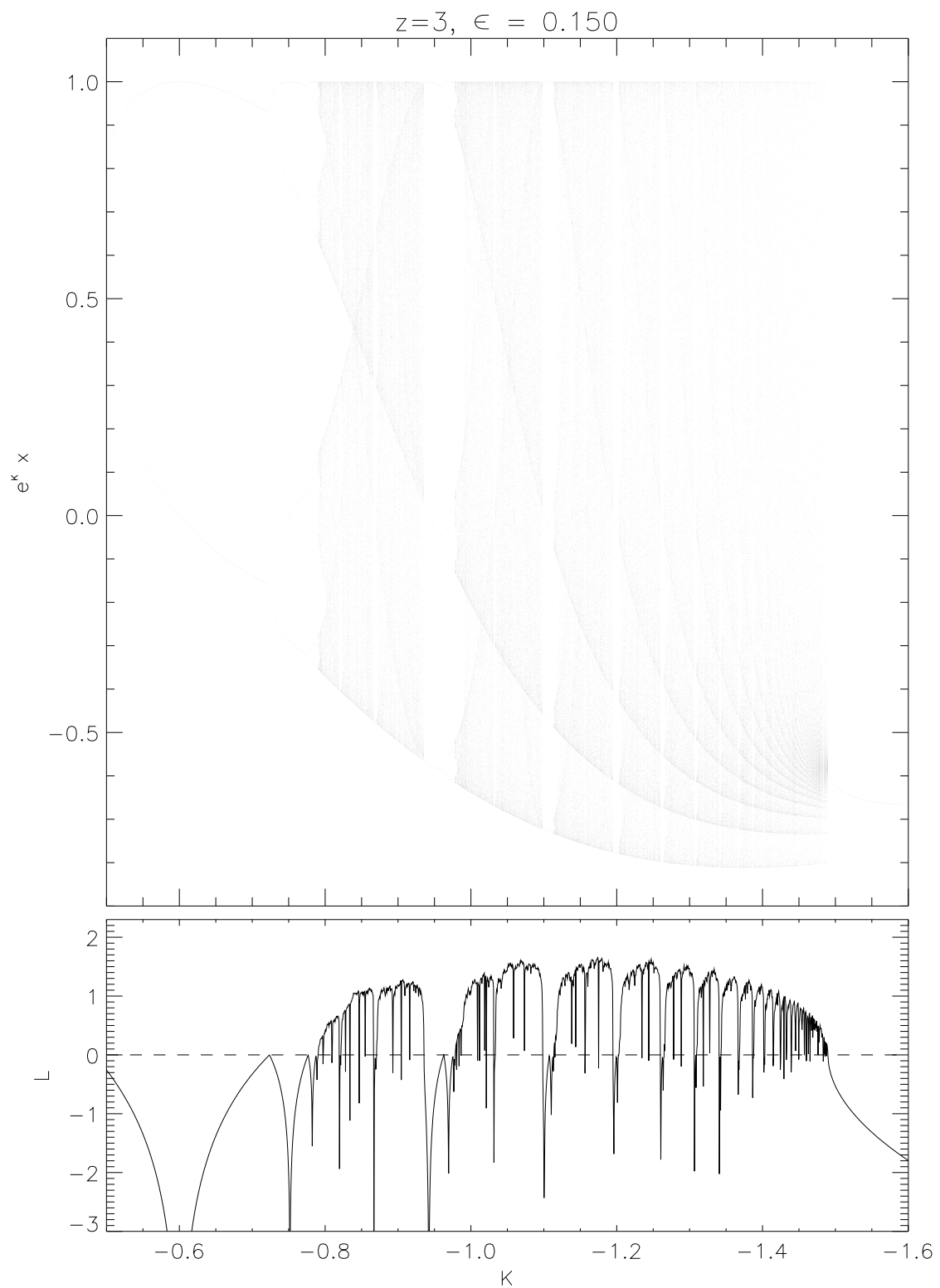


Abbildung 5.5: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.15$ . Man erkennt deutlich, wie sich mit wachsendem  $\epsilon$  zunehmend die beschriebenen makroskopischen Fenster auftun.

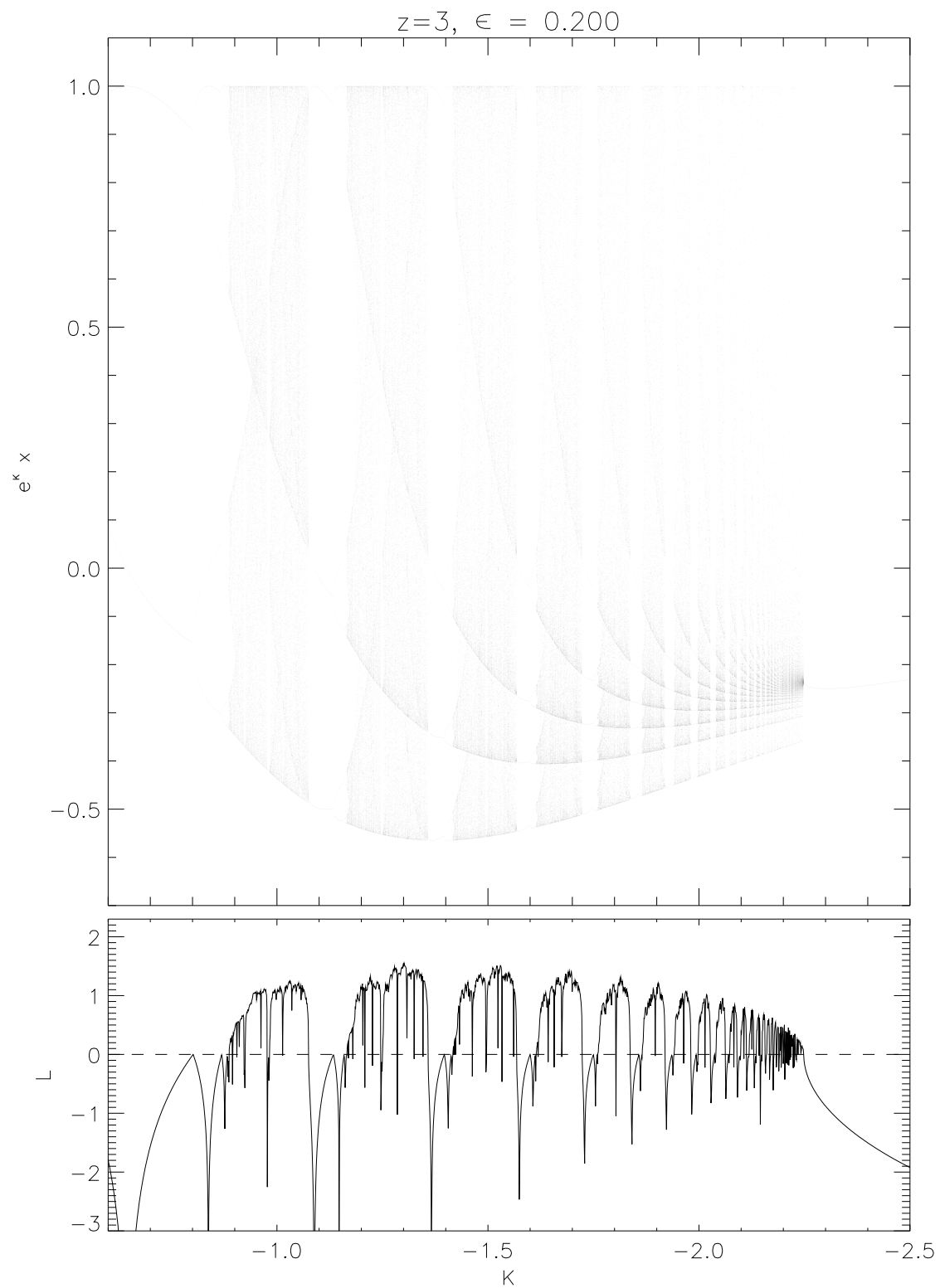


Abbildung 5.6: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.2$ . Der das Bifurkationsszenario begrenzende Fixpunkt  $x_+$  wandert mit  $\epsilon \rightarrow \frac{1}{4}$  nach  $-\infty$ . Im sich hierbei ausdehnenden Szenario werden immer gleichmäßiger die makroskopischen Fenster sichtbar.

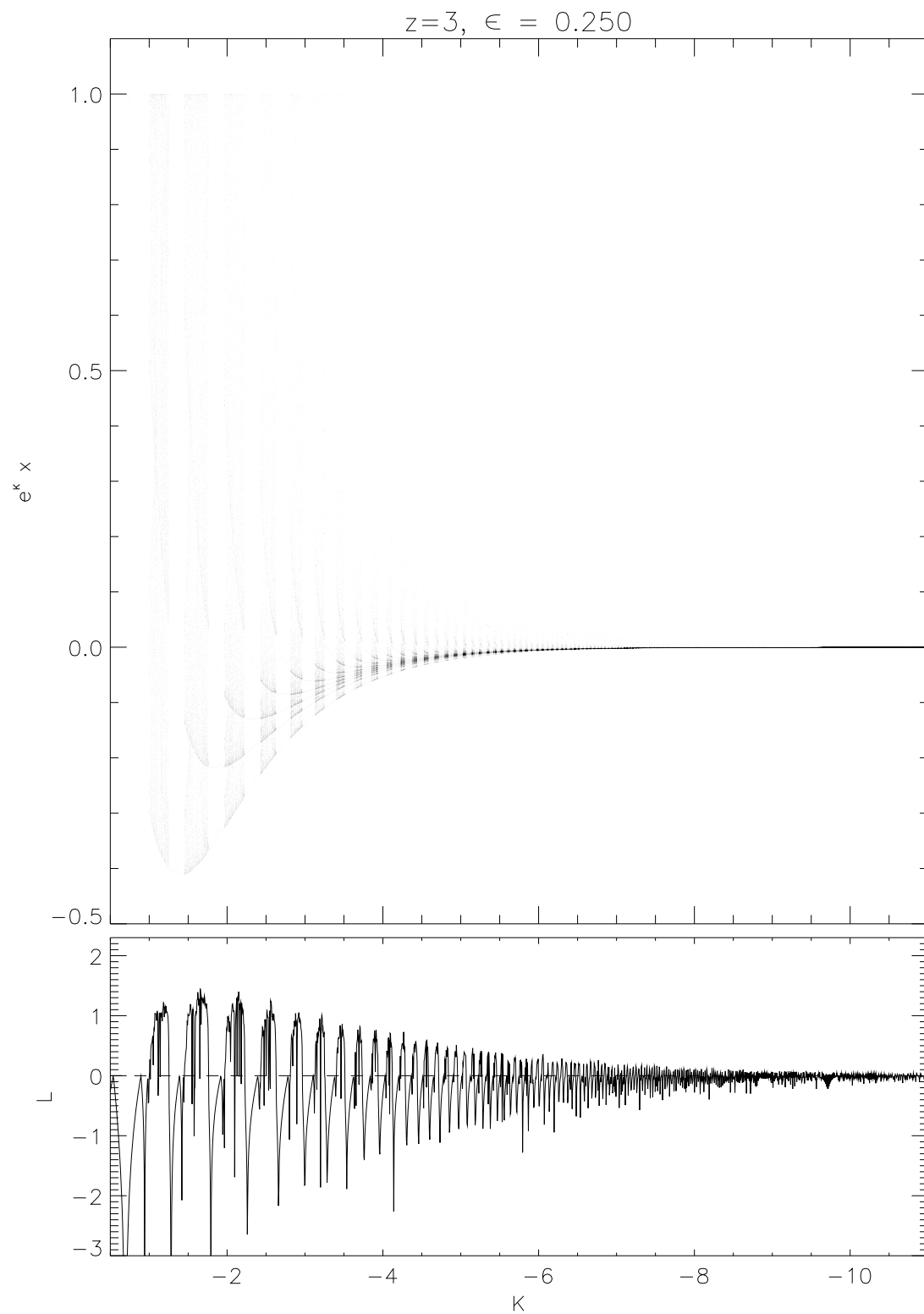


Abbildung 5.7: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.25$ . Der begrenzende Fixpunkt  $x_+$  ist bei  $K = -\infty$  verschwunden. Das zu sehende Szenario entfaltet sich somit über die gesamte negative  $K$ -Achse.

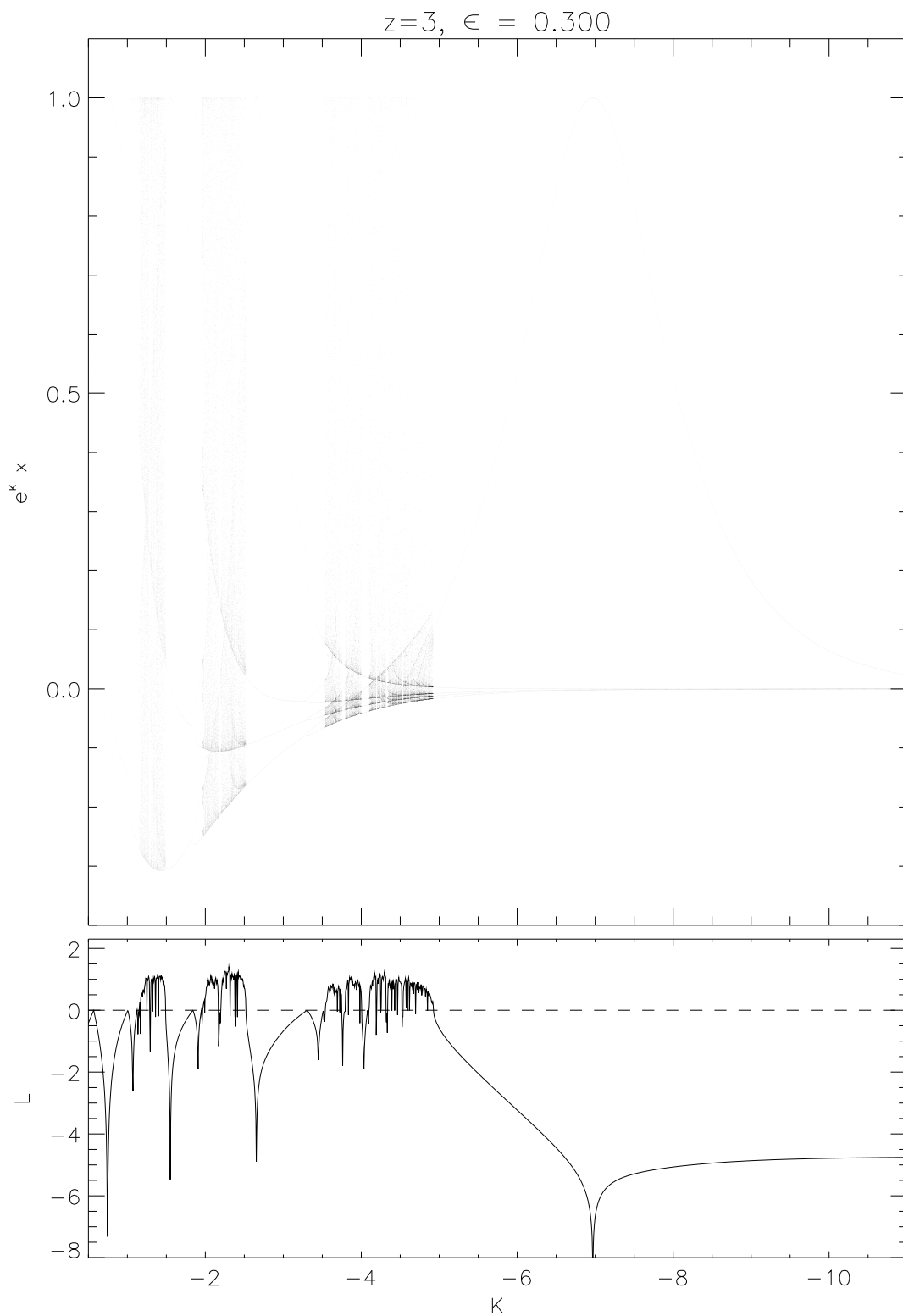


Abbildung 5.8: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.3$ . Durch zunehmende “Streckung” des Szenarios werden die bestehenden Bereiche, in denen die  $n$ -fach Iterierte einen stabilen Fixpunkt hat, zunehmend größer.

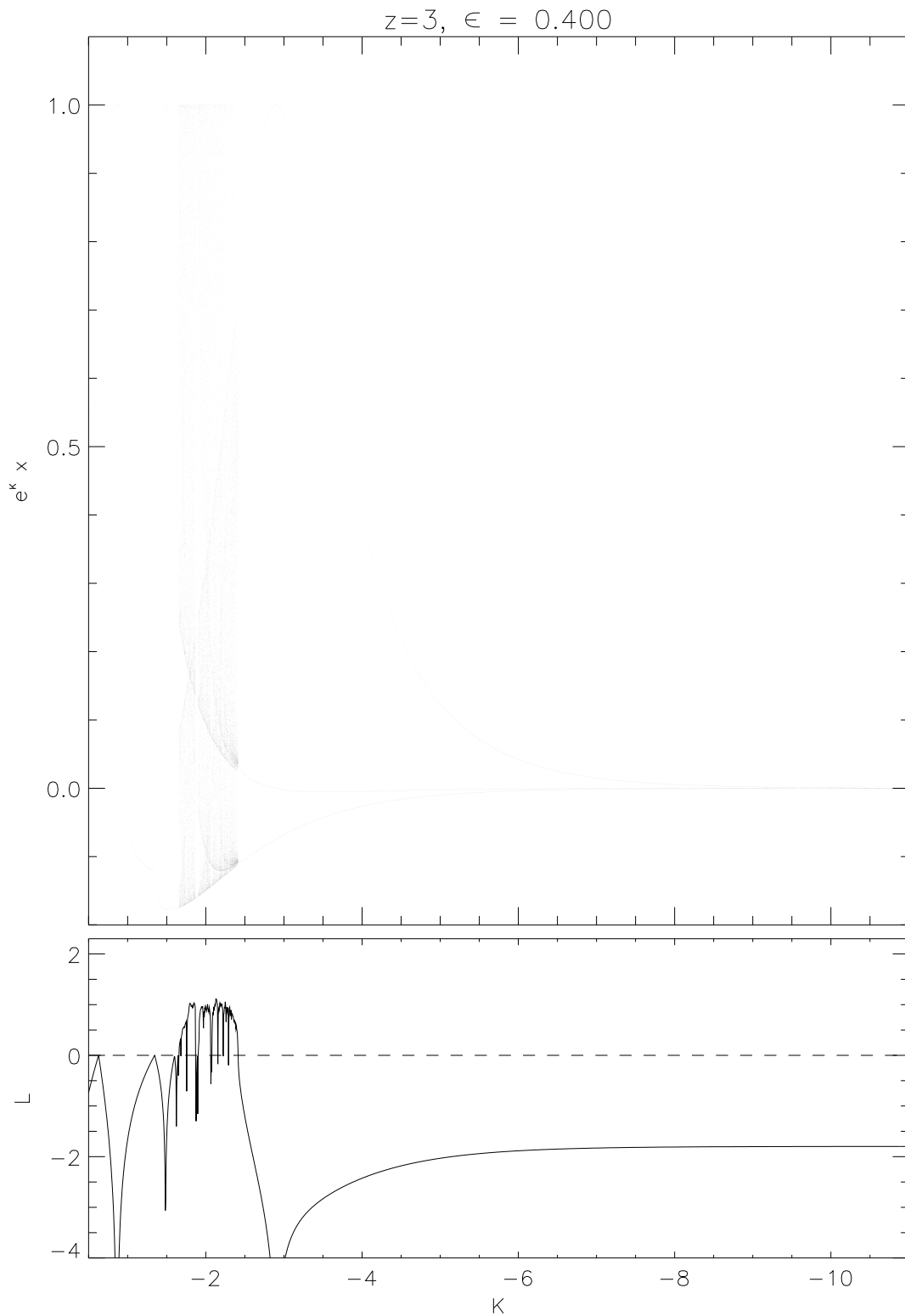


Abbildung 5.9: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.4$ .

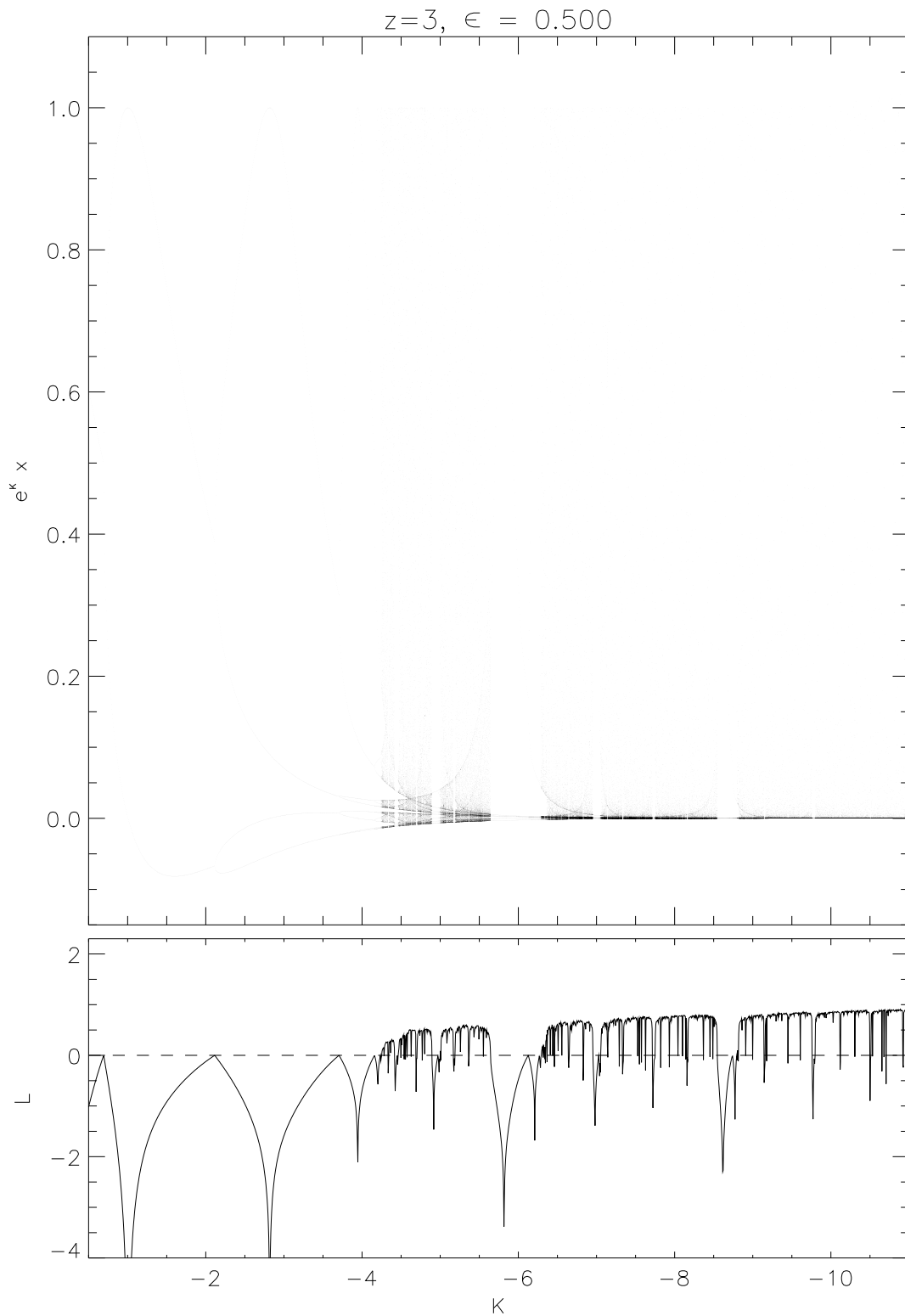


Abbildung 5.10: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.5$ .

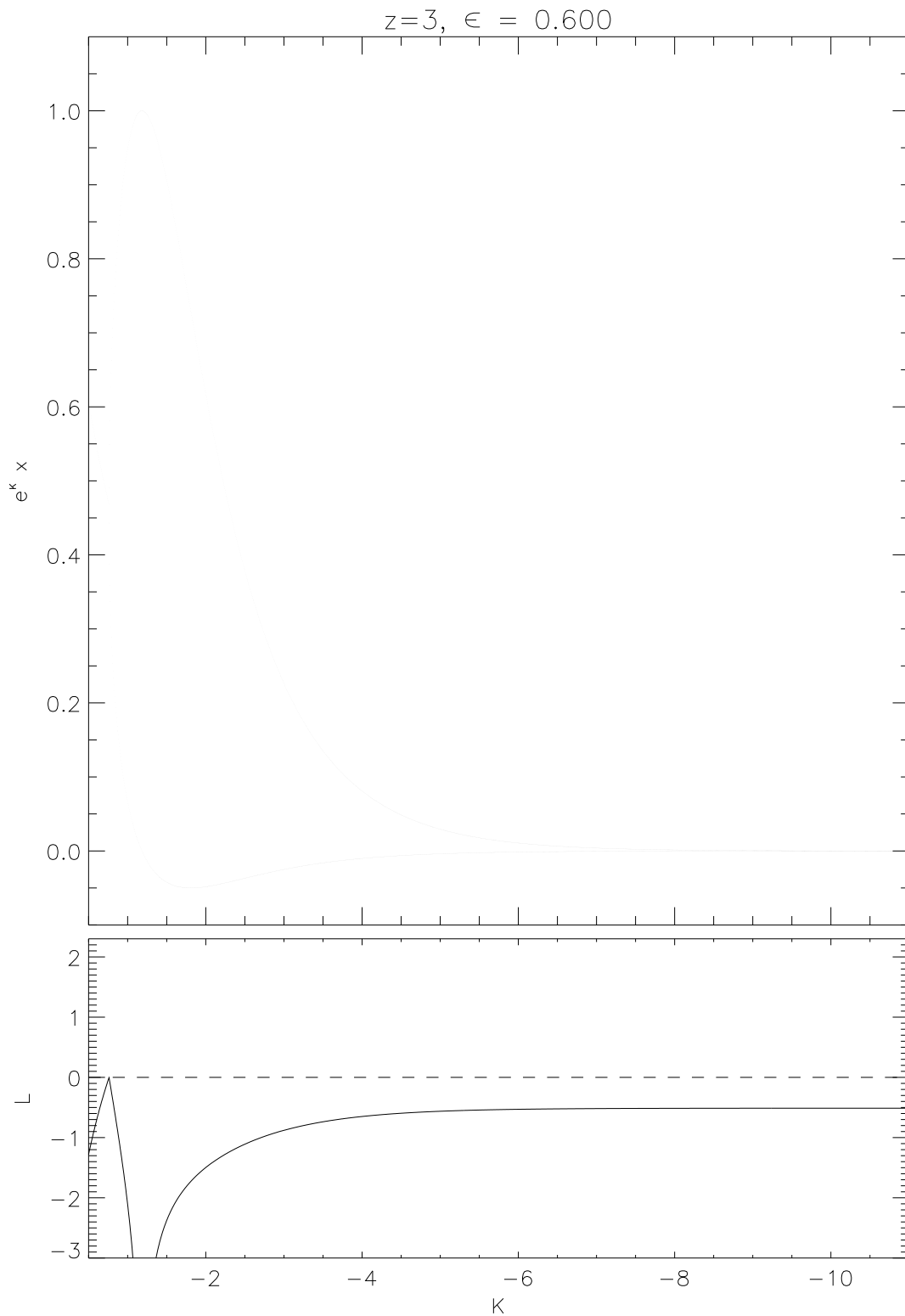


Abbildung 5.11: Bifurkationsdiagramm bei  $\epsilon = 0.6$ . Die zweifach Iterierte hat einen Fixpunkt, der bis  $K = -\infty$  stabil ist. Chaotische Bereiche sind somit unmöglich.

## 5.3 Bestimmung der Feigenbaumkonstanten $\alpha$ und $\delta$ für $z \geq 3$

Beim Betrachten der Abbildungen des letzten Abschnittes stellt sich die Frage nach der Universalität des erhaltenen Chaosszenarios. Um dies zu klären, wurden die kritischen Indizes der Bifurkationsbäume bestimmt.

### 5.3.1 Beschreibung des Algorithmus

Zur Bestimmung der Indizes wurden zum einen die Bifurkationspunkte  $r_i$  bestimmt. Diese ergaben sich durch Betrachtung der Nullstellen des Liapunov-Exponenten. Mit der Definition (Schuster, 1994)

$$\delta = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{r_n - r_{n-1}}{r_{n+1} - r_n} \quad (5.15)$$

wurde der Wert numerisch bestimmt. Hierbei wurde aufgrund der effizienten Rechenzeitnutzung die Schrittweite  $\Delta$  nicht als konstant gewählt, sondern variierte mit der Nähe zur Nullstelle des Liapunov-Exponenten

$$\Delta_{n+1}^L(\lambda) = e^{\text{const}_1 \cdot |\lambda_n|} - 1 + \Delta_0^L. \quad (5.16)$$

Der sehr kleine Summand  $\Delta_0^L$  verhindert eine mögliche Stagnation des Prozesses.

Hierdurch konnte erreicht werden, mit einer recht geringen Anzahl an Rechenschritten, eine sehr hohe Genauigkeit bei der Bestimmung der maximalen Annäherung an die Null zu erzielen.

Der Wert des kritischen Indizes  $\alpha$  wurde wie durch Feigenbaum anhand der Bestimmung der Gabelweiten an den superstabilen Punkten, bei uns der Punkt  $x = 0$ , bestimmt. Das Verhältnis der Gabelweiten  $d_i$  ergibt

$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d_n}{d_{n+1}}. \quad (5.17)$$

Wieder wurde die Schrittweite variabel gewählt

$$\Delta_{n+1}^N = e^{\text{const}_2 \cdot |\lambda_n|} - 1 + \Delta_0^N. \quad (5.18)$$

Beide Schrittweiten wurden zudem den Verhältnissen des jeweiligen Bifurkationsintervalls angepaßt. Zu diesem Zweck wurde die Größe mit dem Skalierungsfaktor

$$S_{N_{Bif}} = \frac{1}{\delta_S^{N_{Bif}}} \quad (5.19)$$



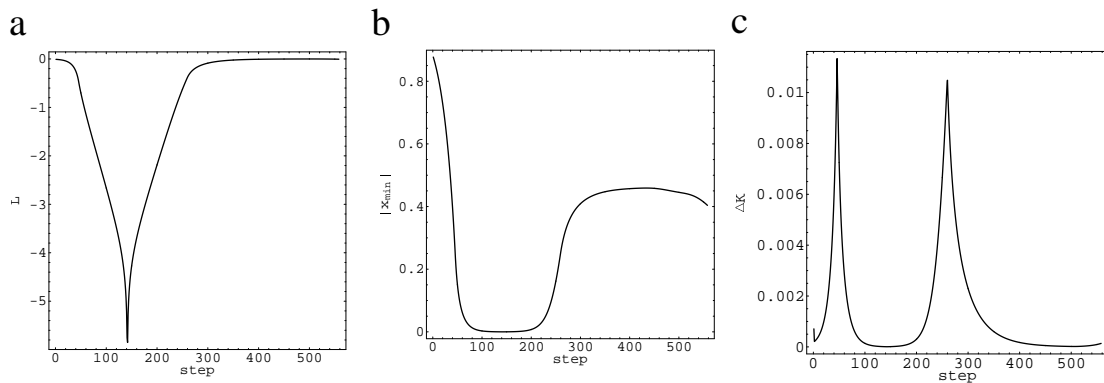


Abbildung 5.12: Die Bestimmungsgrößen der kritischen Indizes in Abhängigkeit von der Schrittzahl. a) zeigt den Liapunov-Exponenten, dessen Nullstelle die Bifurkation signalisieren. b) stellt den Betrag des kleinsten Abstandes des Baumes vom superstabilen Punkt  $x = 0$  dar. In c) ist die Schrittweite  $\Delta K$  aufgetragen.

multipliziert. Die Größe  $N_{Bif}$  ist die Anzahl der bereits vollzogenen Bifurkationen, der Parameter  $\delta_S$  wurde als Schätzwert für das zu berechnende wahre  $\delta$  genommen. Die Numerik zeigt, daß dieser Wert aus einem weiten Intervall gewählt werden kann, ohne einen nennenswerten Einfluß auf die Genauigkeit der erhaltenen kritischen Indizes zu haben. Die gewählte Schrittweite  $\Delta_n$  wurde schließlich als Minimum dieser beiden Größen gewählt, um sowohl die Nulldurchgänge des Baumes als auch die Nullstellen des Liapunov-Exponenten mit großer Genauigkeit zu bestimmen

$$\Delta_n = \min\{\Delta^L, \Delta^N\}. \quad (5.20)$$

In der Abbildung 5.12 sind diese Kenngrößen in Abhängigkeit von der Schrittnummer aufgetragen.

### 5.3.2 Ergebnisse

Durch die Bestimmung der kritischen Indizes  $\alpha$  und  $\delta$  hat sich gezeigt, daß keine Abhängigkeit vom Systemparameter  $\varepsilon$  besteht und das Modell somit universell ist.

Auch die Werte für andere Koordinationszahlen  $z$  sind in Abbildung 5.13 zu sehen. Sie stimmen für  $z = 3, 5, 7, 9$  mit denen aus der Literatur bekannten Werten sehr gut überein (Hu, 1982). Während  $\delta$  logarithmisch mit  $z$  zu steigen scheint, nähert sich  $\alpha$  asymptotisch der 1.

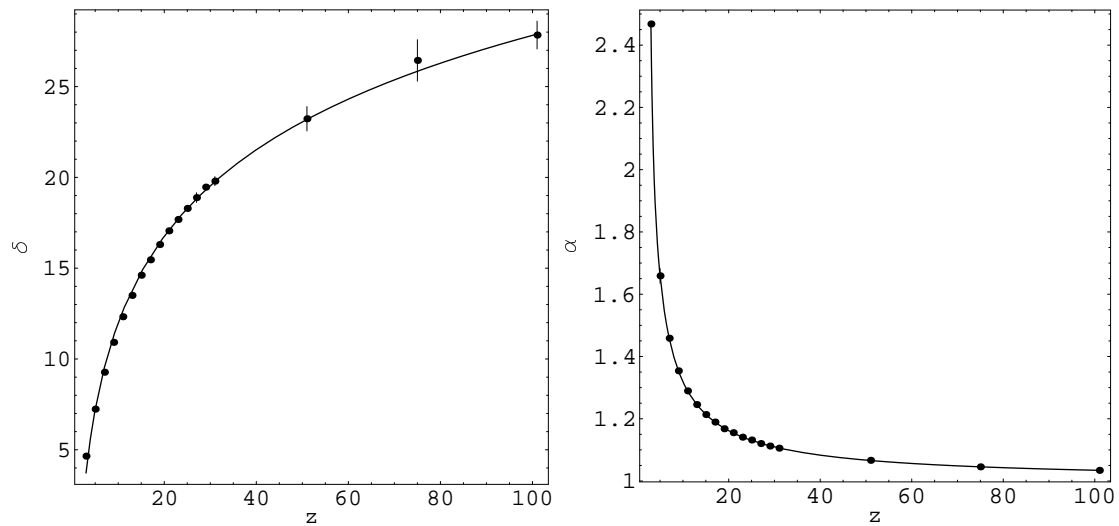


Abbildung 5.13: Die numerisch erhaltenen Ergebnisse zeigen ein logarithmisch mit der Koordinationszahl  $z$  wachsendes  $\delta$  und ein exponentiell gegen Eins strebendes  $\alpha$ . Die eingetragenen Fehlerbalken, die sich aus der Differenz der beiden letzten Folgeglieder ergeben, sind nur bei der Bestimmung der Werte für  $\delta$  für große  $z$  zu erkennen.

## 5.4 Die obere Grenze $\varepsilon_c$ für Erhalt von Chaos bei $z = 3$

Zur approximativen Bestimmung des kritischen  $\varepsilon$ -Wertes, bei dem das auftretende Chaos-Szenario nicht mehr möglich ist, betrachten wir die Stabilität der Zweifach-Iterierten bei  $K = -\infty$ . Man erhält für diese Größe folgenden Ausdruck

$$\left. \frac{\partial f^2(x_n)}{\partial x_n} \right|_{K=-\infty} = \frac{4 \varepsilon x^3}{(1 + x^2(\varepsilon - 1))^3}. \quad (5.21)$$

Setzt man hier den Fixpunkt  $x_1$  oder  $x_2$  ein, erhält man ausschließlich eine Abhängigkeit von  $\varepsilon$

$$\left. \frac{\partial f^2(x_n)}{\partial x_n} \right|_{K=-\infty, x=x_{1/2}} = \frac{4(\varepsilon - 1)^3}{\varepsilon^2}. \quad (5.22)$$

Hieraus läßt sich das kritische  $\varepsilon_c$  bestimmen, bei dem die Ableitung gerade den Wert  $-1$  annimmt. Numerisch ergibt sich dies zu

$$\varepsilon_c = 0.5680. \quad (5.23)$$

Dies Ergebnis wird einerseits plausibel gemacht durch die grobe Entwicklung des Fixpunktbaumes mit variierenden  $\varepsilon$ , wie er in den Abbildungen 5.2-5.11 gezeigt wird, aber auch durch den Endpunkt der Periodenformel nach Abb. 5.14.

## 5.5 Periodennäherung der endlichen Zyklen

Eine wesentliche Neuerung am antiferromagnetischen Chaosszenario des reskalierten  $q$ - $\bar{q}$ -Modells sind die makroskopisch großen Bereiche, in denen Fixzyklen einer bestimmten Länge inmitten des Chaos stabil werden. Hierbei wird ein Fixzyklus der Länge  $n$  nach einer Bifurkationskaskade und anschließendem Chaos durch einen Fixzyklus der Länge  $n + 1$  abgelöst. Welche maximale Länge diese Fixzyklen erreichen können, hängt von der Wahl von  $\varepsilon$  ab. Hier wollen wir eine Näherungsformel dafür gewinnen, bei welchem  $K$ -Wert diese Stabilität der Fixpunkte höherer Iterierter auftritt. Wir werden hier von Annahmen ausgehen müssen, die erst im Nachhinein durch den Erfolg der Methode vollständig gerechtfertigt wird. Dieses Verfahren wurde ausschließlich im Fall  $z = 3$  angewandt.

Da den betrachteten periodischen Intervallen mit Bifurkationskaskaden ein  $K_\infty$  folgt, an dem das Ende der Kaskade erreicht wird, und da an diesem  $K_\infty$ -Wert die Differenz zwischen den Zyklenelementen gegen 0 strebt, liegt ein Übergang zum Kontinuum zumindest an diesen Punkten nahe.

Zum Bilden des Kontinuumlimes gehen wir von der reskalierten Fixpunktgleichung (2.48) im Fall  $z = 3$  aus, die wir mit Hilfe der Definition

$$p = 1 - e^K \quad (5.24)$$

in die Form bringen

$$x_{n+1} = \frac{1 + (\varepsilon - p)x_n^2}{1 - p + \varepsilon x_n^2}. \quad (5.25)$$

Hiermit erhält man den Differenzenquotienten

$$x_{n+1} - x_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{(n+1) - n} = -x_n + \frac{1 + (\varepsilon - p)x_n^2}{1 - p + \varepsilon x_n^2}. \quad (5.26)$$

Ersetzen wir diesen beim Übergang zum Kontinuum durch den Differentialquotienten, wobei die Abhängigkeit von  $n$  umgewandelt wird in eine Abhängigkeit von  $t$ , erhalten wir die Differentialgleichung

$$\frac{dx}{dt} = (1 - x) \frac{1 + px + \varepsilon x^2}{1 - p + \varepsilon x^2}. \quad (5.27)$$

Eine anschließende Partialbruchzerlegung führt auf die Form

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{1 + p + \varepsilon} \left( \frac{1 + \varepsilon - p}{1 - x} - p \frac{2\varepsilon x + p + \varepsilon - 1}{\varepsilon x^2 + p x + 1} \right). \quad (5.28)$$

Nach anschließender Trennung der Variablen erhält man

$$(1 + p + \varepsilon)dt = (1 + \varepsilon - p) \frac{dx}{1 - x} - p \frac{2\varepsilon x + p}{\varepsilon x^2 + p x + 1} - p(\varepsilon - 1) \frac{dx}{\varepsilon x^2 + p x + 1}. \quad (5.29)$$

Diese läßt sich leicht integrieren

$$(1 + p + \varepsilon)(t - t_0) = -(1 + \varepsilon - p) \ln(1 - x) - p \ln(\varepsilon x^2 + p x + 1) + I(x), \quad (5.30)$$

wobei  $I(x)$  das Integral

$$I(x) = p(1 - \varepsilon) \int \frac{dx}{1 + p x + \varepsilon x^2} \quad (5.31)$$

darstellt. Die Lösung hängt von der Variablen

$$\Delta = 4\varepsilon - p^2 \quad (5.32)$$

ab. Für

1.  $\Delta < 0 \Leftrightarrow e^K < 1 - 2\sqrt{\varepsilon}$  existiert nach Gleichung (2.61) der Fixpunkt  $x_-$ .  
Es folgt weiter:

Nach (Gradshteyn et al., 1980) gilt die Umformung des Integrals

$$I(x) = p(1 - \varepsilon) \frac{-2}{\sqrt{-\Delta}} \operatorname{Arth} \left( \frac{p + 2 \varepsilon x}{\sqrt{-\Delta}} \right). \quad (5.33)$$

Mit Hilfe des Zusammenhanges  $\operatorname{Arth}(z) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+z}{1-z}$  ergibt sich die Form

$$I(x) = -\frac{p(1 - \varepsilon)}{\sqrt{-\Delta}} \ln \left( \frac{\sqrt{p^2 - 4\varepsilon} + p + 2 \varepsilon x}{\sqrt{p^2 - 4\varepsilon} - p - 2 \varepsilon x} \right). \quad (5.34)$$

Exponenzieren von Gleichung (5.30) und Bilden des Grenzwertes  $t \rightarrow \infty$  ergibt den einfachen Zusammenhang

$$(1 - x)^{1+\varepsilon-p} (\varepsilon x^2 + p x + 1)^p \left( \sqrt{p^2 - 4\varepsilon} + p + 2 \varepsilon x \right)^{\frac{p(1-\varepsilon)}{\sqrt{-\Delta}}} = 0. \quad (5.35)$$

Hier sind zwei bekannte Lösungen zu erkennen:

$$x = 1, \quad (5.36)$$

was der paramagnetischen Fixlinie entspricht, und

$$x = \frac{1}{2\varepsilon} \left( -p - \sqrt{p^2 - 4\varepsilon} \right), \quad (5.37)$$

die den Fixpunkt  $x_-$  nach Gleichung (2.52) wiedergibt. Im Temperaturintervall, in dem der Fixpunkt  $x_-$  existiert, ergibt sich mit diesem Übergang zum Kontinuum also keine periodische Lösung. Dies wird durch die numerischen Simulationen sehr gut bestätigt.

2.  $\Delta > 0 \Leftrightarrow e^K > 1 - 2\sqrt{\varepsilon}$ : es existiert nach Gleichung (2.61) der Fixpunkt  $x_-$  in diesem Temperaturintervall nicht.

Nach (Gradshteyn et al., 1980) gilt die Umformung des Integrals

$$I(x) = 2 p (1 - \varepsilon) \Delta^{-1/2} \arctan \left( \frac{p + 2 \varepsilon x}{\Delta^{1/2}} \right). \quad (5.38)$$

Durch Bilden des Tangens in Gleichung (5.30) ergibt sich eine periodische Lösung

$$\begin{aligned} \frac{p + 2 \varepsilon x}{\sqrt{\Delta}} = & \tan \left( \frac{\Delta^{1/2}}{2 p (1 - \varepsilon)} \left( (1 + p + \varepsilon)(t - t_0) \right. \right. \\ & \left. \left. + (1 - p + \varepsilon) \ln(1 - x) + p \ln[\varepsilon x^2 + p x + 1] \right) \right). \end{aligned} \quad (5.39)$$

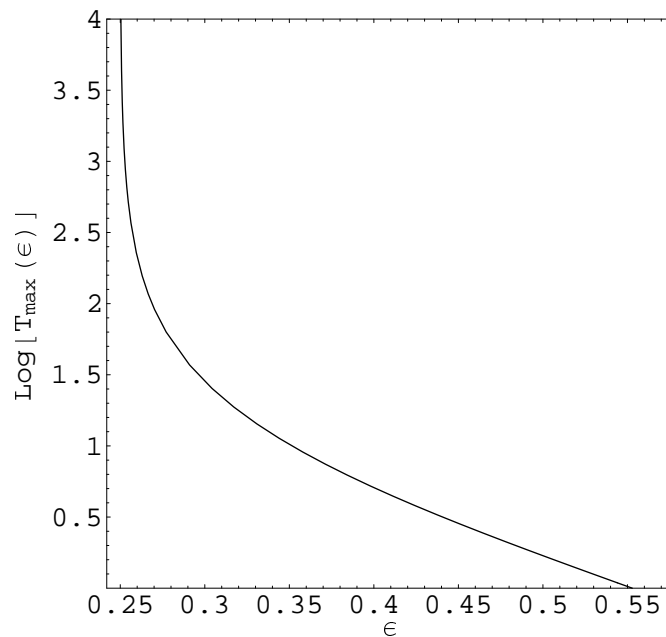


Abbildung 5.14: Die maximal erreichbare Periodenlänge, die sich nach Gleichung (5.40) ergibt. Das Verschwinden der Kurve bei  $\epsilon \approx 0.55$  paßt zur in Abschnitt 5.4 berechneten oberen Grenze für Chaosphänomene von  $\epsilon_c = 0.5680$ .

Die Periode  $T$  dieser Lösung für  $x$  ergibt sich durch den allgemeinen Zusammenhang  $\tan(t) = \tan(t + \pi)$  zu

$$T = \frac{\pi \cdot 2 \cdot p \cdot (1 - \epsilon)}{(1 + p + \epsilon) \Delta^{1/2}}. \quad (5.40)$$

Die sehr gute Übereinstimmung dieser Näherungsformel mit den numerischen Rechnungen wird auf der folgenden Seite demonstriert.

Die Gleichung (5.40) läßt sich für  $K = -\infty$  nach der maximal erreichbaren Periodenlänge  $T_{\max}$  auflösen. Dies wird erst ab  $\epsilon = 1/4$  sinnvoll. Das Ergebnis ist in Abb. 5.14 gezeigt und bestätigt das in Kapitel 5.4 erhaltene Ende des Chaosszenarios.

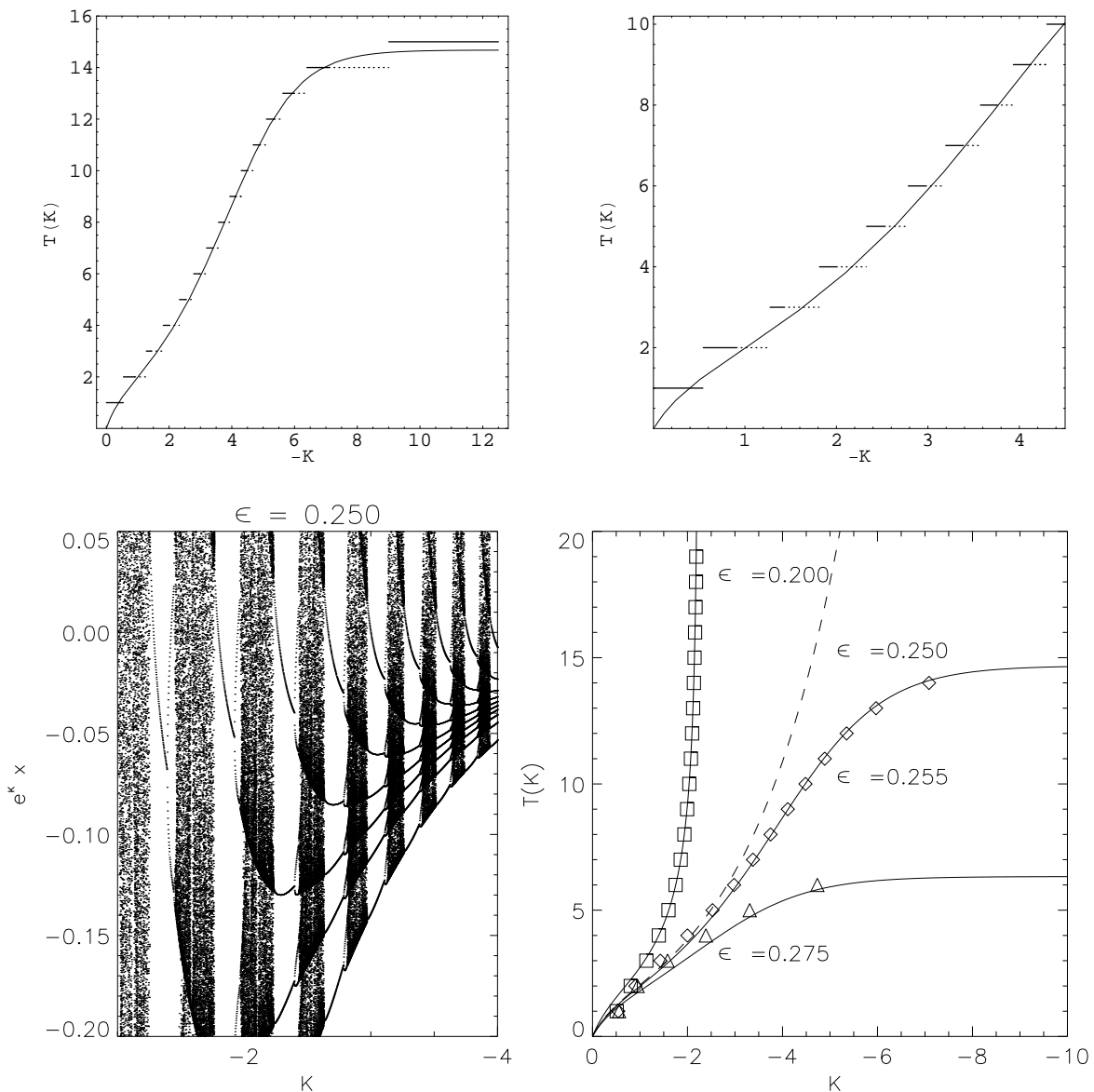


Abbildung 5.15: In der oberen Zeile sind die langen Bereiche durchgezogen eingetragen, in denen eine Periode bei  $\varepsilon = 0.255$  stabil bleibt. Gestrichelt sind anschließend die Periodenverdoppelungen und der Bereich des Chaos gezeigt. Hier wird im rechten Teil durch die vergrößerte Darstellung des Anfangsbereichs gezeigt, wie nach anfänglichen Ungenauigkeiten bei größeren Periodenlängen immer genauer der Punkt  $K_\infty$  der jeweiligen Periode durch die Formel (5.40) vorausgesagt wird. In der unteren Zeile ist links am Beispiel  $\varepsilon = 0.25$  der beschriebene Vorgang der Zunahme der Periodenlänge gezeigt, rechts ist für drei Beispiele der numerisch gewonnenen Wert mit der durch das Näherungsverfahren gewonnenen Kurve verglichen. Hierbei ist jeweils das Ende des Periodenbereiches eingetragen. Gestrichelt ist der Verlauf der Kurve bei  $\varepsilon = 0.25$  gezeigt, bei dem die Periodenzunahme bei  $K = -\infty$  den Wert  $\infty$  annimmt.

# Kapitel 6

## Erweiterung der Nachbar-Wechselwirkung des Modells

In diesem Kapitel wird eine Verallgemeinerung des bisher behandelten  $q$ - $\bar{q}$ -Modells vorgestellt. Hierbei wird die Wechselwirkung der direkten Nachbarn auch auf die übernächsten Nachbarn ausgedehnt. Dadurch ergeben sich schon bei kurzer Betrachtung Situationen, bei denen Frustration das Auftreten von Chaos vermuten läßt. Es wird im Folgenden die Übernächst-Nachbar-Kopplung auch mit NNN-Kopplung bezeichnet, deren Stärke durch  $M$  gegeben ist, während die Nächst-Nachbar-Kopplung auch NN-Kopplung genannt werden wird und weiterhin mit  $K$  bezeichnet sei.

Insgesamt gibt es vier Wahlmöglichkeiten bei der Kombination der Vorzeichen der NN-Kopplung  $K$  und der NNN-Kopplung  $M$ :

1.  $M < 0, K < 0$
2.  $M < 0, K > 0$
3.  $M > 0, K < 0$
4.  $M > 0, K > 0$ .

Wie man sich schnell überlegt, lassen die letzten beiden keinerlei Frustration erwarten. Wir werden uns also im weiteren Kapitel ausschließlich mit dem Fall  $M < 0$  beschäftigen.

Wir werden aufgrund der Simulationen sehen, daß wir es beispielsweise im Ising-Fall des Modells, in dem aufgrund der Isingsymmetrie die Fälle ferromagnetischer und antiferromagnetischer NN-Kopplung zusammenfallen, ausschließlich mit weak chaos (Chern et al. a, 1994), (Chern et al. b, 1994) zu tun haben. Dies



werden wir im weiteren Verlauf auch “weiches Chaos” nennen. Um den Unterschied deutlich zu machen, werden wir Chaosszenarien, bei denen der Liapunov-Exponent positive Werte erreicht, auch klassisches Chaos nennen.

## 6.1 Erweiterung im Fall $z = 3$ und $\bar{q} = 1$

Da die zugehörigen Rechnungen kompliziertere mathematische Ausdrücke liefern, wird hier zunächst nur der Fall mit  $z = 3$  und  $\bar{q} = 1$  gezeigt werden. Es zeigt sich, daß die Einschränkung  $\bar{q} = 1$  bei  $q, \bar{q} \in \mathbb{N}$  mit  $\bar{q} < q$  im Phasendiagramm mit allen anderen Fällen übereinstimmt, so daß diese Vereinfachung an dieser Stelle erlaubt ist.

Der Hamilton-Operator schreibt sich im Fall des beschriebenen Modells

$$-\beta\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + M \sum_{\langle\langle k,l \rangle\rangle} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} + L \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}. \quad (6.1)$$

Hierbei bedeutet  $\langle\langle k,l \rangle\rangle$  die Menge aller übernächsten Nachbarn und  $\sigma$  ist Element aus der Menge  $\{1, \dots, q\}$ . Die Delta-Funktion  $\Delta_\sigma$  reduziert sich in diesem Fall wieder zur gewohnten Delta-Funktion  $\delta_{\sigma,1}$ , es wird also o.B.d.A. die Spinrichtung 1 als Vorzugsrichtung gewählt. Die Zustandssumme  $Z$  ergibt sich so zu

$$Z = \sum_{\{\underline{\sigma}\}} P(\underline{\sigma}) \quad (6.2)$$

in der der Boltzmannfaktor  $P(\underline{\sigma})$  folgendermaßen faktorisiert

$$P(\underline{\sigma}) = e^{L \delta_{\sigma_0}} e^{M \sum_{i,j=1, i < j}^3 \delta(s_1^{(i)}, s_1^{(j)})} \prod_{r=1}^3 Q_n \left( \sigma_0, s_1^{(r)}, \underline{s}^{(r)} \right). \quad (6.3)$$

Jeder Faktor  $Q_n \left( \sigma_0, s_1^{(r)}, \underline{s}^{(r)} \right)$  gehört zu einem Unterbaum mit der Spinbelegung  $\underline{s}^{(r)}$  (vergl. Abb. 6.1a).

$$Q_n \left( \sigma_0, s_1^{(r)}, \underline{s}^{(r)} \right) = \exp \left( K \delta_{\sigma_0, s_1} + K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i, s_j} + L \sum_i \delta_{s_i, 1} + M (\delta_{\sigma_0, s_2} + \delta_{\sigma_0, s_3}) + M \sum_{\langle\langle k,l \rangle\rangle} \delta_{s_k, s_l} \right) \quad (6.4)$$

Die Abhängigkeit dieser Boltzmannfaktoren eines Branches von zwei Variablen im Gegensatz zu einer im früheren Fall ohne NNN-Kopplung entsteht zwangsläufig

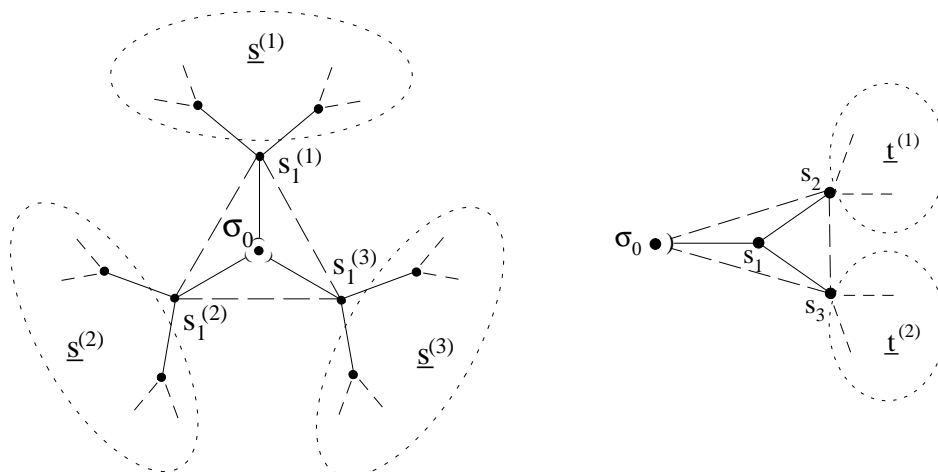


Abbildung 6.1: a) Gezeigt werden die Bezeichnungen beim rekursiven Abbau des Bethe-Gitters mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung im Fall  $z = 3$  und b) die Bezeichnungen beim Abbau eines branches.

durch die Ausweitung der Wechselwirkung. Mit der zur Gleichung (2.16) analogen Definition der Partialzustandssumme

$$T_n(\sigma, \tau) = \sum_{\{s\}} Q_n(\sigma, \tau, \underline{s}) \quad (6.5)$$

erhalten wir allgemein eine  $q \times q$ -Matrix  $T_n$ , die sich beispielsweise im Fall  $q = 3$  schreibt als

$$T_n = \begin{pmatrix} T_n(1,1) & T_n(1,2) & T_n(1,3) \\ T_n(2,1) & T_n(2,2) & T_n(2,3) \\ T_n(3,1) & T_n(3,2) & T_n(3,3) \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

Vereinfacht wird diese in ihrer Struktur durch die Annahme, daß sich Spinstellungen innerhalb von  $\bar{Q} = \{2, \dots, q\}$  nicht in ihrer Wirkung unterscheiden, da die Hamiltonfunktion keine Differenzierung vornimmt

$$T_n(\sigma, \tau) = T_n(\sigma', \tau') \quad \text{mit } \sigma, \sigma' \in A, \tau, \tau' \in B \quad \text{und } A \in \{\underline{Q}, \bar{Q}\}, B \in \{\underline{Q}, \bar{Q}\}. \quad (6.7)$$

Die Matrix  $T_n$  wird in Abbildung 6.2 schematisch dargestellt.

In allgemeiner Form läßt sich die Zustandssumme eines  $n$ -Schalen-Baumes angeben zu

$$Z^{(n)} = e^L S_2^{(n)} + \sum_{i=1}^q S_i^{(n)} \quad (6.8)$$

mit der Definition der Größen

$$S_i^{(n)} = e^{3M} \sum_{k=1}^q T_n(i, k)^3 + 3e^M \sum_{k,l=1; k \neq l}^q T_n(i, k)^2 T_n(i, l) +$$

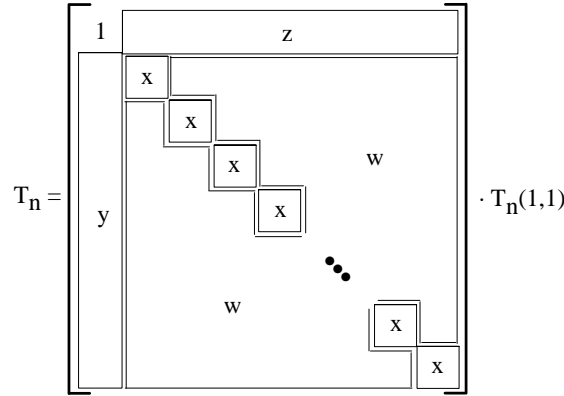


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung der Matrix der Partialzustandssummen  $T_n(\sigma, \tau)$  im Fall  $\bar{q} = 1$ .

$$+ 6 \sum_{k,l,m=1;k<l<m}^q T_n(i, k) T_n(i, l) T_n(i, m). \quad (6.9)$$

Ebenso läßt sich die lokale Magnetisierung

$$m = \langle \delta_{\sigma 0,1} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\sigma 0,1} P(\underline{\sigma}) \quad (6.10)$$

mit Hilfe dieser Größen im Limes eines unendlich ausgedehnten Baumes ausdrücken als

$$m = \frac{1}{1 + e^{-L} \sum_{r=2}^q \frac{S_r}{S_1}}. \quad (6.11)$$

Wie in dieser tritt bei allen physikalischen Observablen der Bruch  $\frac{S_r}{S_1}$  auf, so daß sich die Definition der Größe

$$x_n(\sigma, \tau) = \frac{T_n(\sigma, \tau)}{T_n(1, 1)} \quad (6.12)$$

anbietet. Hierbei wird willkürlich die Spinkonfiguration  $(\sigma, \tau) = (1, 1)$  als Basis-konfiguration gewählt. Mit Hilfe der Symmetrie (6.8) erhalten wir folgende vier Definitionen

$$x_n \stackrel{Def}{=} \frac{T_n(\sigma, \sigma)}{T_n(1, 1)} \quad \text{mit } \sigma \in \bar{Q} \quad (6.13)$$

$$y_n \stackrel{Def}{=} \frac{T_n(\sigma, 1)}{T_n(1, 1)} \quad \text{mit } \sigma \in \bar{Q} \quad (6.14)$$

$$z_n \stackrel{Def}{=} \frac{T_n(1, \sigma)}{T_n(1, 1)} \quad \text{mit } \sigma \in \bar{Q} \quad (6.15)$$

$$w_n \stackrel{Def}{=} \frac{T_n(\sigma, \tau)}{T_n(1, 1)} \quad \text{mit } \sigma, \tau \in \bar{Q} \text{ und } \sigma \neq \tau. \quad (6.16)$$

Es ergibt sich somit die graphische Form der Matrix  $T_n$ , wie sie in Abbildung 6.2 gegeben ist. Mit Hilfe dieser Definitionen von  $w_n, x_n, y_n$  und  $z_n$  läßt sich die Magnetisierung umschreiben zu

$$m = \frac{1}{1 + e^{-L} \sum_{r=2}^q F_r} \quad (6.17)$$

mit

$$F_r = \frac{a_r + 3e^{-2M} b_r + e^{-3M} c_r}{a_1 + 3e^{-2M} b_1 + e^{-3M} c_1} \quad \text{mit } r = 2, \dots, q, \quad (6.18)$$

wobei die Größen  $a_r, b_r, c_r$  Notationen sind für

$$a_r = X_r^{(3)}, \quad r = 1, \dots, q, \quad (6.19)$$

$$b_r = X_r^{(1)} X_r^{(2)} - X_r^{(3)}, \quad r = 1, \dots, q, \quad (6.20)$$

$$c_r = (X_r^{(1)})^3 - 3X_r^{(1)} X_r^{(2)} + 2X_r^{(3)}, \quad r = 1, \dots, q, \quad (6.21)$$

mit weiterhin

$$X_r^{(s)} = \sum_{k=1}^q x_n(r, k)^s = x_n^s + y_n^s + (q-2) w_n^s \quad \text{für } r = 2, \dots, q \quad (6.22)$$

$$X_1^{(s)} = \sum_{k=1}^q x_n(1, k)^s = 1 + (q-1) z_n^s. \quad (6.23)$$

Wieder sind also die Größen  $w_n, x_n, y_n$  und  $z_n$  die charakteristischen Größen des Modells, deren Bestimmung zu den physikalischen Observablen führt. Auch in diesem erweiterten Modell lassen sie sich rekursiv bestimmen. Hierzu bauen wir den Cayley tree Schale für Schale ab. Dies wird vollkommen analog zu dem früheren Vorgehen bewerkstelligt. Der Boltzmann-Faktor, der diesmal durch die weitere Reichweite der Wechselwirkung von zwei Spinvariablen  $\sigma_0$  und  $s_1$  abhängen muß, faktorisiert diesmal wie folgt. Hierbei sind  $s_2$  und  $s_3$  die zwei auf den bond  $(\sigma_0, s_1)$  angrenzenden Spins,  $\underline{t}^{(2)}$  und  $\underline{t}^{(3)}$  die zugehörigen Spinbelegungen der folgenden Äste.

$$Q_n(\sigma_0, s_1, \underline{s}) = \exp \left( K \delta_{\sigma_0, s_1} + M (\delta_{\sigma_0, s_1} + \delta_{\sigma_0, s_1} + \delta_{\sigma_0, s_1}) + L \delta_{\sigma_0, s_1} \right) \times \\ \times Q_{n-1}(s_1, s_2, \underline{t}^{(2)}) Q_{n-1}(s_1, s_3, \underline{t}^{(3)}) \quad (6.24)$$

Die Faktorisierung von  $Q_n$  in Faktoren  $Q_{n-1}$  ermöglicht, die Matrix  $T_n$  durch entsprechende Matrizen  $T_{n-1}$  darzustellen

$$T_n(\sigma, s) = e^{K \delta(\sigma, s) + L \delta(s, 1)} \sum_{s_1=1}^q \sum_{s_2=1}^q \exp(M (\delta_{\sigma, s_1} + \delta_{\sigma, s_2} + \delta_{s_1, s_2})) \times \\ \times T_{n-1}(s, s_1) T_{n-1}(s, s_2). \quad (6.25)$$



Tatsächlich ergibt sich beim Bilden des Limes  $M \rightarrow 0$  bis auf konstante Vorfaktoren die bekannte Rekursionsformel (2.28) im Fall  $\bar{q} = 1$  des gewöhnlichen  $q$ -state-Potts-Modells auf einem Bethe-Gitter der Koordinationszahl  $z = 3$ .

Auch hier interessieren wieder nur Fixpunkte, die stabil sind. Um dies entscheiden zu können, betrachten wir im nächsten Abschnitt die Stabilitätsmatrix, mit deren Hilfe wir den Liapunov-Exponenten berechnen werden.

## 6.2 Stabilitätsmatrix und Liapunov-Exponent

In diesem Abschnitt werden wir das Stabilitätskriterium (2.46) zunächst auf den zweidimensionalen Fall verallgemeinern. Dies läßt sich sehr einfach auf drei und mehr Dimensionen erweitern (Argyris et al., 1994), (Beck et al., 1993).

Gegeben sei also eine Rekursionsabbildung von  $\mathbb{R}^2$  nach  $\mathbb{R}^2$ , also zwei differenzierbare Funktionen  $f, g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  mit der Iterationseigenschaft

$$x^{(n+1)} = f(x^{(n)}, y^{(n)}) \quad (6.33)$$

und

$$y^{(n+1)} = g(x^{(n)}, y^{(n)}). \quad (6.34)$$

Zur Berechnung des Liapunov-Exponenten in einer Dimension betrachtet man zwei eng benachbarte Punkte  $x^{(0)}$  und  $x^{(0)} + \varepsilon$  und verfolgt die Veränderung ihres Abstandes, die sich im Laufe von  $N$  Iterationsschritten ergibt. Mit dem Ansatz

$$|f^{(N)}(x^{(0)}) - f^{(N)}(x^{(0)} + \varepsilon)| \propto \varepsilon e^{N \lambda(x^{(0)})} \quad (6.35)$$

erhält man exponentielles Separieren, wenn der Liapunov-Exponent  $\lambda(x^{(0)})$  positiv ist, hingegen exponentielles Annähern bei negativem Wert.

Diese Änderung eines anfänglichen kleinen Abstandes wird auf höhere Dimensionalität übertragen (Iooss et al., 1980). Hierzu beginnen wir mit dem ersten Iterationsschritt. Mit der Bezeichnung

$$\vec{\mathbf{r}}^{(0)} = \begin{pmatrix} x^{(0)} \\ y^{(0)} \end{pmatrix} \quad (6.36)$$

erhalten wir

$$\vec{\mathbf{r}}^{(1)} = \begin{pmatrix} f(x^{(0)}, y^{(0)}) \\ g(x^{(0)}, y^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (6.37)$$

auf die einzelnen Komponenten übertragen also

$$x^{(1)} = f(x^{(0)}, y^{(0)}) \quad , \quad y^{(1)} = g(x^{(0)}, y^{(0)}). \quad (6.38)$$

Der anfängliche Abstand von  $\varepsilon_x$  in  $x$ -Richtung und  $\varepsilon_y$  in  $y$ -Richtung wird somit nach dem ersten Schritt auf  $(\Delta^{(1)}x, \Delta^{(1)}y)$  gestreckt. Hierbei ergeben sich diese Größen für kleine  $\varepsilon_x$  und  $\varepsilon_y$  zu

$$x^{(1)} + \Delta^{(1)}x = f(x^{(0)} + \varepsilon_x, y^{(0)} + \varepsilon_y) \simeq f(x^{(0)}, y^{(0)}) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} \varepsilon_x + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} \varepsilon_y. \quad (6.39)$$

Analoges gilt für die  $y$ -Komponente.

In Kurznotation schreibt sich dies mit Hilfe der Stabilitätsmatrix  $\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)})$  an der Stelle  $\vec{\mathbf{r}}^{(0)}$

$$\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} & \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} \\ \left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} & \left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(0)}} \end{pmatrix} \quad (6.40)$$

einfacher als

$$\Delta \vec{\mathbf{r}}^{(1)} = \mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}. \quad (6.41)$$

Der zweite Iterationsschritt ergibt sich in analoger Weise. Hier gilt

$$x^{(2)} = f(f(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}), g(\vec{\mathbf{r}}^{(0)})) \quad , \quad y^{(2)} = g(f(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}), g(\vec{\mathbf{r}}^{(0)})). \quad (6.42)$$

Um die Streckung beispielsweise in  $x$ -Richtung zu erhalten, die sich nach der zweiten Iteration ergibt, machen wir erneut eine Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} x^{(2)} + \Delta^{(2)}x &= f\left(f(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) + \left(\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}\right)_x, g(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) + \left(\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}\right)_y\right) \\ &\simeq f(f(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}), g(\vec{\mathbf{r}}^{(0)})) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(1)}} \left(\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}\right)_x + \\ &\quad + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\vec{\mathbf{r}}^{(1)}} \left(\mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}\right)_y \end{aligned} \quad (6.43)$$

Mit Gleichung (6.42) erhalten wir somit das Fehlerrechteck nach dem zweiten Iterationsschritt und so die Fortsetzung von Gleichung (6.41)

$$\vec{\mathbf{r}}^{(2)} = \mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(1)}) \mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(0)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}. \quad (6.44)$$

Man erhält leicht induktiv das Fehlerrechteck nach  $N$  Iterationsschritten

$$\Delta \vec{\mathbf{r}}^{(N)} = \prod_{i=0}^{N-1} \mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(i)}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix}. \quad (6.45)$$

Durch Bestimmung der Eigenwerte  $\Lambda_1, \Lambda_2$  der Produktmatrix  $\prod_{i=0}^{N-1} \mathbf{S}(\vec{\mathbf{r}}^{(i)})$  und dem Ansatz für exponentielles Entfernen bzw. Annähern

$$\Lambda_{1/2} = \exp(N \lambda_{1/2}) \quad (6.46)$$

erhält man die Liapunov-Exponenten  $\lambda_1, \lambda_2$  in  $x$ -, bzw. in  $y$ -Richtung

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{N} \ln \Lambda_{1/2}. \quad (6.47)$$

Die Bestimmung der Liapunov-Exponenten über die Eigenwerte wurde ebenfalls in den Simulationen vollzogen. Die gewonnenen Ergebnisse wurden aber hauptsächlich mit einer anderen Methode gewonnen. Diese ergab qualitativ identische Resultate, ist numerisch aber stabiler. Diese wird nun im Anschluß kurz in drei Dimensionen erläutert.

Das Verfahren wird am Beispiel eines Fixpunktes gezeigt. Die Verallgemeinerung auf einen Zyklus und auf die chaotischen Bereiche folgen im Anschluß. Wir wählen hierzu zunächst einen beliebigen Startvektor  $\Psi^{(0)}$  und stellen ihn im System der Eigenvektoren der Stabilitätsmatrix  $\mathbf{S}$  des Fixpunktes dar

$$\Psi^{(0)} = a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2 + a_3 \varphi_3. \quad (6.48)$$

Zudem seien o.B.d.A. die zugehörigen nicht entarteten Eigenwerte  $\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3$  der Größe nach geordnet. So erhält man nach  $N$ -facher Abbildung des Startvektors mit Hilfe der Stabilitätsmatrix folgendes asymptotisches Verhalten

$$\begin{aligned} \Psi^{(N)} = \mathbf{S}^N \Psi^{(0)} &= \alpha_1^N \left( a_1 \varphi_1 + \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \right)^N a_2 \varphi_2 + \left( \frac{\alpha_3}{\alpha_1} \right)^N a_3 \varphi_3 \right) \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \alpha_1^N a_1 \varphi_1 \end{aligned} \quad (6.49)$$

Umgeformt gilt somit

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{S}^N \Psi^{(0)}\| &\stackrel{(6.49)}{\sim} \frac{1}{N} \ln (\|\alpha_1^N a_1 \varphi_1\|) \\ &= \frac{1}{N} \ln a_1 + \frac{1}{N} \ln \|\varphi_1\| + \ln \alpha_1 \\ &\sim \ln \alpha_1 \quad \text{für } N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Diese Gleichung stellt also den Zusammenhang des maximalen Liapunov-Exponenten mit der Norm des Bildvektors eines beliebigen Startvektors nach  $N$ -facher Abbildung mit der Stabilitätsmatrix dar.

Bei einem Zyklus der Länge  $n$  definieren wir  $\prod_{r=1}^n \mathbf{S}_r = \mathbf{S}$  und können mit den Eigenvektoren und -werten dieses Produkts analog verfahren. Wieder wird sich hier der maximale Liapunov-Exponent der Produktmatrix durchsetzen. Im chaotischen Bereich drückt man die Eigenvektoren der  $(n+1)$ -ten Stabilitätsmatrix durch die der  $n$ -ten aus. Die Richtung des Vektors, der durch  $N$ -fache Abbildung mit den Stabilitätsmatrizen aus dem Startvektor entsteht, wird somit in die Richtung des Eigenvektors zeigen, der zum größten Eigenwert der



letzten Stabilitätsmatrix gehört. Da in jedem Iterationsschritt sich der maximale Liapunov-Exponent durchsetzt, erhalten wir im Grenzfall das arithmetische Mittel der Logarithmen der jeweils größten Eigenwerte. Dies ist im chaotischen Bereich immer positiv.

Bei der numerischen Berechnung dieser Größe tritt aber das Problem auf, daß  $\mathbf{S}^N \Psi^{(0)}$  schnell so groß wird, daß er zu numerischen Ungenauigkeiten führt oder die weitere Berechnung mit heutigen Rechnern unmöglich macht. Wir werden somit die Methode leicht modifizieren müssen. Hierzu beginnen wir mit einem beliebigen Startvektor, der der Nebenbedingung unterliegt

$$\|\Psi^{(0)}\| = 1. \quad (6.51)$$

Zusätzlich wird nach jedem Iterationsschritt erneut auf Eins normiert, indem wir durch die Länge des entstandenen Vektors

$$L_n \stackrel{Def}{=} \|\Psi_n\| \quad (6.52)$$

teilen. Mit Hilfe dieser Längen  $L_i, i = 1, \dots, N$ , erhält man eine numerisch stabilere Methode zur Berechnung des maximalen Liapunov-Exponenten

$$\begin{aligned} \lambda_{\max} &\sim \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{S}^N \Psi_0\| \\ &\sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln L_i \quad \text{für } N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Dies ergibt sich mit dem Zusammenhang

$$\prod_{i=1}^N L_i = \|\mathbf{S}^N \Psi^{(0)}\|, \quad (6.54)$$

der sich leicht durch wiederholte Abbildung des anfänglichen Einheitsvektors mit der Matrix induktiv ergibt.

Die hier gezeigten Verfahren in zwei Dimensionen lassen sich vollkommen analog auf mehrere übertragen. Hierbei treten keinerlei prinzipiell neuen Schwierigkeiten auf.

## 6.3 Das Isingmodell mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung

Der einfachste Fall des erweiterten  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells ist der Fall  $q = 2, \bar{q} = 1$ , also die Erweiterung des Ising-Modells (Inawashiro et al., 1983). An diesem werden wir kurz explizit die Herleitung der Rekursionsformeln skizzieren, um mit den

Definitionen auch die Freie Energie angeben zu können. Abschließend werden wir einige analytischen Voraussagen zum Phasendiagramm machen und diese mit Hilfe von Simulationen verifizieren. Hierbei treten chaotische Phänomene in Erscheinung, die den üblichen Weg ins Chaos durch Bifurkationen nach Feigenbaum nicht zeigen und deren Liapunov-Exponent ungewöhnliches Verhalten zeigt.

### 6.3.1 Skizze der Herleitung der Rekursionsgleichungen

Beim Ising-Modell vereinfacht sich der  $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ -Ausdruck in gewohnter Weise zu einem einfachen Produkt, so daß die Hamiltonfunktion geschrieben werden kann als

$$-\beta\mathcal{H} = l \sum_i \sigma_i + K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + M \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (6.55)$$

wie immer mit

$$K = \frac{J}{k_B T} \quad M = \frac{J'}{k_B T}. \quad (6.56)$$

Die beiden möglichen Spinstellungen werden kurz mit “+” und mit “-” wiedergegeben. Die Zustandssumme eines  $n$ -Schalen-Baumes läßt sich mit vollkommen analogen Definitionen von  $T_n(\cdot, \cdot)$  und  $x_n(\cdot, \cdot)$  zu den bisherigen dann knapper schreiben als

$$\begin{aligned} Z_n &= \sum_{\sigma_0} e^{L\sigma_0} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} e^{M(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)} \prod_{r=1}^3 \sum_{\{\underline{s}^{(r)}\}} Q_n(\sigma_0, \sigma_r, \underline{s}^{(r)}) \\ &= e^L Z_n(+) + e^{-L} Z_n(-) \end{aligned} \quad (6.57)$$

mit

$$Z_n(\sigma) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} e^{M(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)} T_n(\sigma, \sigma_1) T_n(\sigma, \sigma_2) T_n(\sigma, \sigma_3). \quad (6.58)$$

Ausgeschrieben lauten diese Partialzustandssummen

$$Z_n(+) = T_n(+, +)^3 G(x_n(+, -)) \quad (6.59)$$

und

$$Z_n(-) = T_n(+, +)^3 H(x_n(-, +), x_n(-, -)) \quad (6.60)$$

mit den Definitionen

$$G(x) = e^{3M} + 3e^{-M} x + 3e^{-M} x^2 + e^{3M} x^3 \quad (6.61)$$

$$H(x, y) = e^{3M} x^3 + 3e^{-M} x^2 y + 3e^{-M} x y^2 + e^{3M} y^3, \quad (6.62)$$

so daß sich die Zustandssumme in neuer Form ergibt zu

$$Z_n = T_n(+, +)^3 (e^L G(x_n(+, -)) + e^{-L} H(x_n(-, +), x_n(-, -))). \quad (6.63)$$

Zur Herleitung der Rekursionsformeln für die  $x_n(\cdot, \cdot)$  verwenden wir die offensichtliche Rekursionsformel der Trees

$$T_n(\sigma_0, \sigma_1) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} e^{K \sigma_0 \sigma_1 + L \sigma_1 + M(\sigma_0 \sigma_2 + \sigma_0 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3)} T_{n-1}(\sigma_1, \sigma_2) T_{n-1}(\sigma_1, \sigma_3). \quad (6.64)$$

Durch Verwenden der Definitionen

$$x_1 \stackrel{Def}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} x_n(-, -) \quad (6.65)$$

$$x_2 \stackrel{Def}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} x_n(-, +) \quad (6.66)$$

$$x_3 \stackrel{Def}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} x_n(+, -) \quad (6.67)$$

und Einsetzen der vier Möglichkeiten  $(\sigma_0, \sigma_1) \in \{-, +\}$  ergeben sich die drei Rekursionsformeln

$$x_1 = e^{-2L} \frac{x_1^2 + x_2(x_2 + 2x_1) e^{-4M}}{1 + x_3(2 + x_3) e^{-4M}} \quad (6.68)$$

$$x_2 = e^{-2K} \frac{x_3^2 + (1 + 2x_3) e^{-4M}}{1 + x_3(2 + x_3) e^{-4M}} \quad (6.69)$$

$$x_3 = e^{-2K-2L} \frac{x_2^2 + x_1(x_1 + 2x_2) e^{-4M}}{1 + x_3(2 + x_3) e^{-4M}} \quad (6.70)$$

Für die spätere Berechnung der Freien Energie bilden wir schon hier den Bruch

$$\frac{T_n(+, +)}{T_{n-1}(+, +)^2} = e^{K+L} (e^{3M} + 2 e^{-M} x_{n-1}(+, -) + e^{-M} + e^{-M} x_{n-1}(+, -)^2) \quad (6.71)$$

### 6.3.2 Freie Energie

Zum Erhalt der Freien Energie des Ising-Modells mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung verwenden wir wieder das Prinzip von Gurjati (Gujrati, 1995), das sich in dem  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell als richtig erwiesen hatte. Wir werden das Ergebnis in diesem Fall nicht durch Betrachten der Ableitungen vollständig verifizieren, sondern den Spezialfall einer verschwindenden Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung mit dem Ergebnis (4.29) vergleichen.

Analog zu Gleichung (4.24) kann man nach (Gujrati, 1995) folgenden Zusammenhang zwischen der Freien Energie pro Bond und der Zustandssummen der Bäume mit  $n$  bzw.  $n - 1$  Schalen annehmen

$$-\frac{f}{k_B T} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{3} \ln \frac{Z_n}{(Z_{n-1})^2}. \quad (6.72)$$

Mit Gleichung (6.63) ergibt sich dies zu

$$-\frac{f}{k_B T} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{3} \ln \left( \left( \frac{T_n(+, +)}{T_{n-1}(+, +)^2} \right)^3 \frac{e^{L G(x_n(+, -)) + \frac{1}{e^L} H(x_n(-, +), x_n(-, -))}}{[e^{L G(x_{n-1}(+, -)) + \frac{1}{e^L} H(x_{n-1}(-, +), x_{n-1}(-, -))}]^2} \right) \quad (6.73)$$

und mit Bilden des Limes  $n \rightarrow \infty$  erhält man das einfache Ergebnis

$$-\frac{f}{k_B T} = \frac{1}{3} \ln \left( \frac{F(x_3)^3}{e^{L G(x_3)} + \frac{1}{e^L} H(x_2, x_1)} \right) \quad (6.74)$$

mit den Definitionen (6.61) und (6.62) und

$$F(x) = e^{K+L} \left( e^{3M} + e^{-M} (2x_3 + x_3^2) \right). \quad (6.75)$$

Die Freie Energie ist somit bestimmt, wenn man die Größen  $x_1$ ,  $x_2$  und  $x_3$  kennt. Die Plausibilität dieses Ergebnisses wird untermauert, wenn man den Limes  $M \rightarrow 0$  betrachtet, also den bekannten Fall des  $q$ - $\bar{q}$ -Modells für  $z = 3$ ,  $q = 2$  und  $\bar{q} = 1$ , und mit Gleichung (4.29) vergleicht und Übereinstimmung feststellt.

### 6.3.3 Analytische Voraussagen zum Phasendiagramm und ihre Bestätigung durch Simulationen

Wir behandeln wieder den Fall eines verschwindenden äußeren Magnetfeldes  $L = 0$ . In diesem Fall ist in der paramagnetischen Phase kein Spin bevorzugt, so daß die Gleichheit  $x_2 = x_3$  gilt. Mit Hilfe der Positivität der Verhältnisse  $x_i \geq 0$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$  von Partialzustandssummen kann man die Lösung der paramagnetischen Phase explizit angeben:

$$x_1 = 1 \quad , \quad x_2 = x_3 = x = e^{-K} \frac{x^2 + (1 + 2x) e^{-2M}}{1 + x(2 + x) e^{-2M}}. \quad (6.76)$$

Generell sind nur Fixpunktlösungen von Bedeutung, die stabil sind, deren Eigenwerte der zugehörigen Stabilitätsmatrix also vom Betrag kleiner Eins sind

$$|\lambda_i| < 1 \quad \text{für } i = 1, 2, 3. \quad (6.77)$$

Die Stabilitätsmatrix  $\mathbf{S}$  ergibt sich im Ising-Modell mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung in allgemeiner Form in Abhängigkeit der Variablen  $K$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  und

$$\text{quot} \stackrel{Def}{=} \left| \frac{M}{K} \right| \quad (6.78)$$

zu

$$\mathbf{S} = \frac{2}{N} \begin{pmatrix} x_1 + s x_2 & s(x_1 + x_2) & -s x_1(1 + x_3) \\ 0 & 0 & e^{-K}(x_3 + s) - s x_2(1 + x_3) \\ e^{-K} s(x_1 + x_2) & e^{-K}(x_2 + s x_1) & -s x_3(1 + x_3) \end{pmatrix} \quad (6.79)$$

mit den Abkürzungen

$$N = 1 + s(x_3^2 + 2 x_3), \quad s = e^{-2M} = e^{2|K| \text{ quot}}. \quad (6.80)$$

Sie läßt sich im Spezialfall der paramagnetischen Phase nach Gl.(6.76) vereinfachen zu

$$\mathbf{S} = \frac{2}{N} \begin{pmatrix} 1 + s x & s(1 + x) & -s(1 + x) \\ 0 & 0 & e^{-K}(x + s) - s(1 + x)x \\ e^{-K} s(1 + x) & e^{-K}(x + s) & -s x(1 + x) \end{pmatrix} \quad (6.81)$$

mit

$$N = 1 + s(x + 2)x, \quad s = e^{-2M} = e^{2|K| \text{ quot}}. \quad (6.82)$$

Die Eigenwerte ergeben sich so als Lösung einer kubischen Gleichung. Mit dieser Gleichung und den paramagnetischen Werten für die  $x_i, i = 1, \dots, 3$  nach Gleichung (6.76) läßt sich das Einsetzen von magnetischer Ordnung durch Setzen des Betrages des Eigenwertes zu Eins analytisch bestimmen. Wir definieren zur einfacheren Schreibweise folgende Größen

$$A = 1 + s x, \quad B = s(1 + x) \quad \text{und} \quad F = e^{-K}(x + s). \quad (6.83)$$

Die Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte schreibt sich so

$$\pm N^2 - 2(A - B x) \pm 4(e^{-K} B^2 + F B x - F^2) + 8(F - B x)^2 = 0. \quad (6.84)$$

Zur Überprüfung dieses Ergebnisses schauen wir uns eine verschwindene Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung  $M = 0$  an. Es zeigt sich, daß das Pluszeichen zur ferromagnetischen Lösung gehört, während das Minuszeichen die antiferromagnetische ergibt. Im ferromagnetischen Fall ergibt sich der kritische Wert von

$$e^{K_c} = 3, \quad (6.85)$$

beim Minuszeichen hingegen von

$$e^{K'_c} = \frac{1}{3}. \quad (6.86)$$

Dies sind aber exakt die Werte, die sich mit Hilfe von Gleichung (2.51) und  $z = 3, \varepsilon = \frac{q}{3} - 1 = 1$  ergeben.

Wir werden uns im weiteren Verlauf auf den Spezialfall einer ferromagnetischen Nächst-Nachbar-Wechselwirkung ( $K > 0$ ) und einer antiferromagnetischen Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung ( $M < 0$ ) konzentrieren. Damit ergibt sich in Gleichung (6.84) die Beschränkung auf das Pluszeichen.

Nach weiterem Umformen erhalten wir eine Faktorisierung der kritischen Bedingung für die paramagnetische Lösung. Diese schreibt sich als

$$a(K, M) b(K, M) c(K, M) = 0 \quad (6.87)$$

und liefert so drei kritische Linien:

$$s + 12 s(1-s)(1+e^{-K}) - 2 s^2 e^{-K} - 3e^{-2K} \stackrel{Def}{=} a(K, M) = 0 \quad (6.88)$$

$$1 - 2 s^2 e^{-K} + e^{-2K} s(1-4s) \stackrel{Def}{=} b(K, M) = 0 \quad (6.89)$$

$$\begin{aligned} & a(a\nu - b\eta)^2 + b(bs - a\mu)^2 - \xi(a^2\mu\nu + b^2\eta s) + \\ & + \xi^2(a\eta\nu + b\mu s) - \xi^3\nu s + \xi a b(3\nu s - \eta\mu) \stackrel{Def}{=} c(K, M) = 0 \end{aligned} \quad (6.90)$$

mit

$$\eta = 2s - e^{-K} \quad (6.91)$$

$$\nu = -e^{-K} s \quad (6.92)$$

$$\mu = 1 + \nu \quad (6.93)$$

$$\xi = \eta + 3\nu(s + e^{-K}). \quad (6.94)$$

Es zeigt sich, daß die Funktion  $a$  keinerlei Nullstellen besitzt. Die Nullstellenmenge der beiden anderen Funktionen beschreiben recht exakt unsere numerisch gefundenen Werte.

Bei verschwindender Übernächst-Nachbarkopplung  $M = 0$  vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$b(K, 0) = 1 - 2e^{-K} - 3e^{-2K} \quad (6.95)$$

und liefern somit den bekannten kritischen Punkt  $K_c = \ln 3$ , während

$$c(K, 0) = 0 \quad \text{für alle } K. \quad (6.96)$$

Eine sehr einfache heuristische Überlegung führt zur Phasengrenze des Ferromagnetismus am Temperaturnullpunkt. Durch Betrachten der beiden Grenzfälle  $M \gg K$  und  $M \ll K$ , die in Abbildung 6.5 dargestellt sind, findet man eine erste Abschätzung für die Phasengrenze. Dabei betrachtet man die jeweiligen Elementarzellen. Im Fall der Dominanz der ferromagnetischen NN-Kopplung, liefert dieser Grundzustand den Energiebeitrag

$$E_\Delta = e^{3M+3K}. \quad (6.97)$$

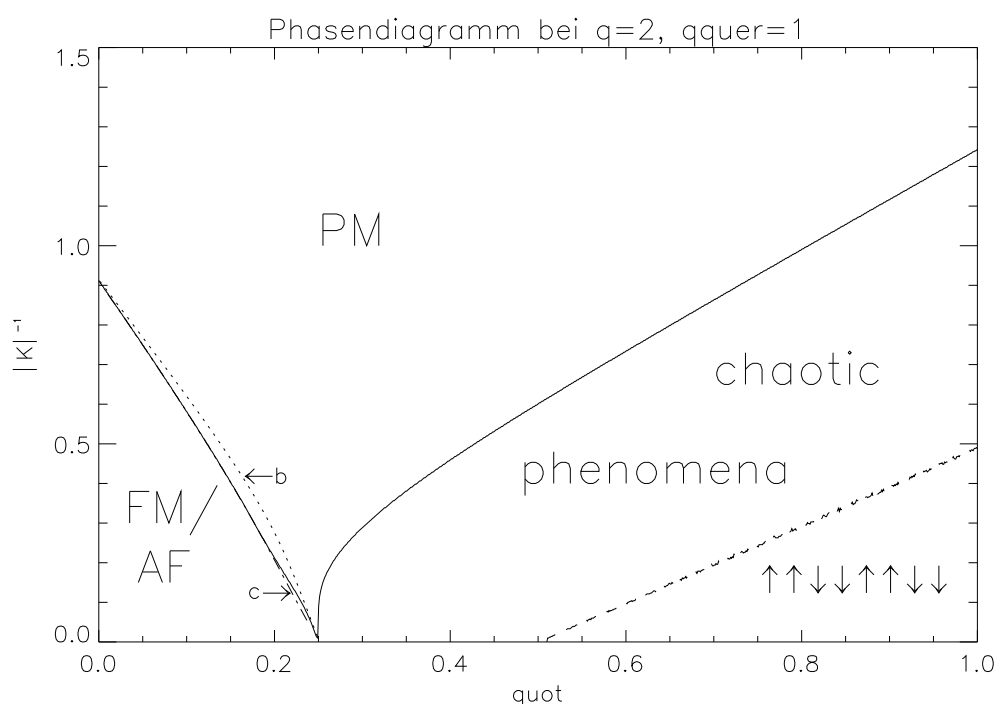


Abbildung 6.4: Phasendiagramm des Isingmodells mit Übernächstnachbar-Wechselwirkung. Eingezeichnet ist die paramagnetische Phase, die Phase des schwachen Chaos, die doppelperiodische Phase und der ferro- bzw. antiferromagnetische Bereich. Die analytisch gewonnene Kurve  $c$  (6.90) stimmt bis auf numerische Ungenauigkeiten gut mit den numerisch gewonnenen Werten überein. Der Verlauf der Kurve  $b$  (6.89) scheint ein nicht verstandenes Fehler oder eine nicht verstandene Phasengrenze zu beinhalten.

Betrachtet man hingegen den Fall, in dem die antiferromagnetische NNN-Kopplung überwiegt, fällt zum einen auf, daß dieser Grundzustand auch bei Festlegung der innersten Elementarzelle unendlich oft entartet ist. Dies liegt an der Vertauschbarkeit von jeweils zwei der drei äußeren Spins. Mit einer analogen Betrachtung zum vorigen Fall findet man den Energiebeitrag

$$E_{\Delta} = e^{M+2K}. \quad (6.98)$$

Bei der Gleichheit dieser Boltzmannfaktoren wird nach dieser groben Überlegung die ferromagnetische Phase abgelöst. Dies geschieht hiernach bei

$$quot = \left| \frac{M}{K} \right| = \frac{1}{2}. \quad (6.99)$$

Die analytischen wie auch die numerischen Ergebnisse stimmen mit dieser Voraussage sehr gut überein.

Im Folgenden stellen wir das Phasendiagramm für den Isingfall mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung vor, das durch die Begrenzung der paramagnetischen

Phase und durch Begrenzung der “doppelt periodischen Phase” gefunden wurde. Der Name rührt daher, daß bei einer Kette bei dominierender antiferromagnetischer NNN-Kopplung sich beim Ising-Modell eine doppelperiodische Lösung ausbildet. Im allgemeinen Fall des Bethe-Gitters ist die Situation schwieriger, wie man sich leicht klarmacht, trotzdem wird der Ausdruck zur Bezeichnung beibehalten.

Schließlich werden in Abb. 6.6 und 6.7 zwei Fixpunktdiagramme gezeigt. In ihnen wurden statt der Zustandsgrößen  $x_i$  die Variablen  $y_i$  verwendet. Dies hat hier vor allem den Zweck, die Diagramme übersichtlicher zu gestalten, da diese Größen auf das Intervall  $[-1, 1]$  beschränkt sind. Ihre Definition lautet

$$y_1 = \frac{1 + x_1 - x_2 - x_3}{1 + x_1 + x_2 + x_3}, \quad (6.100)$$

$$y_2 = \frac{1 - x_1 - x_2 + x_3}{1 + x_1 + x_2 + x_3} \quad \text{und} \quad (6.101)$$

$$y_3 = \frac{1 - x_1 + x_2 - x_3}{1 + x_1 + x_2 + x_3}. \quad (6.102)$$

Sie wurden gebildet, um eine doppelperiodische Lösung zu erkennen, da

$$y_1 \longrightarrow y_1 \quad \text{nach 2 Iterationsschritten} \quad (6.103)$$

aber

$$y_2/y_3 \longrightarrow -y_2/-y_3 \quad \text{nach 2 Iterationsschritten.} \quad (6.104)$$

Die erste Abbildung 6.6 zeigt bei konstantem Wert für  $quot$  den Übergang von der paramagnetischen Phase, im Diagramm durch eine Fixpunktlinie zu erkennen, zu der ferro- bzw. antiferromagnetischen Phase. Der Liapunov-Exponent zeigt durch eine Nullstelle die genaue Lage des Überganges an.

Das zweite Diagramm zeigt den Verlauf bei  $quot = const.$  von der paramagnetischen Phase in die Phase des schwachen Chaos. Dieses ist auch bei Betrachtung eines deutlich kleineren Temperaturintervalls unstrukturiert und zeigt auch nicht den üblichen Übergang zum Chaos durch Bifurkationen gemäß Feigenbaum. Analog zum reskalierten Chaos des fünften Kapitels zeigen sich hier aber ebenfalls große periodische “Fenster”, in denen ein Zyklus endlicher Länge stabil wird.



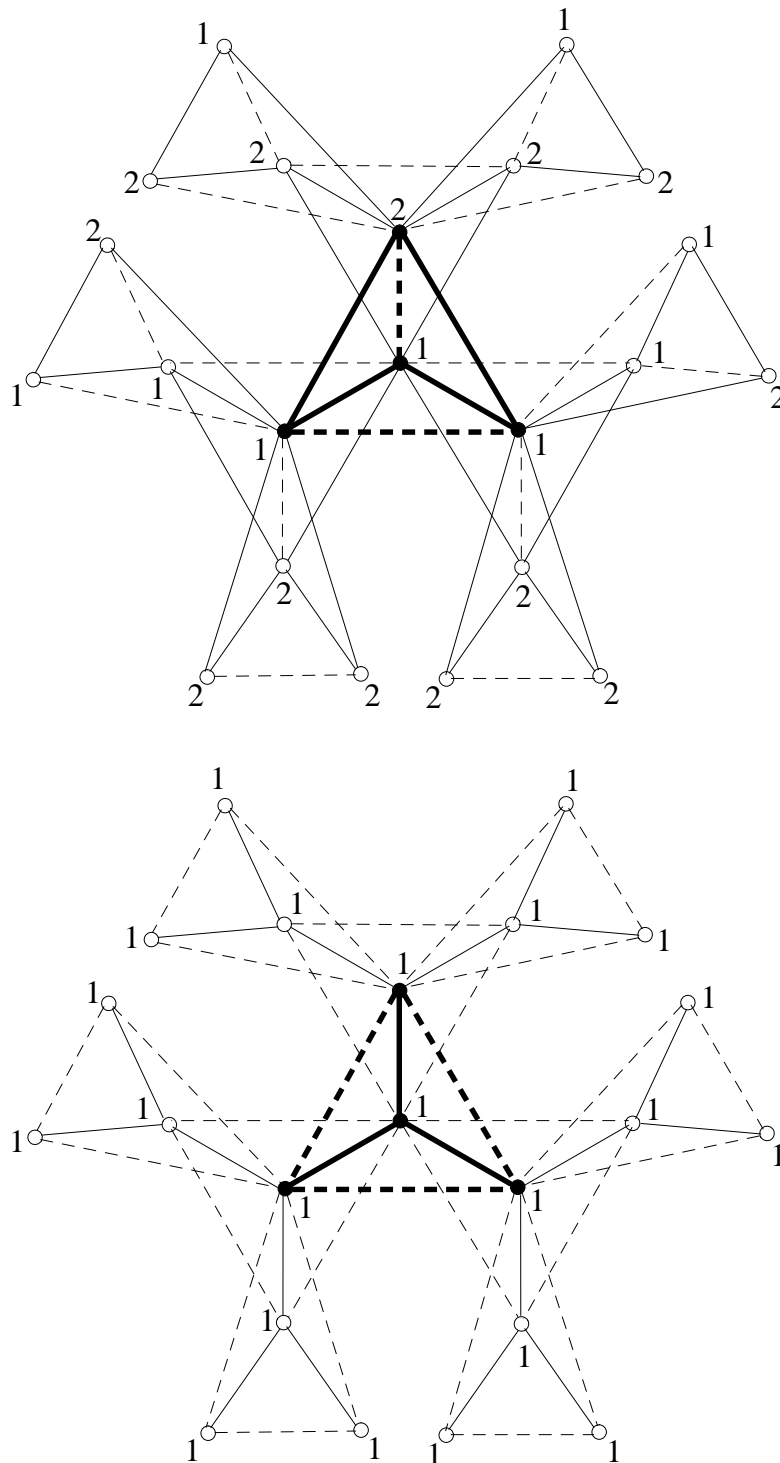


Abbildung 6.5: Die Abbildungen zeigen symbolisch die Hamiltonfunktion des Cayley-Baumes mit  $z = 3$  und vier Schalen bei antiferromagnetischer NNN-Wechselwirkung und ferromagnetischer NN-Kopplung. Hierbei sind nicht-frustrierte bonds durchgezogen gezeichnet, gestrichelt die frustrierten. Im oberen Teil ist der Grenzfall  $M \gg K$  betrachtet, im unteren der Grenzfall  $M \ll K$ .

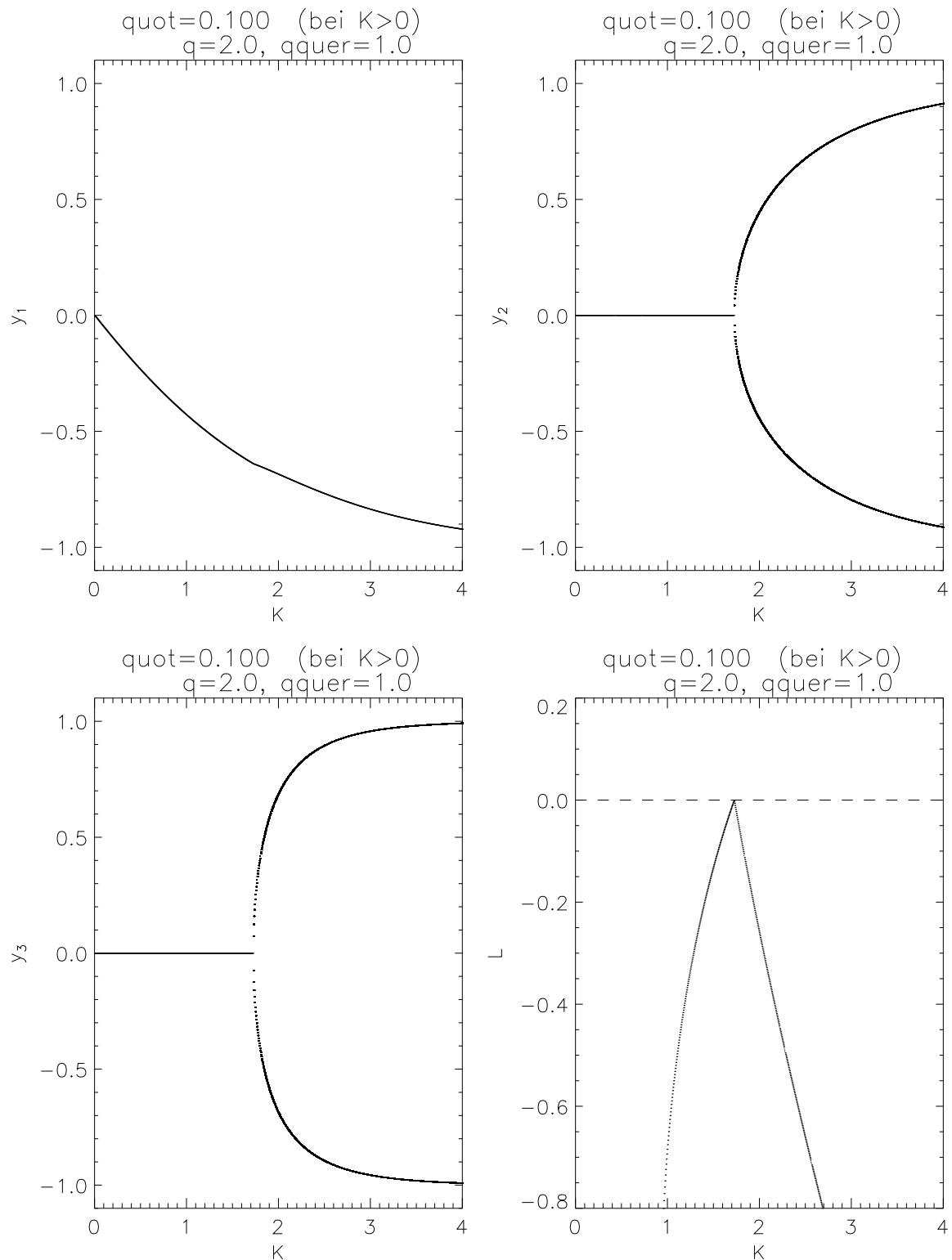


Abbildung 6.6: Der Übergang vom  $p$ Saramagnetischen Bereich in den ferro- bzw. antiferromagnetischen Bereich bei  $q=0.1$ . Der Übergangspunkt ist deutlich am Liapunov-Exponenten auszumachen.

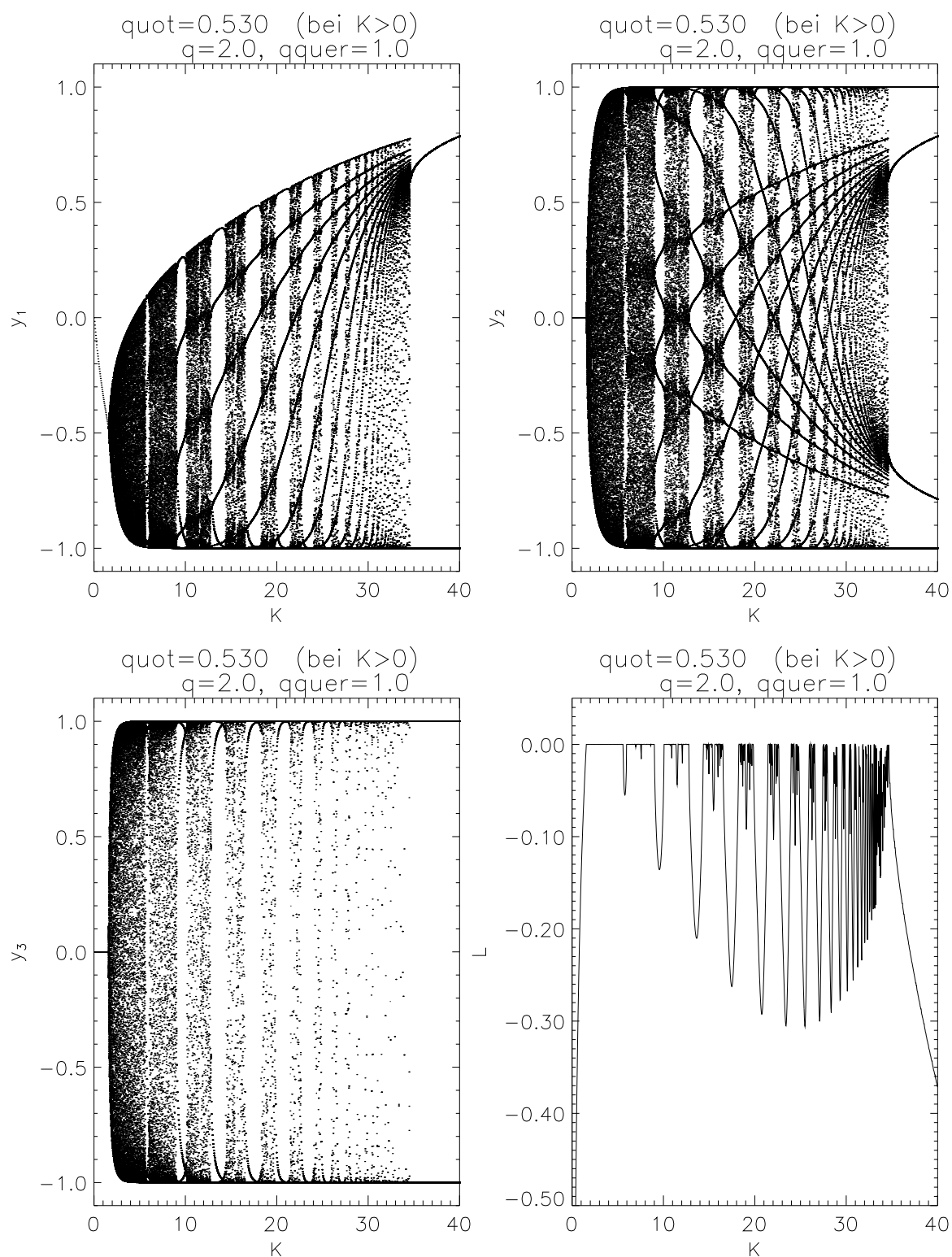


Abbildung 6.7: Der Übergang vom paramagnetischen Bereich in die Phase des weichen Chaos bei  $q=0.53$ . Auffallend ist der negativ, mit großer numerischer Genauigkeit aber nicht positiv werdende Liapunov-Exponent. Begrenzt nach rechts wird diese Phase durch den doppelperiodischen Bereich.

## 6.4 Das $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung

In diesem Kapitel wird zunächst skizzenhaft die Herleitung der Rekursionsgleichungen für  $q$  und  $\bar{q}$  beliebig mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung gezeigt. Durch den Wegfall der Ising-Symmetrie werden anschließend die Fälle  $K > 0$  und  $K < 0$  getrennt behandelt. Es wird ausschließlich der Fall  $q$  und  $\bar{q}$  ganzzahlig betrachtet, da dieser leicht physikalisch motiviert werden kann.

Durch Simulationen des Liapunov-Exponenten sehen wir bei hohen Temperaturen wieder schwaches Chaos. Im selben Bifurkationsdiagramm sehen wir bei tieferen Temperaturen ein Steigen des Exponenten in den positiven Bereich und somit in den Bereich des klassischen Chaos. In Abschnitt 6.4.2 wird eine Erklärung für das Phänomen des weichen Chaos und für diesen kontinuierlichen Wechsel gegeben werden.

### 6.4.1 Skizze der Herleitung der Rekursionsformeln

Wesentliche Teile der Herleitung der Rekursionsabbildung bleiben vollkommen analog zu der aus Kapitel 6.1 für  $q$  bel.,  $\bar{q} = 1$ . Es wird wesentlich in den Formeln (6.1), (6.3), (6.4) und vor allem in (6.25) die Delta-Funktion  $\delta(\sigma, 1)$  durch ihre Verallgemeinerung  $\Delta_\sigma$  ersetzt. Die Gleichheiten (6.8), die dort in auch nun gültiger Allgemeinheit formuliert sind, ändern aber die Struktur der Matrix der Partialzustandssummen wesentlich. Dies wird in Abbildung 6.8 veranschaulicht. Hier gibt es zwei Arten von Summen  $T_n(\sigma, \tau)$  mit  $\sigma, \tau \in \underline{Q}$ : solche mit  $\sigma = \tau$  und solche mit  $\sigma \neq \tau$ . Wir wählen die Spinkombination  $\sigma = \tau$  und somit  $T_n(1, 1) \stackrel{Def}{=} T_n(\sigma, \sigma)$  mit  $\sigma \in \underline{Q}$  als Basiskonfiguration. Diese  $\bar{q}$  Konfigurationen nehmen wir wieder durch die Insensitivität der Hamiltonfunktion als gleich an, da der Wert der Funktion wohl durch den  $e^{K \delta(\sigma, \tau)}$ -Term auf die Gleichheit der benachbarten Spins reagiert, ihre spezielle Wahl innerhalb von  $\underline{Q}$  aber nicht wahrnimmt. Dies führt zur Bildung einer fünften Zustandsgröße, für die wir nun die Bezeichnungen  $v, w, x, y$  und  $z$  wählen.

Rekursiv lassen sich die Zustandsgrößen wie folgt berechnen

$$\begin{aligned}
 v_{n+1} = & e^{-K} \frac{1}{N} \left( v_n^2 + e^{-2M} [1 + 2v_n + 3(\bar{q} - 2)v_n^2 + (q - \bar{q})z_n(z_n + 2v_n)] + \right. \\
 & + e^{-3M} [(q - \bar{q})z_n(2 + 2(\bar{q} - 2)v_n + (q - \bar{q} - 1)z_n) + \\
 & \left. + (\bar{q} - 2)v_n[2 + v_n(\bar{q} - 3)] \right) \tag{6.105}
 \end{aligned}$$

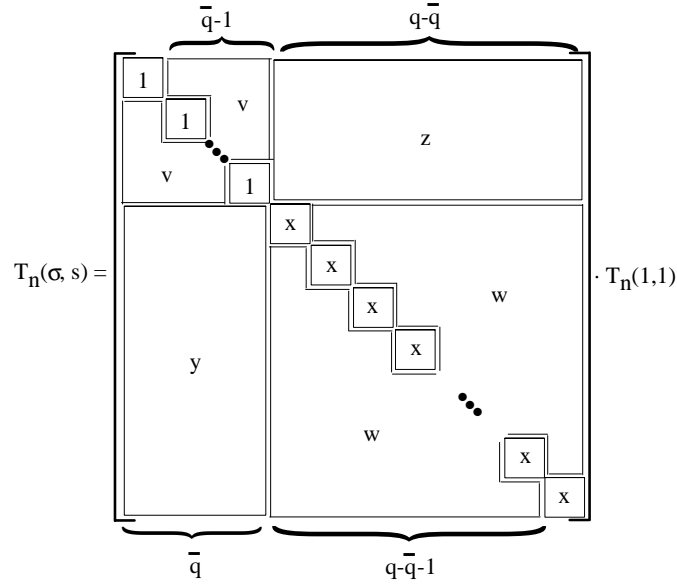


Abbildung 6.8: Die Struktur der Matrix der Partialzustandssummen  $T_n(\cdot, \cdot)$  weist neben der Basiskonfiguration  $T_n(1, 1)$  noch fünf weitere auf. Dies führt zu fünf Rekursionsformeln.

$$\begin{aligned}
w_{n+1} = & e^{-K-L} \frac{1}{N} \left( w_n^2 + e^{-2M} [x_n^2 + \bar{q}y_n^2 + 2w_n(x_n + \bar{q}y_n) + 3(q - \bar{q} - 2)w_n^2] + \right. \\
& + e^{-3M} [2\bar{q}x_ny_n + 2(q - \bar{q} - 2)w_n(x_n + \bar{q}y_n) + \\
& \left. + 2 \binom{q - \bar{q} - 2}{2} w_n^2 + \bar{q}(\bar{q} - 1)y_n^2] \right) \quad (6.106)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_{n+1} = & e^{-L} \frac{1}{N} \left( x_n^2 + e^{-2M} [\bar{q}(y_n^2 + 2x_ny_n) + (q - \bar{q} - 1)w_n(w_n + 2x_n)] + \right. \\
& \left. e^{-3M} [\bar{q}(\bar{q} - 1)y_n^2 + 2w_n(\bar{q}(q - \bar{q} - 1)y_n + \binom{q - \bar{q} - 1}{2} w_n)] \right) \quad (6.107)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y_{n+1} = & e^{-K} \frac{1}{N} \left( z_n^2 + e^{-2M} [1 + 2z_n + 3z_n^2(q - \bar{q} - 1) + (\bar{q} - 1)v_n(v_n + 2z_n)] + \right. \\
& e^{-3M} [2z_n((q - \bar{q} - 1) + \binom{q - \bar{q} - 1}{2} z_n) + \\
& \left. + (\bar{q} - 1)v_n[2 + (\bar{q} - 2)v_n + 2(q - \bar{q} - 1)z_n] \right) \quad (6.108)
\end{aligned}$$

$$z_{n+1} = e^{-K-L} \frac{1}{N} \left( y_n^2 + [x_n^2 + 2x_ny_n + 3(\bar{q} - 1)y_n^2 + (q - \bar{q} - 1) \times \right.$$

$$\begin{aligned} & \times w_n(w_n + 2y_n)]e^{-2M} + [(\bar{q} - 1)y_n((\bar{q} - 2)y_n + 2x_n + \\ & + 2(q - \bar{q} - 1)w_n) + (q - \bar{q} - 1)w_n(2x_n + \\ & + (q - \bar{q} - 2)w_n)]e^{-3M} \end{aligned} \quad (6.109)$$

mit

$$\begin{aligned} N = & 1 + e^{-2M}[(\bar{q} - 1)v_n(v_n + 2) + (q - \bar{q})(z_n^2 + 2z_n)] + \\ & + e^{-3M}\left[2\binom{\bar{q} - 1}{2}v_n^2 + (q - \bar{q})(2(\bar{q} - 1)v_n + (q - \bar{q} - 1)z_n)z_n\right] \end{aligned} \quad (6.110)$$

Bevor wir zu den Simulationsergebnissen kommen, sei nur kurz angemerkt, daß das in Kapitel 5 untersuchte reskalierte Chaos des  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells bei von Null an stärker werdender Übernächst-Nachbar-Kopplung zunehmend zu einem Fixpunkt verkümmert. Im Übergangsbereich entstehen wie beim Perkalotionslimes (siehe hierzu Anhang F) geschlossene Ellipsen, die typisch für höherdimensionale chaotische Systeme sind. Auch hier treten in kleineren *quot*-Bereichen Bifurkationskaskaden nach Feigenbaum auf, die aber auch bei Änderung der Parameter der numerischen Gewinnung stabil blieben.

### 6.4.2 Phasendiagramme für $q \geq 3, \bar{q}$ ganzzahlig bei $K > 0$ , $K < 0$ und Simulationsergebnisse

Es werden für  $q \geq 3$  die Fälle  $K > 0$  und  $K < 0$  aufgrund des Wegfalls der Isingsymmetrie im Folgenden getrennt behandelt. Zunächst sei aber angemerkt, daß für verschiedene Werte von  $\bar{q} \in \mathbb{N}$  der genaue Verlauf der Bifurkationsdiagramme variiert, die Phasengrenzen und die Grenzen der Fenster der Zyklen endlicher Länge aber identisch sind, wie auch die Länge dieser Zyklen. So können wir uns bei Konzentration auf physikalisch motivierte Modelle auf den Fall  $\bar{q} = 1$  konzentrieren. Bei diesem hat Abbildung 6.2 wieder Gültigkeit und wir sehen an ihr, daß wir vier Ordnungsparameter erhalten. Somit werden in den folgenden Bifurkationsdiagrammen die Variablen  $x_1, x_2, x_3$  und  $x_4$  gezeigt werden, die zuvor mit  $w, x, y$  und  $z$  bezeichnet wurden.

Es ist als Demonstrationsbeispiel  $q = 3$  mit ferromagnetische NN-Kopplung gewählt. Sämtliche Phänomene bleiben aber bei  $q = 4$  oder  $q = 5$  und antiferromagnetischer Nächst-Nachbar-Kopplung erhalten.

#### Ferromagnetische Nächst-Nachbar-Kopplung

In den Simulationen ist bei sehr hohen Temperaturen die paramagnetische Phase zu finden. Beim Absenken der Temperatur findet ein abrupter Wechsel zum

schwachen Chaos statt. Bei noch kleineren Temperaturen wächst der Liapunov-Exponent, der hier exakt Null ist, langsam an und zeigt das Auftreten vollständig ausgebildeten Chaos mit Bifurkationsübergang. Die Erklärung für schwaches Chaos und den kontinuierlichen Übergang zum klassischen Chaos wird in diesem Kapitel gegeben.

Die Ursache für den verschwindenden Liapunov-Exponenten und damit für das Auftreten vom schwachen Chaos ist in der Quasiperiodizität der Iterationsabbildung zu suchen und wird in den Abbildungen 6.9 bis 6.12 veranschaulicht. Hier liegt ein räumlich eng begrenzter Attraktor im vierdimensionalen Phasenraum vor, der bei Projektion auf die sechs möglichen Ebenen "glatte Ellipsen" ergibt. Dies zeigt Abbildung 6.9. Verbindet man aufeinanderfolgende Iterationspunkte miteinander zeigt sich, daß deren Abstand in einem kleinen Intervall variiert. Den Grund hierfür sieht man leicht, wenn man die "Kaustik", also den Bereich, der von den Verbindungslinien ausgespart wird, in den Attraktor einzeichnet (vergl. Abbildung 6.10). Sämtliche Linien zwischen aufeinanderfolgenden Iterationspunkten berühren diese Kaustik. Der Attraktor, dessen Ausdehnung in allen Raumrichtungen die gleichen Größenordnung hat, legt somit zusammen mit der Kaustik die Iterationspunkte fest. Durch die Geometrie beider Gebilde ergibt sich ein kleines Intervall, in dem der Abstand  $\Delta x$  liegt. Dies wird in Abbildung 6.10 demonstriert.

Die Abfolge der Iterationspunkte füllt den Attraktor gleichmäßig aus, was Abbildung 6.11 zeigt. Hierbei kommen zwei Iterationspunkte nie aufeinander zu liegen, sondern füllen die Raumkurve schließlich vollständig und gleichmäßig aus. Dies führt zu der Erscheinung, daß in den Bifurkationsdiagrammen im Bereich des schwachen Chaos ein begrenztes Intervall ohne innere Struktur geschwärzt wird. Diese Abbildung ist ein erster Hinweis auf Quasiperiodizität.

Einen deutlichen Beleg für Quasiperiodizität liefert Abbildung 6.12. Hier zeigt sich, daß nach einer anfänglichen "Einschwingphase" der Abstand in Abhängigkeit von der Iterationszahl eine nahezu periodische Funktion ist und ein im Laufe der Iterationen konstantes Intervall ausfüllt. Der Abstand ändert seinen anfänglichen Wert  $\Delta x(0)$  kaum. Diese sehr geringe Variation des Abstandes zweier eng benachbarter Startpunkte führt zu dem beobachteten verschwindenden Liapunov-Exponenten.

Bei den Fenstern innerhalb des schwachen Chaos, das seine Ursache in der Quasiperiodizität der Iterationsabbildung hat, schließen sich die Iterierten zu einem Zyklus, der zu einem negativen Liapunov-Exponenten führt. Es findet also ein temperaturabhängiger Wechsel von Quasiperiodizität und Periodizität statt.

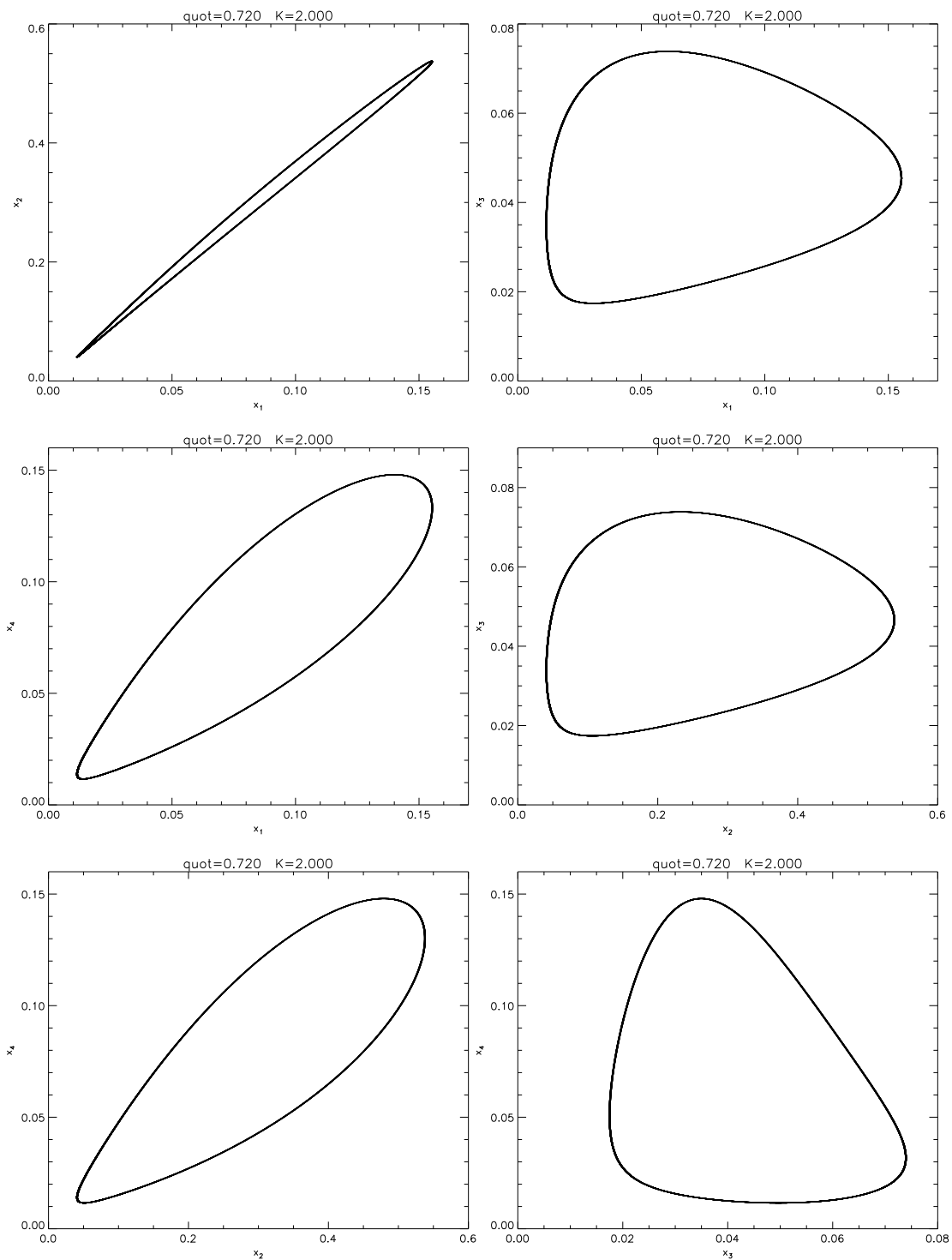


Abbildung 6.9: Bei  $q = 0.72$  und  $K = 2.0$  ist laut Bifurkationsdiagramm 6.20 schwaches Chaos mit verschwindenden Liapunov-Exponenten zu finden. In den obigen Abbildungen sind die Iterierten eines beliebigen Startpunktes zu sehen. Sie verlaufen im Phasenraum nach einer Transientenregion auf dem zu sehenden geschlossenen, begrenzten Attraktor und füllen diesen sehr gleichmäßig aus. Dies führt in den Bifurkationsdiagrammen zu einer gleichmäßigen Schwärzung eines ganzen Intervalls.



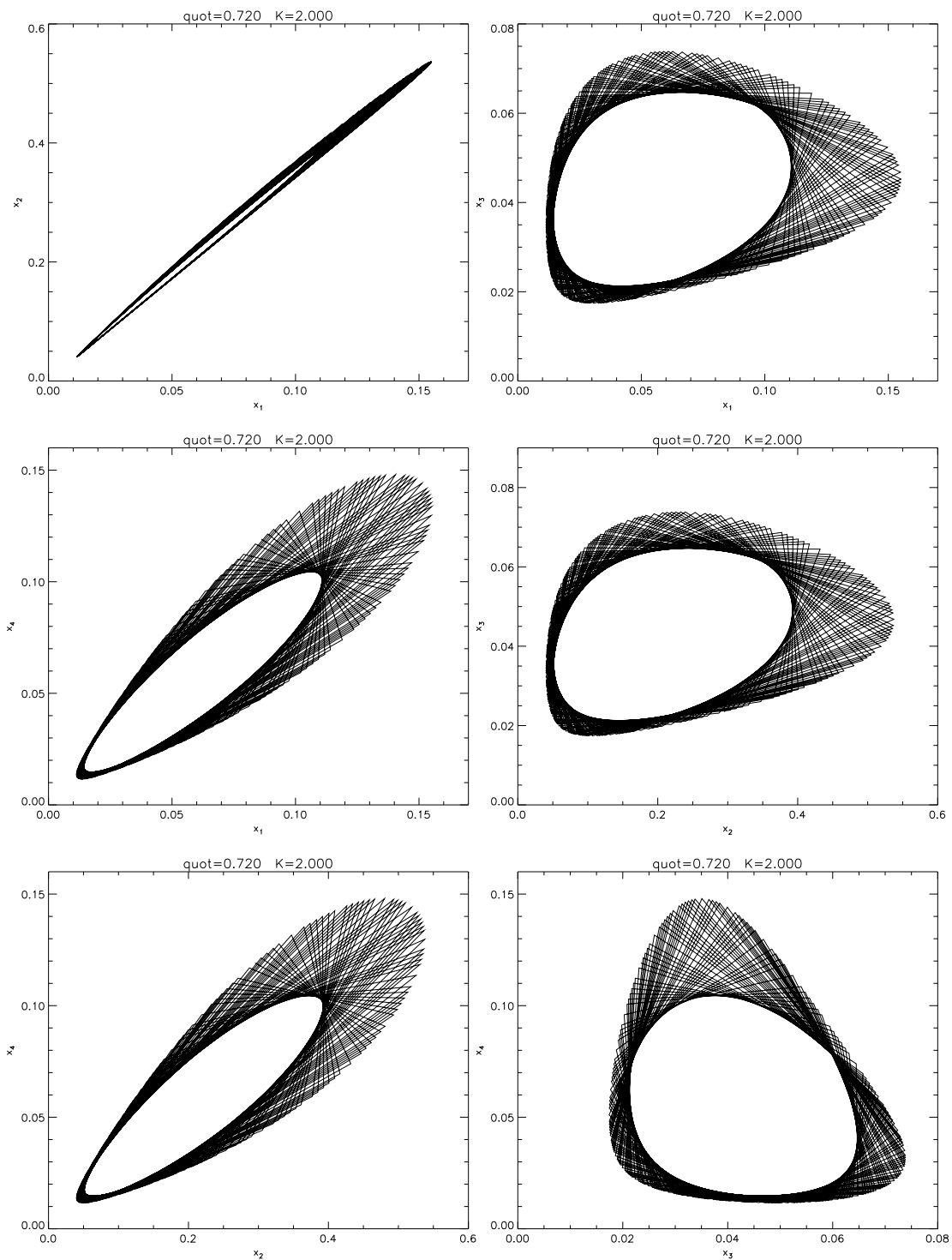


Abbildung 6.10: Verbindet man aufeinanderfolgende Iterationspunkte, erhält man die “Kaustik”, einen ausgesparten Bereich im Inneren des Attraktors. Bei einer geringen Iterationsanzahl von  $N = 200$  ist zu erkennen, daß der Abstand eng benachbarter Startpunkte im Laufe der Iterationen auf ein kleines Intervall beschränkt ist. Dies wird nochmals explizit in Abbildung 6.12 gezeigt werden.

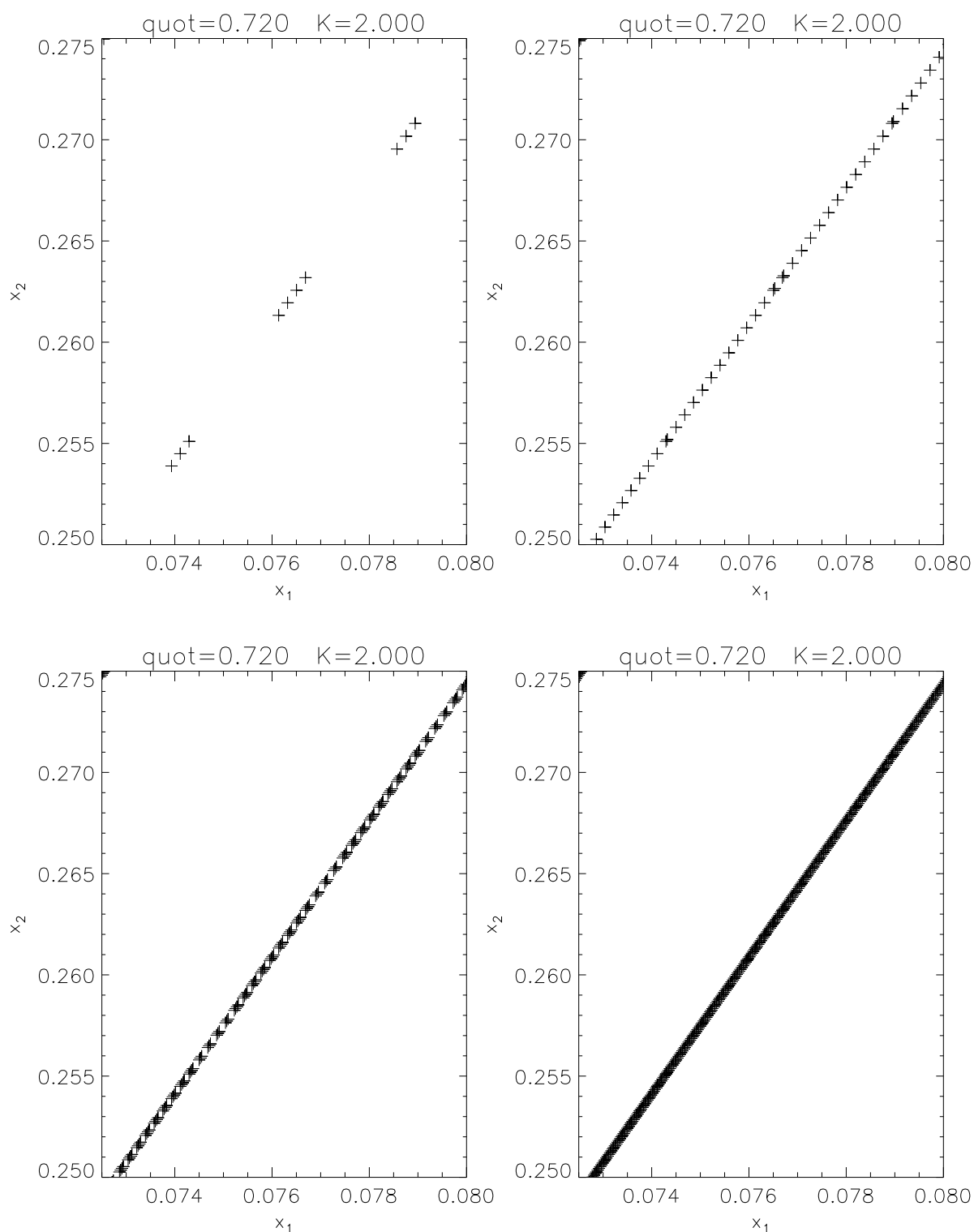


Abbildung 6.11: Die Abbildungen machen die Quasiperiodizität plausibel, die zu dem verschwindenden Liapunov-Exponenten führt. Zu sehen ist ein kleiner Ausschnitt des Attraktors aus Abbildung 6.9. Es werden verschiedene Iterationsanzahlen der Rekursionsabbildungen gezeigt: links oben  $N = 800$ , rechts oben  $N = 3500$ , links unten  $N = 12000$  und rechts unten  $N = 24000$ . Zu erkennen ist, daß die Iterationspunkte die Projektion des vierdimensionalen Attraktors immer dichter besetzen. Die Frage, ob es sich hierbei um Periodizität oder Quasiperiodizität handelt, kann aber mit bloßem Auge nicht entschieden werden. Erst die Betrachtung des Abstandes eng benachbarter Iterationspunkte (Abbildung 6.12) und des Liapunov-Exponenten  $L$  zeigt, daß es sich nicht um einen endlichen Zyklus handeln kann, da in diesem Fall  $L < 0$  sein müßte.

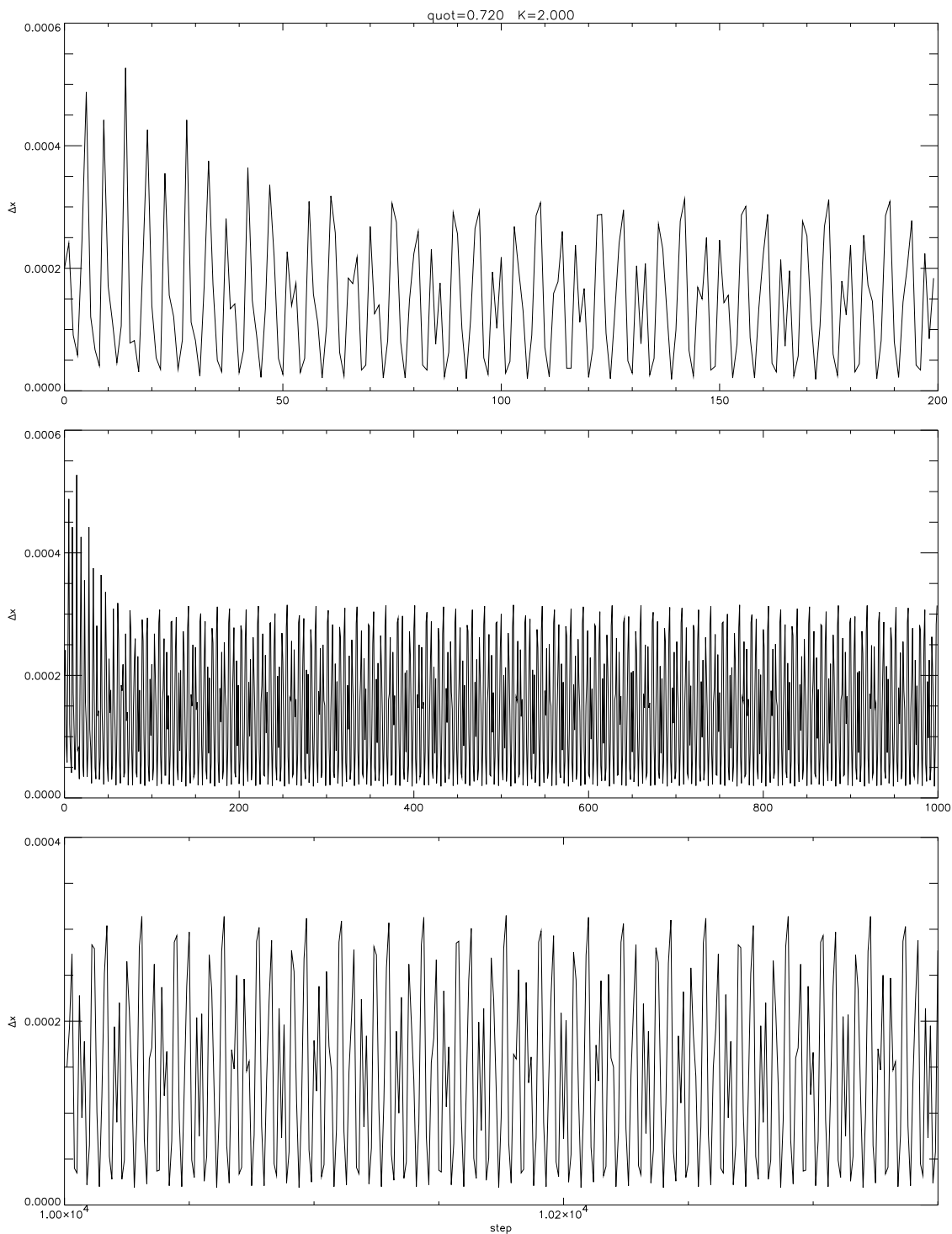


Abbildung 6.12: Die Abbildungen zeigen den Verlauf des Abstandes zweier eng benachbarter Startpunkte mit der Iterationszahl "step". Die Punkte haben anfänglich eine euklidischen Abstand von  $\Delta x(0) = 0.0002$ . In der oberen Abbildung sind die ersten 200 Iterationsschritte zu sehen, in der mittleren die ersten 1000 Schritte. Die unteren Abbildung zeigt schließlich den Verlauf von 350 Iterationen nach einem "Einschwingphase" von 10000 Schritten. Alle Abbildungen zeigen, daß der Abstand eng benachbarter Startpunkte in einem kleinen Intervall gemessen an der Skala von  $\Delta x(0)$  um diesen Anfangswert fluktuiert. Dies zeigt den quasiperiodischen Charakter der Iterationsabbildung bei diesem  $quot$ - und  $K$ -Wert.

Die folgende Abbildung veranschaulicht den kontinuierlichen Übergang von Quasiperiodizität zum Chaos. Dieser wird durch die Änderung der Form des vierdimensionalen Attraktors erwirkt, dessen Projektion auf die  $x_3$ - $x_2$ -Ebene in Abbildung 6.13 zu sehen ist. Er ist auch bei größeren Werten für  $K$  eine geschlossene Kurve, die von den Iterationspunkten gebildet wird. Er verliert aber in den Projektionen seine ovalförmige Gestalt mit etwa gleichen Abmessungen in alle Raumrichtungen und wird lokal stark gedehnt bzw. gestaucht. Die Iterationspunkte liegen nicht mehr gleichmäßig auf ihm verteilt, sondern bilden stark und dünn frequentierte Bereiche. Dies ist in der Abbildung durch die Stärke der Färbung zu erkennen und führt zu einer starken Variation eines zunächst kleinen Abstandes (vgl. Abbildung 6.14).

Im Übergangsbereich von schwachen zum klassischen Chaos sind Bifurkationen gefolgt von inversen Bifurkationen zu finden, die sich somit zu geschlossenen Ellipsen formieren. Diese Erscheinung ist bei höherdimensionalen chaotischen Systemen keine Seltenheit und ist zudem aus der Theorie der allgemeinen Kreisabbildung

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n + \Omega - K g(\Theta_n) \equiv f(\Theta_n) \quad (6.111)$$

bekannt (Argyris et al., 1994). Hier sind  $K$  und  $\Omega$  Systemparameter und  $g(\Theta_n)$  bezeichnet eine periodische Funktion der Periode 1. Wegen  $f(\Theta + 1) = 1 + f(\Theta)$  kann man  $f(\Theta)(\text{mod}1)$  als Abbildung des Kreises mit  $0 \leq \Theta < 1$  auffassen.

In diesem Bereich ist auch hartes Chaos zu finden, das keinen Bifurkationsübergang aufweist. Der Versuch, in einem noch erheblich kleineren Temperaturintervall, als es in der Abbildung 6.23 zu sehen ist, Bifurkationen zu finden, wurde unternommen ohne daß welche zu finden waren. Zudem lassen die Skalen der bisher beobachteten Bifurkationen diese Möglichkeit als unwahrscheinlich erscheinen.

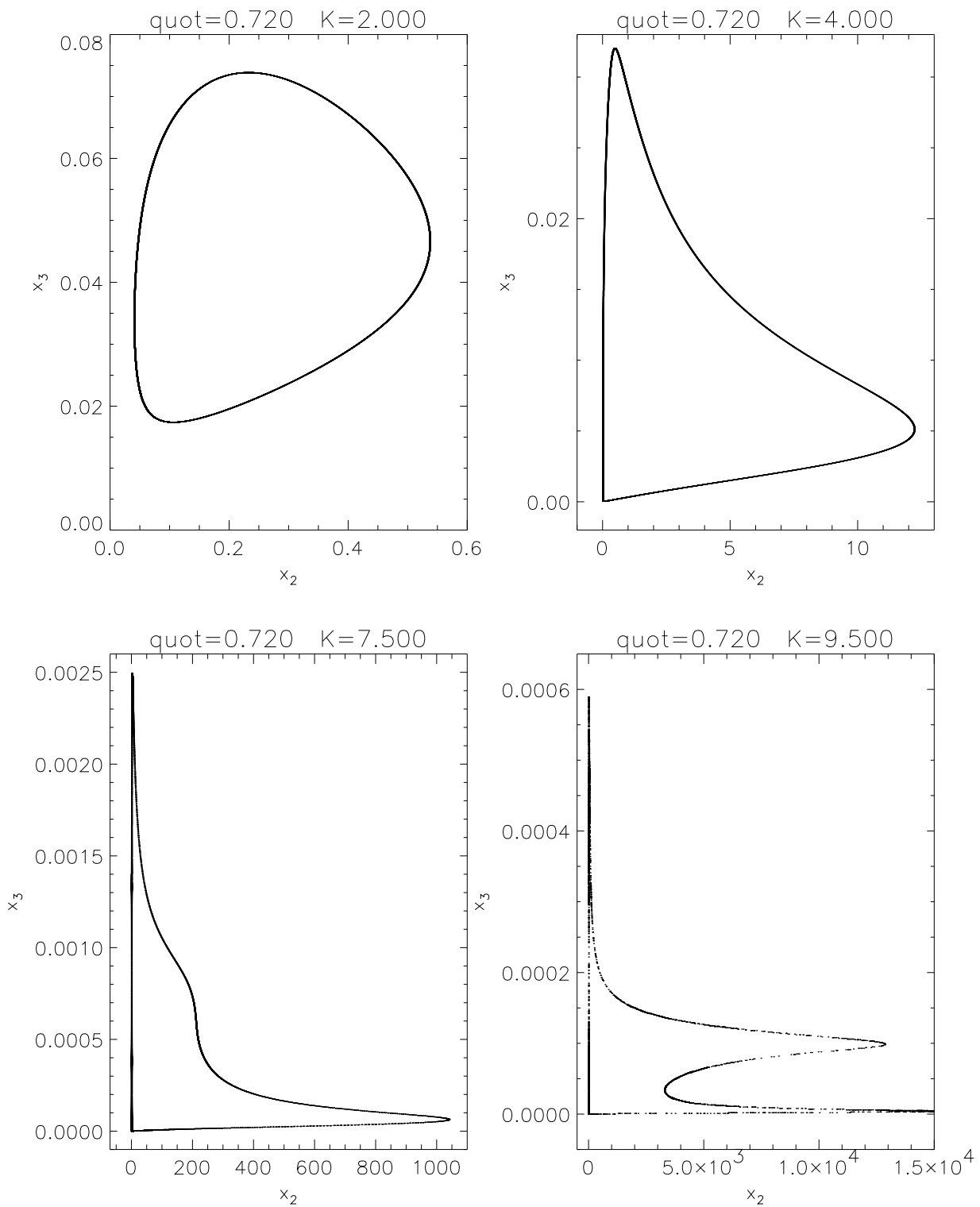


Abbildung 6.13: Der bergang von Quasiperiodizitat zu Chaos ist in den Abbildungen exemplarisch an der Projektion des Attraktors auf die  $x_3 - x_2$ -Ebene dargestellt. Bei hohen Temperaturen hat er in jeder Projektion eine ovalformige Gestalt (siehe Abbildung 6.9). Mit Abnahme der Temperatur entstehen diverse lokale Streckungen, welche die Periodizitat zerstoren. Dies fuhrt zu Bereichen des Attraktors, die viel und solchen, die wenig frequentiert sind. Durch die Groe dieser “Ausbuchtungen” konnen eng benachbarte Startpunkte ihren Abstand im Laufe der Iteration um Zehnerpotenzen vergroern. Der ungleichmaige Abstand aufeinanderfolgender Punkte wird in Abbildung 6.16 nochmals durch die variierende Linienlange veranschaulicht.

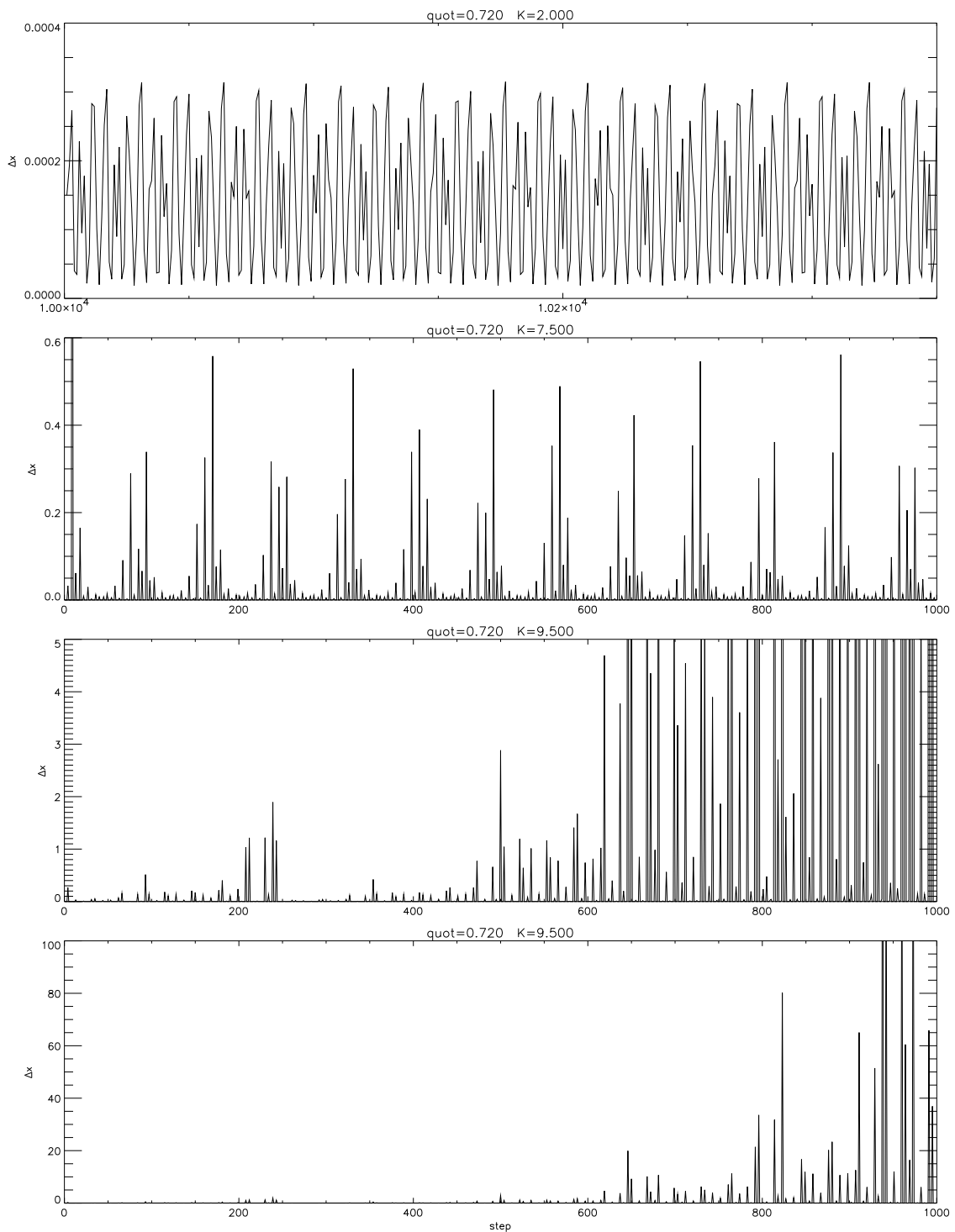


Abbildung 6.14: Dargestellt ist die Entwicklung des Abstand zweier Startpunkte mit den Iterationen. Bei der oberen Abbildung ( $K = 2.0$ ) befindet sich das System im quasiperiodischen, in den beiden unteren ( $K = 9.5$ ) im chaotischen Bereich. Die mittlere ( $K = 7.5$ ) zeigt den kontinuierlichen Übergang. Bei allen Teilbildern ist der anfänglich Abstand  $\Delta x(0) = 0.0002$ . Während bei  $K = 2.0$  seine Größe nur in einem kleinen Intervall um  $\Delta x(0)$  variiert, wächst er bei  $K = 7.5$  teilweise deutlich um etwa zwei Zehnerpotenzen an. Bei  $K = 9.5$  wird der Iterationsverlauf des Abstandes auf zwei verschiedenen Skalen dargestellt. Es ist ein unperiodisches, exponentielles Anwachsen des Abstandes festzustellen.

Die folgenden beiden Abbildungen zeigen den Attraktor im chaotischen Bereich. Er behält hier seine geschlossene Form im vierdimensionalen Phasenraum, wird aber lokal stark gestreckt (siehe Abbildung 6.15). Dies bewirkt, daß es zu Häufungs- und von den Iterationspunkten dünn besetzten Bereichen kommt (siehe Abbildung 6.16). Hierdurch ist es möglich, daß zunächst eng benachbarte Startpunkte im Verlauf der Iterationen exponentiell separieren und so zu einem positiven Liapunov-Exponent führen, den wir in den noch folgenden Bifurkationsdiagrammen bei niedrigen Temperaturen sehen.

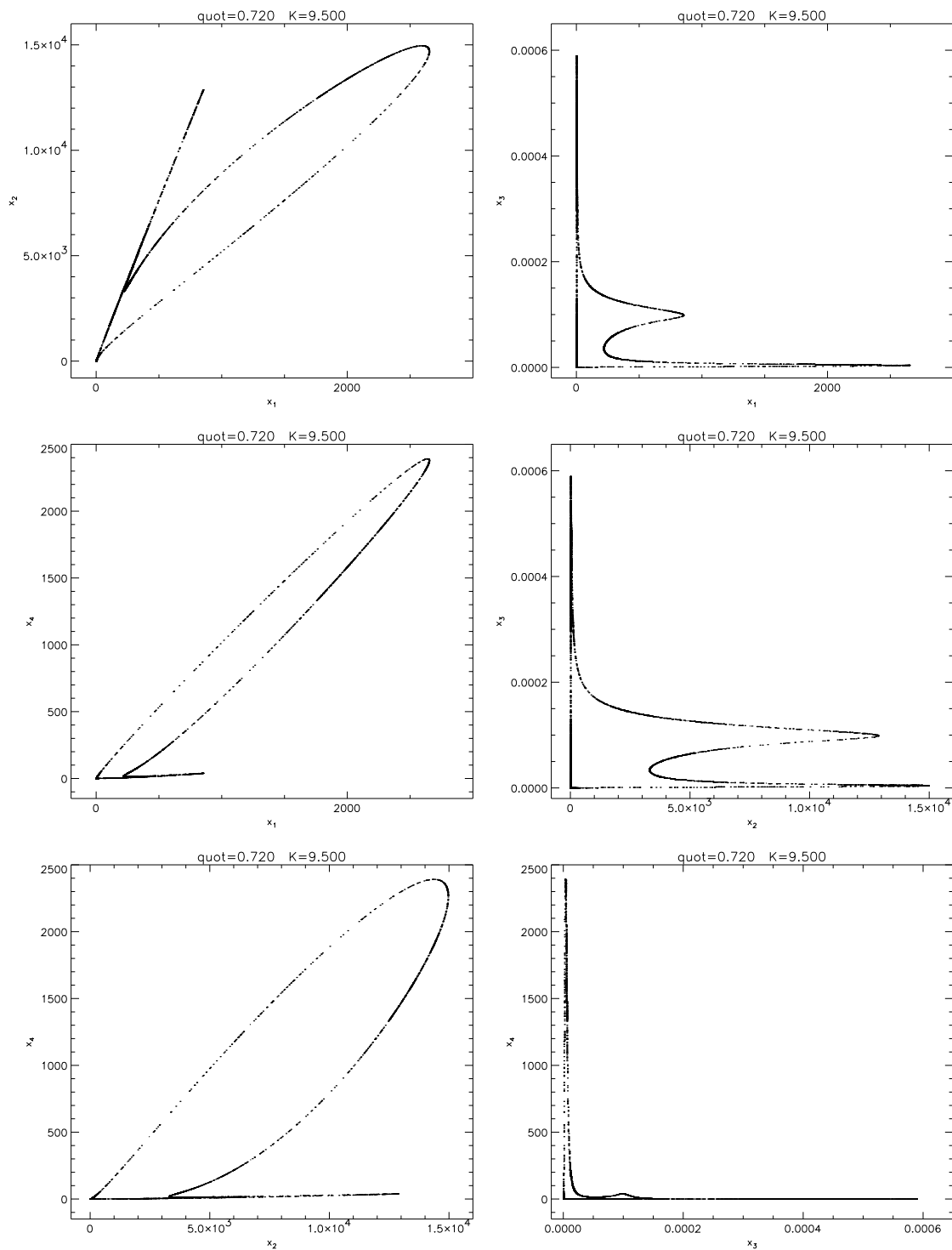


Abbildung 6.15: Die Abbildung zeigt den Attraktor bei  $q = 0.72$  und  $K = 9.5$ . Hier ist nach Abbildung 6.21 der Liapunov-Exponent positiv. Der Attraktor ist weiterhin eine geschlossene Kurve im vierdimensionalen Phasenraum. Er hat aber bei den Projektionen seine Ovalform verloren und große lokale Streckungen wie auch Stauchungen erfahren. Hierdurch wird er nicht mehr gleichmäßig von den Iterationspunkten überdeckt und zunächst eng benachbarte Startpunkte können exponentiell separieren. Bei anwachsendem  $K$  werden diese “Verformungen” sehr schnell größer und lassen den Liapunov-Exponenten weiter anwachsen.



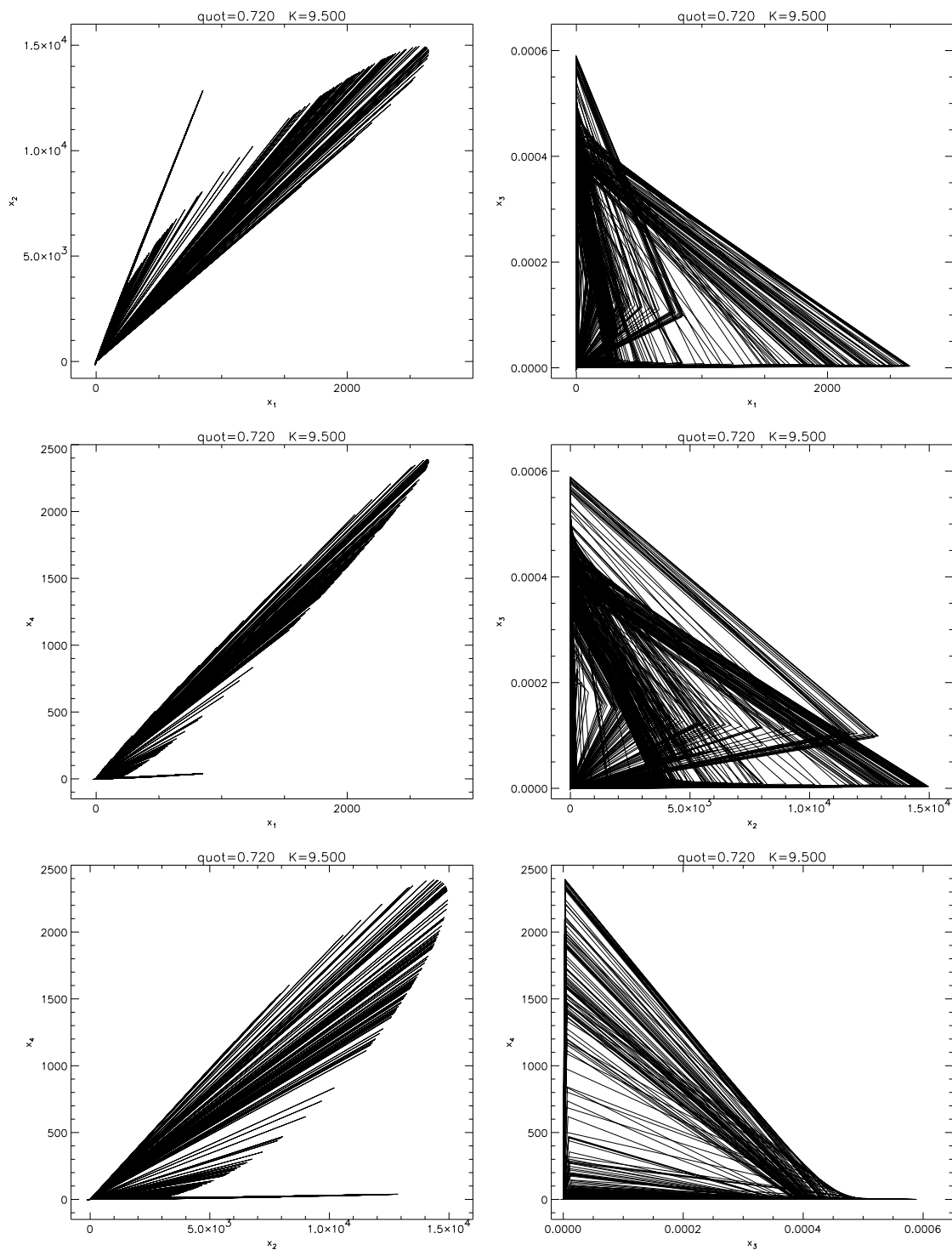


Abbildung 6.16: In der Abbildung sind aufeinander folgende Iterationspunkte miteinander verbunden. Im Gegensatz zu Abbildung 6.10 ist keine Kaustik zu erkennen. Es ist zu sehen, daß der Attraktor im Vergleich zum quasiperiodischen Bereich nicht mehr gleichmäßig von den Iterationspunkten besetzt wird.

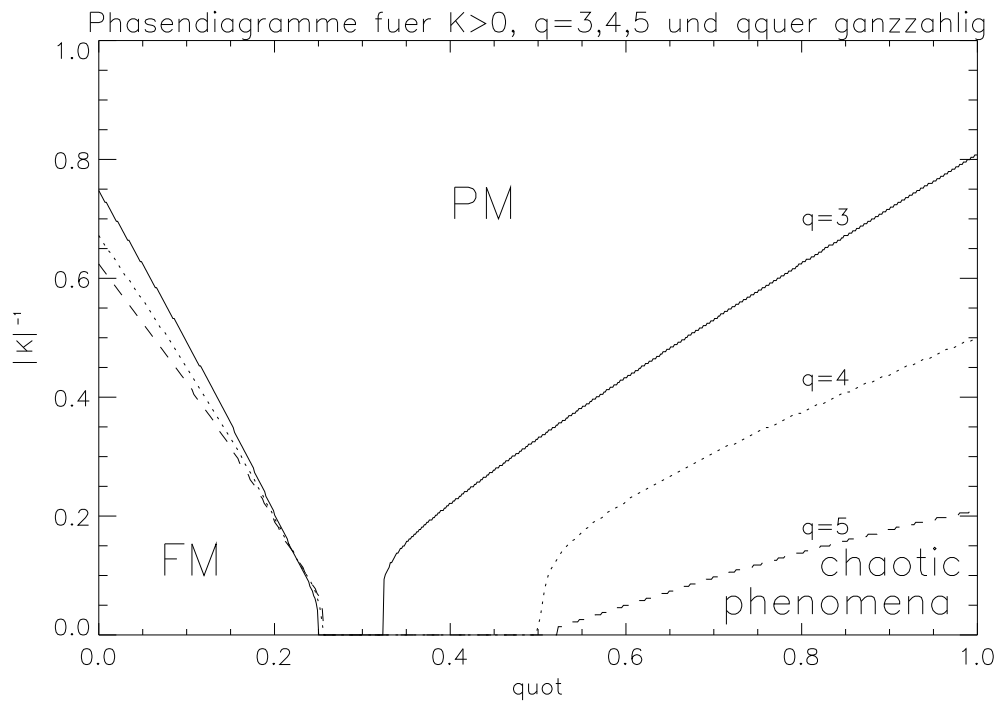


Abbildung 6.17: Phasendiagramm im Fall ferromagnetischer NN-Kopplung für  $q = 3, 4, 5$ . Die eingezeichnete Phasengrenze erhält man durch die Begrenzung der paramagnetischen Phase. In allen Fällen wechselt am Temperaturnullpunkt die ferromagnetische Phase bei  $K = 4M$  zur paramagnetischen Phase.

Bevor einige Bifurkationsdiagramme folgen, wird noch das erhaltene Phasendiagramm im ferromagnetischen Fall gezeigt. In ihm konnte die Phasengrenze zwischen schwachen und hartem Chaos nicht eingetragen werden, da durch den aufgezeigten kontinuierlichen Übergang eine numerische Bestimmung sehr schwer und fehleranfällig war.

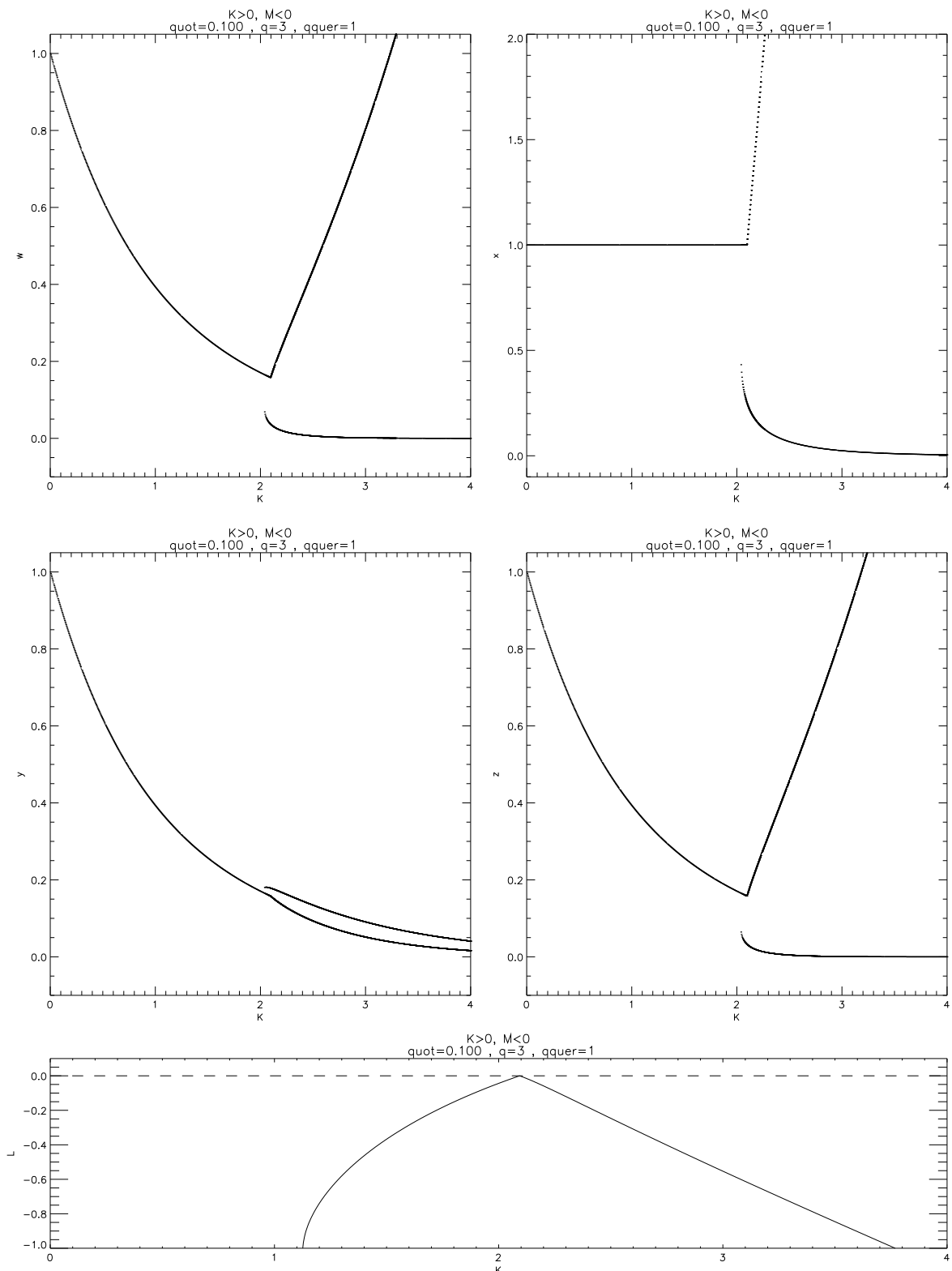


Abbildung 6.18: Der Übergang von der paramagnetischen bei hohen Temperaturen in die ferromagnetische Phase bei  $q = 0.1$ ,  $q = 3$  und  $\bar{q} = 1$ . Zu sehen sind wieder zwei entstehende Fixpunkte, von denen einer einen Phasenübergang zweiter, der andere einen erster Ordnung macht. Deutlich zu erkennen ist der Phasenübergang am Verlauf des Liapunov-Exponenten.

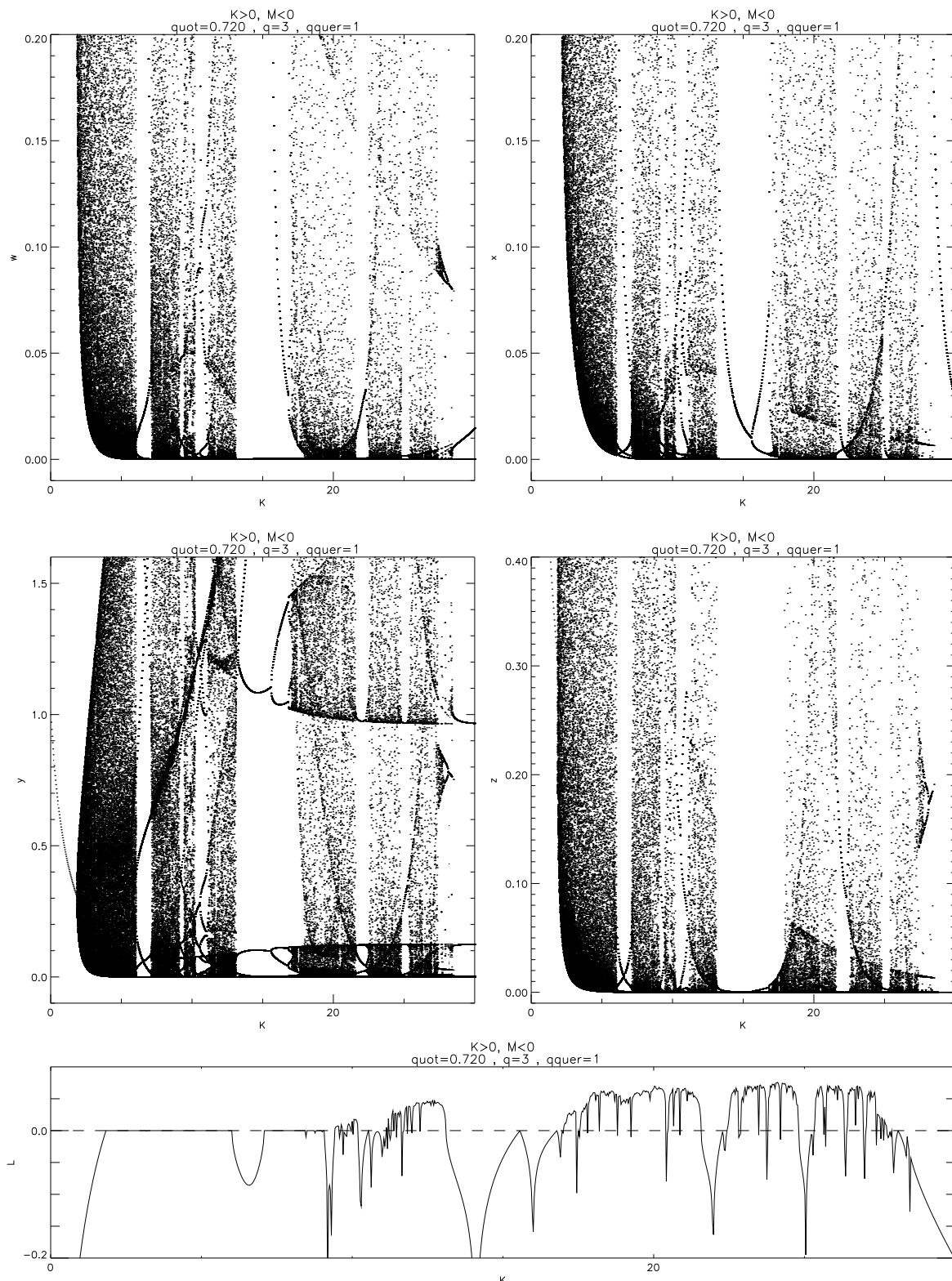


Abbildung 6.19: Bei  $q = 0.72$  ist bei hohen Temperaturen das unstrukturierte schwache Chaos ohne einen Übergang mit Bifurkationen zu finden. Dies ist bisher aus der Mathematik der Kreisabbildung bekannt (Argyris et al., 1994). - Dort wird das Phänomen des "schwachen Chaos" als "Quasiperiodizität" bezeichnet, während Zyklen endlicher Länge mit "Periodizität" bezeichnet werden. - Bei tiefen Temperaturen hingegen ist ein allmählicher Anstieg des Liapunov-Exponenten kombiniert mit dem Auftreten von Bifurkationen zu sehen. Die interessanten Temperaturintervalle werden in den nächsten Abbildungen genauer untersucht.

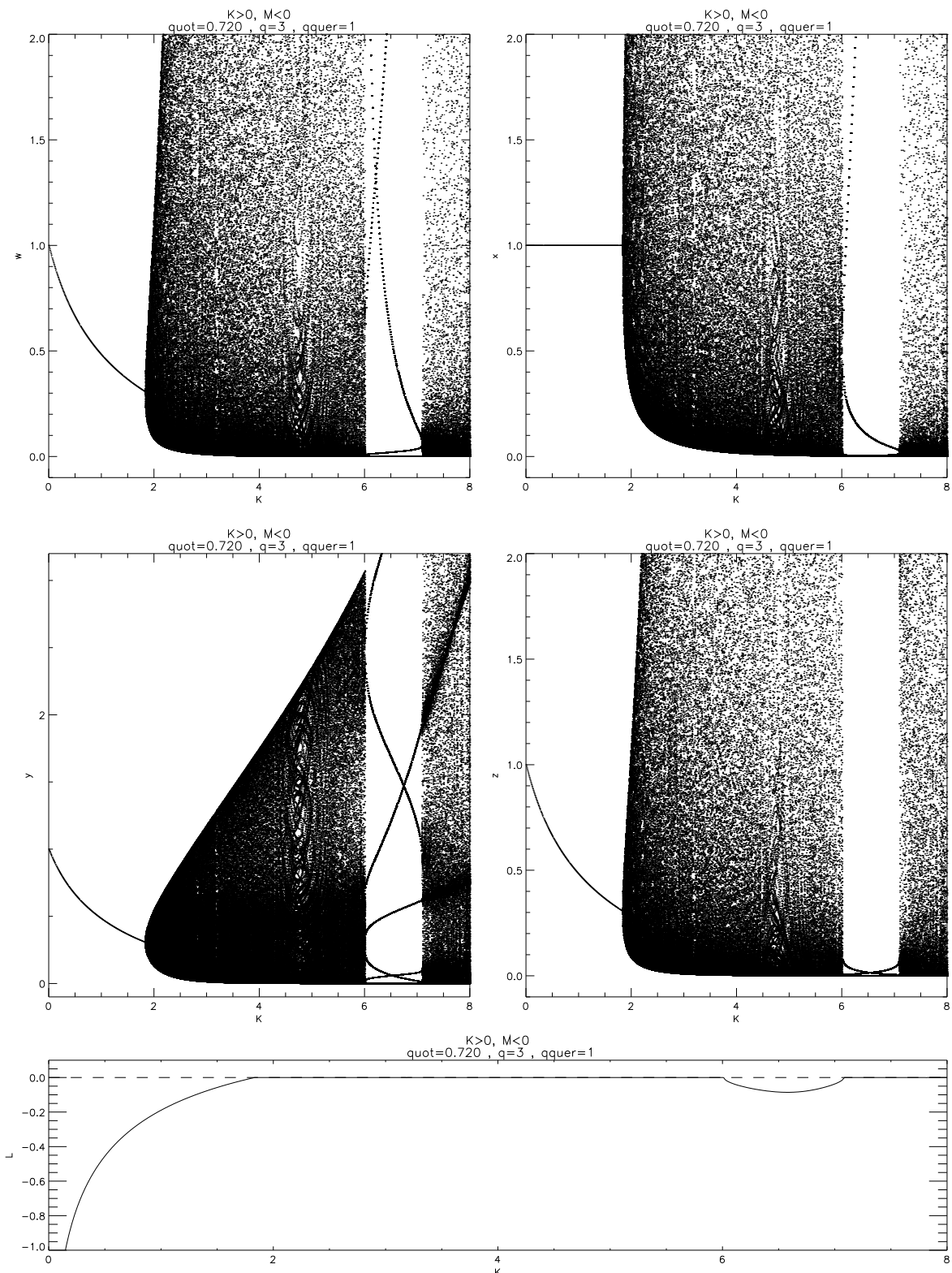


Abbildung 6.20: Das aus dem Isingfall bekannte weiche, unstrukturierte Chaos ist bei hohen Temperaturen auch im Fall  $q = 3$ ,  $\bar{q} = 1$  zu finden. Der Verlauf des Liapunov-Exponenten beim Fenstern endlicher Zyklenlänge, der sich deutlich von dem Verlauf bei Fenstern im Bereich des klassischen Chaos unterscheidet, ist ebenfalls von den Arnol'dschen Zungen, den periodischen Bereichen der Kreisabbildung, innerhalb eines quasiperiodischen Bereiches bekannt.

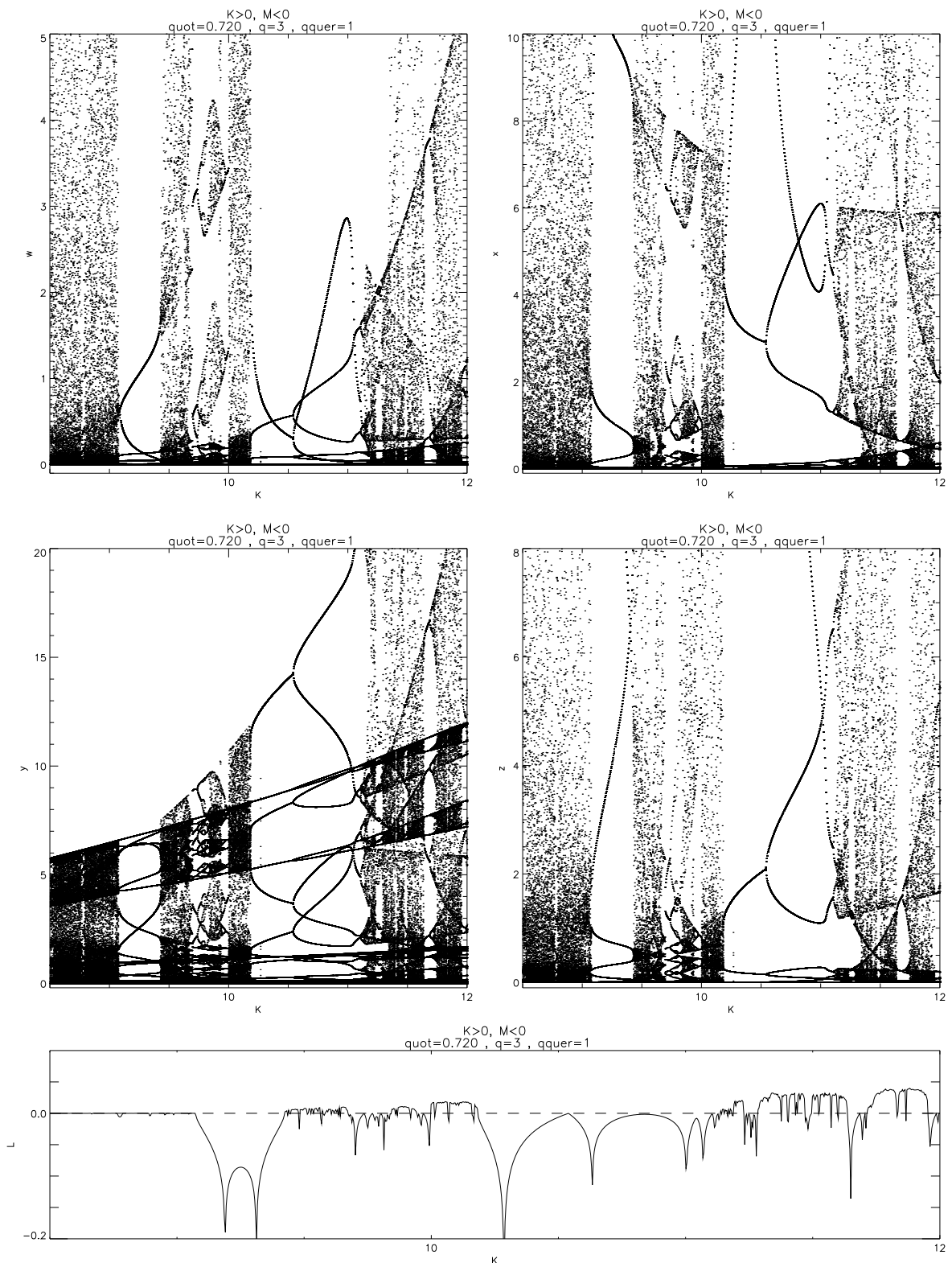


Abbildung 6.21: Links in der Abbildung bei kleinen  $K$ -Werten ist schwaches Chaos zu sehen, in der Mitte eine interessant anmutende bergangsregion der Auspragungsarten des Chaos, wahrend rechts deutlich Bifurkationen zu sehen sind. Der Liapunov-Exponent zeigt ebenfalls diesen Wechsel der Auspragungsform an.

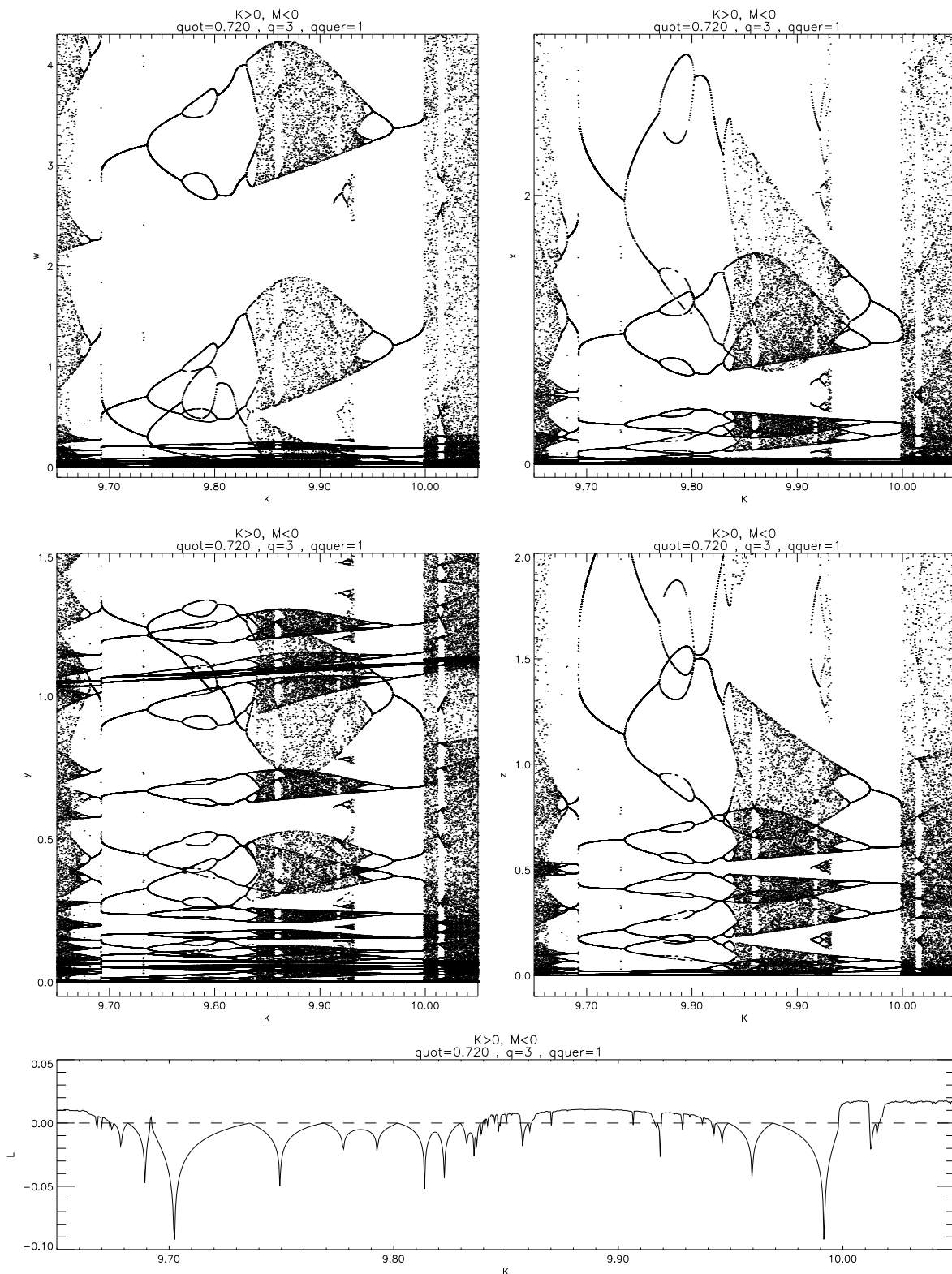


Abbildung 6.22: Die  $\ddot{U}$ bergangsregion zeigt eine Fulle an interessant wirkenden Fixpunktgebilden. Hier treten auch die erwahnten geschlossenen Ellipsen aus Bifurkationen und inversen Bifurkationen auf. Diese sind ebenfalls von der Kreisabbildung bekannt: hier kommt es zu Periodenverdopplung, wobei aus Symmetriegrunden jeweils entsprechende Ruckwartskaskaden auftreten und so zu geschlossenen Gebilden fuhren.

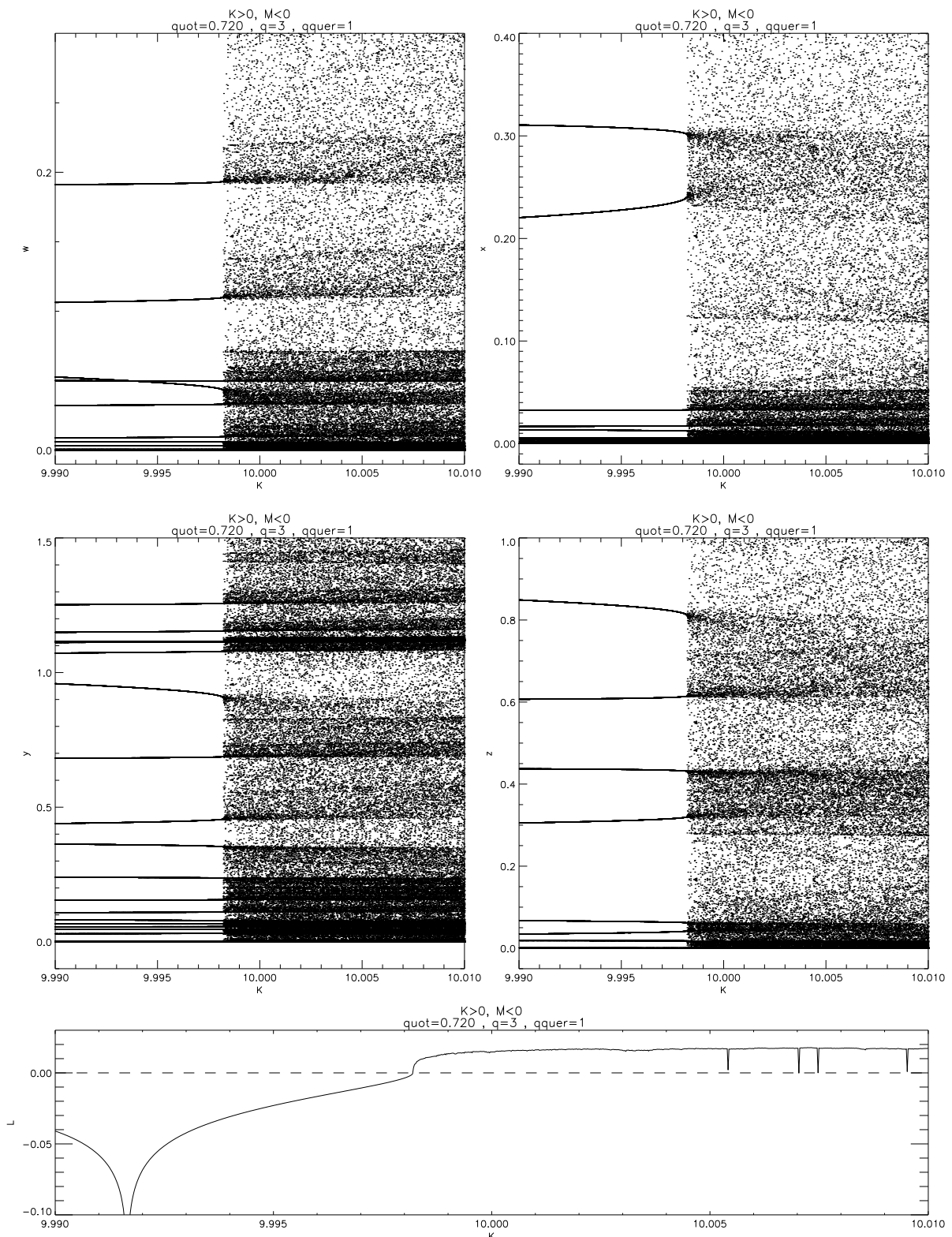


Abbildung 6.23: Ebenfalls in der  $\ddot{U}$ bergangsregion ist das Auftreten von klassischem Chaos zu beobachten (indiziert durch den Liapunov-Exponenten), das nicht durch den sonst  $\ddot{u}$ blichen Bifurkations $\ddot{u}$ bergang nach Feigenbaum eingeleitet wird. Dieses Ph $\ddot{a}$ nomen ist aus der Theorie der Kreisabbildung ebenfalls bekannt.



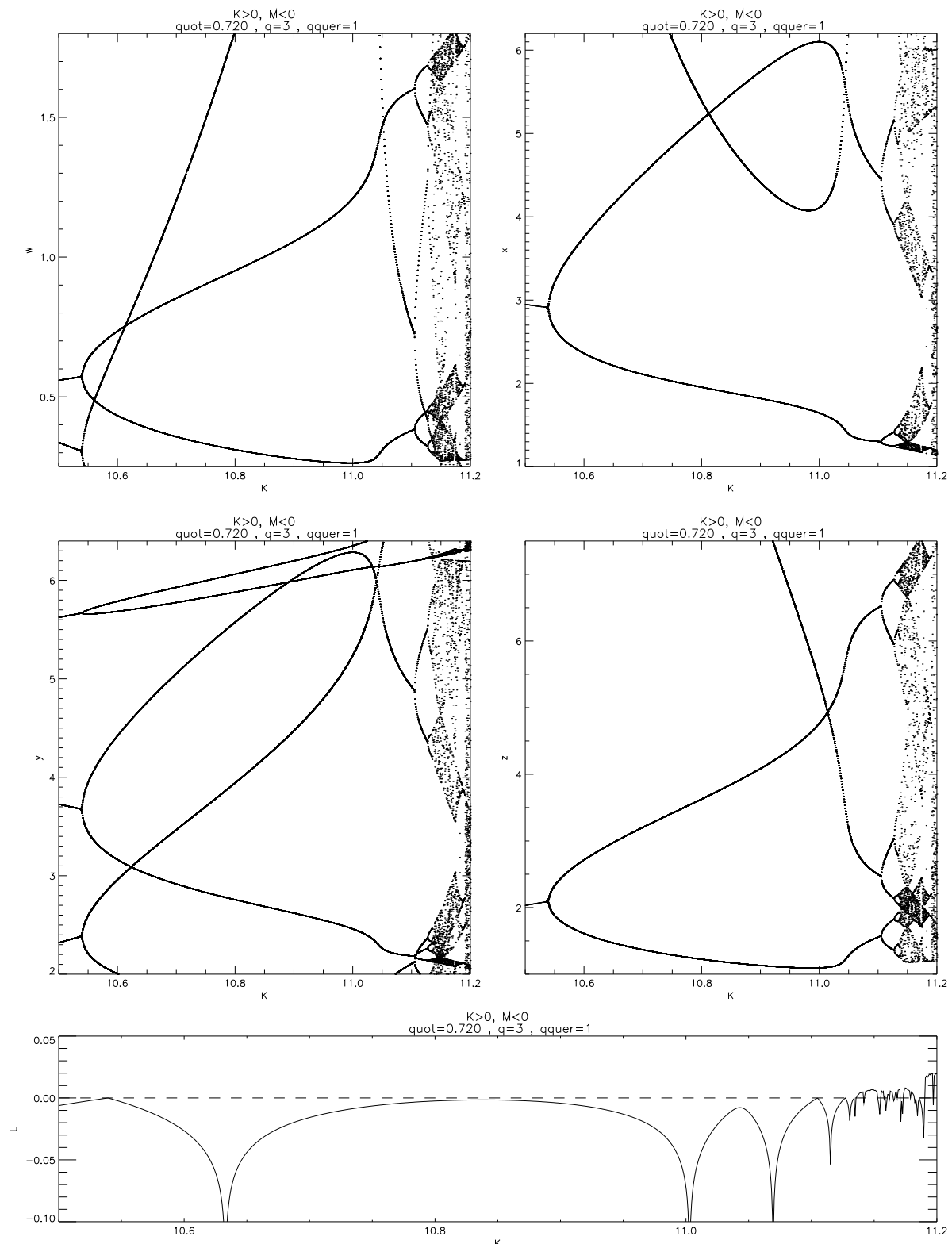


Abbildung 6.24: Bei hoheren Temperaturen weicht die Erscheinungsform der Bifurkationsbaume von dem bekannten Feigenbaum-Szenario stark ab. Die Bestimmung des kritischen Indizes  $\delta$  mit dem in Kapitel 5 verwendeten Verfahren der Ermittlung der Nullstellen des Liapunov-Exponenten ist in diesem hoherdimensionalen Fall in der Praxis aber sehr schwierig. Den Grund deutet der Verlauf des Liapunov-Exponenten in dieser Abbildung an: die starke Annaherung an die Null bei  $K = 10.85$  hat ihre Ursache nicht in einer Bifurkation, ist aber von einer solchen nur sehr schwer zu unterscheiden.

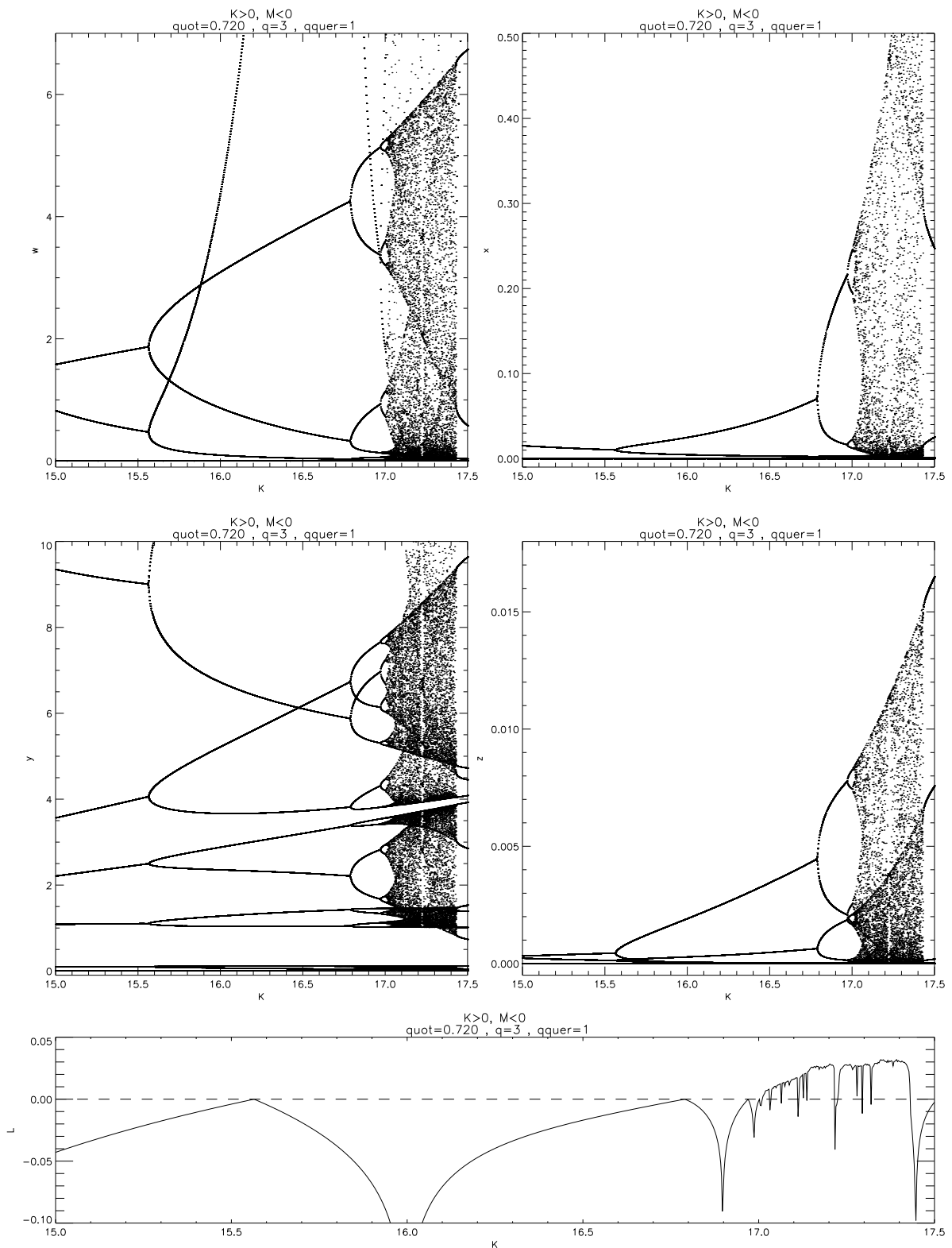


Abbildung 6.25: Bei niedrigeren Temperaturen nimmt die ahnlichkeit zu Feigenbaums Bifurkationskaskaden zu.

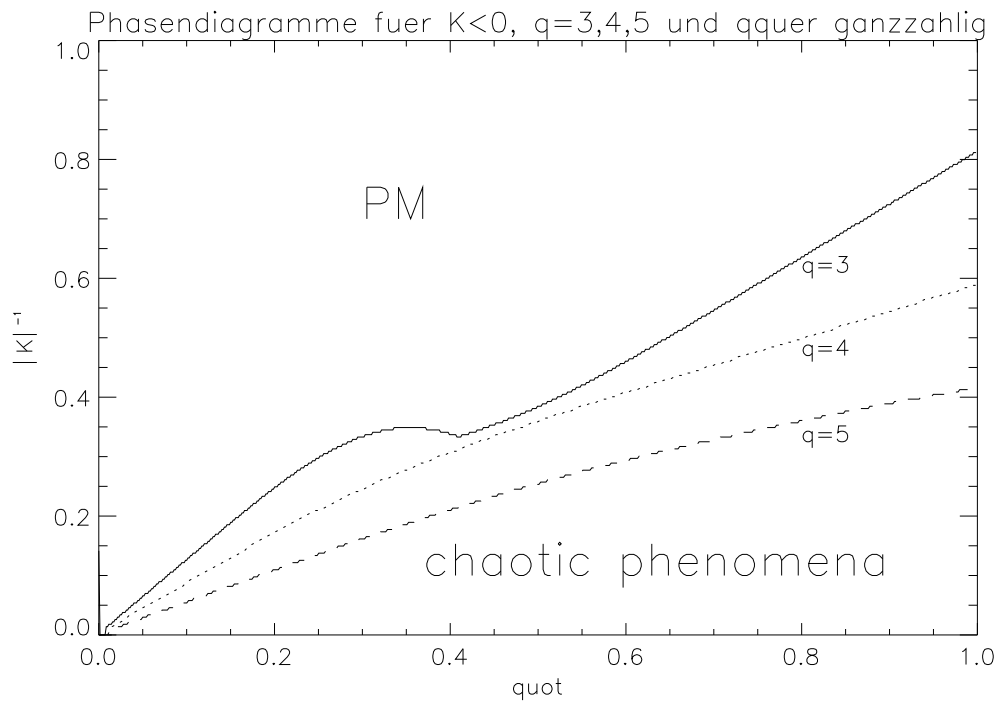


Abbildung 6.26: Phasendiagramm im Fall antiferromagnetischer NN-Kopplung für  $q = 3, 4, 5$ . In allen Fällen zeigen sich ausschließlich die Phasen des Paramagnetismus und die der chaotischen Phänomene. Diese besteht wieder aus Bereichen, in denen der Liapunov-Exponent Null ist und solchen, in denen Bifurkationen und ein positiver Liapunov-Exponent zu beobachten sind. Die Grenze wurde wieder durch die Begrenzung der paramagnetischen Phase gewonnen.

### Antiferromagnetische Nächst-Nachbar-Kopplung

Das Fixpunktdiagramm im antiferromagnetischen  $K$ -Bereich sieht vollkommen ähnlich zu dem ferromagnetischen aus. Im gezeigten Beispiel bei  $quot = 0.7$  sind bei größeren  $|K|$ -Werten ebenfalls Bifurkationen und ein positiver Liapunov-Exponent zu sehen. Das Phasendiagramm in diesem Fall zeigt die Abbildung 6.26.

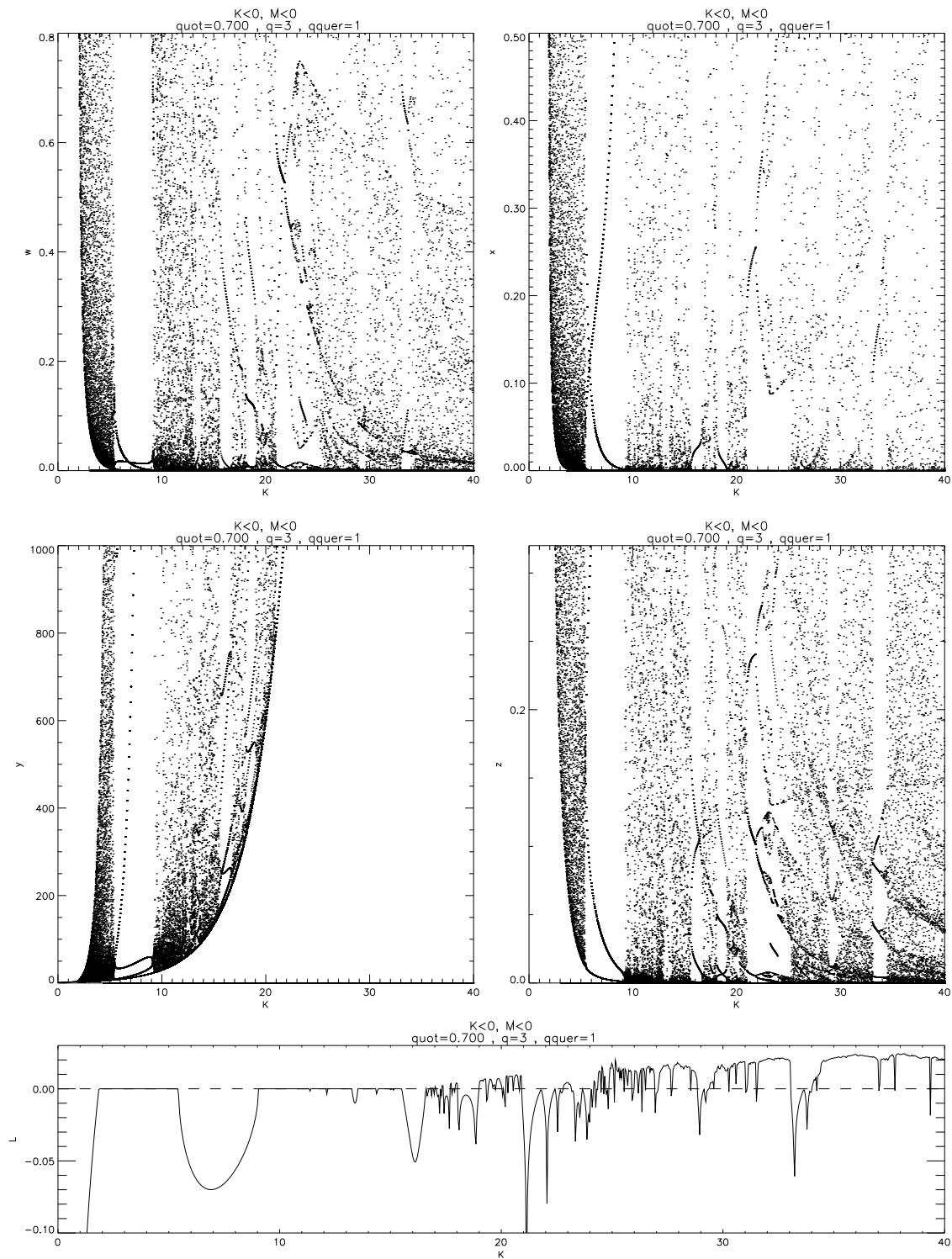


Abbildung 6.27: Vollkommen analog zum ferromagnetischen Fall zeigen sich auch bei antiferromagnetischer NN-Kopplung bei tieferen Temperaturen Bifurkationen, Fenster und ein positiver Liapunov-Exponent.

## 6.5 Spieltheoretische Erweiterung

Die naheliegende spieltheoretische Erweiterung der in Kapitel 3 gezeigten Modelle ist ebenfalls als eine Ausweitung der Wechselwirkungsreichweite zu interpretieren. Dies ist gerade im wirtschaftlichen Konkurrenzmodell mit Beginn der Globalisierung von Interesse, aber auch im evolutionstheoretischen Modell ist die Erweiterung der Wechselwirkungsreichweite leicht interpretierbar.

Die Möglichkeit, nicht mehr nur den Systemparameter  $\varepsilon$  als Maß für den Anteil der nicht evolutionär stabilen Strategien zu betrachten, sondern einzelne Strategien getrennt anschauen zu können, kann sich hierbei als großer Vorteil herausstellen. Ebenso eröffnet die Wahlmöglichkeit zwischen ferro- und antiferromagnetischer NN-Kopplung neue Bereiche.

Wir betrachten das Ising-Modell mit antiferromagnetischer NNN-Kopplung und antiferromagnetischer NN-Kopplung am Beispiel des evolutionstheoretischen Modells. Bei einem genügenden Nahrungsangebot ist die Konkurrenz zu den übernächsten Nachbarn nicht von Entscheidung, somit *quot* sehr klein. Nehmen wir eine mäßig starke Nächst-Nachbar-Kopplung an, was beispielsweise bei einer durchschnittlichen Bevölkerungsdichte gegeben ist, finden wir im Phasendiagramm ausschließlich die antiferromagnetische Phase: Jedes Individuum versucht sich von seinen direkten Konkurrenten abzusetzen. Gewinnt aber die Übernächst-Nachbar-Kopplung langsam an Bedeutung, etwa durch Erhöhung des Aktionsradiuses im Laufe der Evolution, ausgelöst durch Nahrungsknappheit oder andere körperliche Gegebenheiten, erhalten wir laut Phasendiagramm die paramagnetische Phase: Eine erratische Verteilung der Strategien. Nimmt die Nahrungsknappheit weiter zu, wächst also das *quot* weiter an, erhalten wir in Phasendiagramm die Phase des schwachen Chaos: Eine zunehmende Irritation der Population findet statt. Bei weiterem Wachstum der NNN-Kopplung durch Erhöhung der Knappheit ergibt sich im Phasendiagramm die doppelperiodische Lösung und es setzt abrupt wieder Ordnung ein: Direkte Nachbarn kooperieren als Paar, unterscheiden sich aber von der Strategie der benachbarten Paare. Die Konkurrenz verlagert sich somit und es ergibt sich automatisch Zusammenarbeit.

Diese Interpretationsmöglichkeit ist nicht zwingend, akzeptiert man aber die Entsprechungen des Kapitels 3, ergeben sich die Schlußfolgerungen automatisch und man ist gezwungen, diese im Rahmen des Modells zu interpretieren.

# Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zwei Verallgemeinerungen des  $q$ -state-Potts-Modell behandelt.

Die erste Verallgemeinerung besteht in der Erweiterung der Einwirkung des Magnetfeldes auf die Spins. Hier wird nicht mehr eine ausgezeichnete Spinstellung im Zeeman-Term berücksichtigt, sondern es wird jetzt vereinbart, daß  $\bar{q}$  Spinstellungen an das Magnetfeld koppeln. Es wurden die Phasen dieses Modells anhand von Fixpunkten einer Rekursionsabbildung gewonnen. Erstmals wurde zudem ihre Stabilität überprüft und so die Phasengrenzen gefunden, die durch die Numerik bestätigt wurden. Es wurden die Fixpunkte und -zyklen für die paramagnetische, die ferro- und die antiferromagnetische Phase gewonnen. Es gelang weiter, einige statistische Größen des Modells analytisch zu erhalten.

Motiviert durch die Gleichheit der Rekursionsformel im Fall  $q \rightarrow \bar{q}$  mit der logistischen Abbildung wurde auch die Extrapolation zu einer nicht ganzzahligen Differenz  $q - \bar{q}$  gemacht. Hier zeigte sich, daß bis zu einer gewissen endlichen Größe dieses Abstandes, für den eine Näherung gegeben wurde, Chaosphänomene auftreten.

Es zeigt sich, daß die hier erhaltenen Bifurkationskaskaden den gleichen Skalengesetzen folgen wie die logistische Gleichung und somit zu den kritischen Indizes  $\alpha$  und  $\delta$  führen, die Feigenbaum ermittelte. Neu ist die Größe der Fenster bei zunehmendem  $\varepsilon$ . Sie sind im Vergleich zum Bifurkationsbaum der logistischen Gleichung auch ohne Umskalierung in einem weiten Temperaturbereich und in großer Anzahl stabil. Es wurde durch den Übergang von der diskreten Differenzgleichung zu einer kontinuierlichen Differentialgleichung eine Näherungsformel für ihre Lokalisierung gefunden, die durch Simulationen bestätigt wurde.

Die zweite Verallgemeinerung der Arbeit besteht in der Erweiterung der Wechselwirkung benachbarter Spins von der Nächst-Nachbar-Kopplung auf eine zusätzliche Übernächst-Nachbarn-Kopplung. Diese Erweiterung führt zu Frustrationseffekten, die im Fall des erweiterten Ising-Modells zum schwachen Chaos führt. Hier ist in den Bifurkationsdiagrammen eine gleichmäßige Verteilung der Iterationspunkte zu sehen. Auffallend ist, daß der Liapunov-Exponent in einem ganzen In-

tervall numerisch exakt Null ist. Dies wird in der Literatur (Chern et al. a, 1994), (Chern et al. b, 1994) als schwaches Chaos bezeichnet.

In einer Fortführung dieser Verallgemeinerung wird die Spinwechselwirkung des  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modells zu eine zusätzliche NNN-Kopplung erweitert. Hier zeigt sich, daß bei gegebenen  $q$  die Wahl von  $\bar{q}$  Einfluß auf den exakten Verlauf der Bifurkationsdiagramme hat, dagegen die Grenzen der Fenster, als auch die Phasengrenzen aber nicht ändert. Durch die Konzentration auf diese Grenzen wird in der Arbeit somit ausschließlich das erweiterte  $q$ -state-Potts-Modell betrachtet, also  $\bar{q} = 1$  gesetzt.

Im Fall  $q = 3$  kommt es bei kleinem Verhältnis der Stärken von Übernächst-Nachbar- zur Nächst-Nachbar-Kopplung zu einem Übergang von der paramagnetischen zur ferro- bzw. antiferromagnetischen Phase. Bei größerem Verhältnis der Kopplungsstärken zeigt sich ein Übergang von der paramagnetischen Phase in eine Phase, in der bei hohen Temperaturen schwaches Chaos ohne einen Bifurkationsübergang zu sehen ist. Es konnte gezeigt werden, daß die Erscheinung des schwachen Chaos und des beobachteten verschwindenden Liapunov-Exponenten ihre Ursache in der besonderen Form des Attraktors und der Quasiperiodizität der Iterationsabbildungen hat. Diese verhindert das Erreichen eines Zyklus und somit einen negativen Exponenten, bewirkt aber auch, daß benachbarte Startpunkte im Laufe der Iteration ihren Abstand kaum ändern. Ein positiver Exponent ist dadurch ausgeschlossen. Verbleibt die beobachtete Möglichkeit eines verschwindenden Liapunov-Exponenten  $L = 0$ . Fenster innerhalb des schwachen Chaos zeigen somit einen Wechsel von Quasiperiodizität zu Periodizität an.

Der kontinuierliche Übergang zum klassischen Chaos bei tiefen Temperaturen mit positiven Liapunov-Exponenten wird durch die Verformung des Attraktors erzwungen. Diese geschlossene Raumkurve hat im Bereich des schwachen Chaos eine fast ebene, ovalförmige Gestalt. Mit Abnahme der Temperatur zeigen sich größere Abweichungen von der Ovalform und er erhält eine immer verdrehtere Form, behält aber seine geschlossene Gestalt bei. Hinzu kommen gleichzeitig sehr große lokale Streckungen einiger Abschnitte des Attraktors, während andere stark gestaucht werden. Diese veränderte Form bewirkt, daß eng benachbarte Startpunkte innerhalb weniger Iterationsschritte einen Abstand haben, der um Zehnerpotenzen größer als der anfängliche ist. Diese exponentielle Separation der Punkte erwirkt einen positiven Liapunov-Exponenten und somit klassisches Chaos.

Die Anwendungen des Modells auf anderen wissenschaftlichen Disziplinen wie der Spieltheorie zeigen zudem, daß die gefundenen Erkenntnisse zum Verständnis dieser Systeme beitragen und zu vielfältigen neuen Fragestellungen führen. So stellt sich sowohl bei ferro- als auch bei antiferromagnetischer NN-Kopplung und

---

antiferromagnetischer NNN-Kopplung eine doppelperiodische Lösung beim Ising-Modell heraus, sofern das Verhältnis von Übernächst-Nachbar- zur Nächstnachbar-Kopplungsstärke ausreichend groß ist. Bei einer evolutionstheoretischen oder wirtschaftswissenschaftlichen Interpretation zeigt sich also Kooperation direkter Nachbarpaare durch das Verfolgen derselben Strategie, die durch die Spins symbolisiert sind. Diese unterscheidet sich aber von der Strategie der anschließenden Nachbarpaare.



# Anhang A

## Magnetisierung als Ableitung der Freien Energie

In diesem Anhang wird die Korrektheit einer der zwei Ableitungen der erhaltenen Freien Energie gezeigt, die sich nach (Gujrati, 1995) beim  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell laut Gleichung (4.29) bzw. Gl.(4.30) bei einem Fixpunkt ergibt.

Zunächst sei darauf aufmerksam gemacht, daß nach Gujrati die Freie Energie pro bond gegeben ist durch

$$f_b = \lim_{N_b \rightarrow \infty} \frac{\ln Z_{R,0}(K, L)}{N_b}, \quad (\text{A.1})$$

woraus sich die Freie Energie pro site  $f_S$  ergibt mittels

$$f_S = \frac{z}{2} f_b. \quad (\text{A.2})$$

Sie unterscheidet sich von der ansonsten üblichen Form der thermodynamischen Freien Energie  $f_{therm}$ , wie sie beispielsweise in (Isihara, 1971) zu finden ist. Der funktionale Zusammenhang mit dieser Definition ist gegeben durch

$$f_{therm} \stackrel{Def}{=} -k_B T \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{N_S} \ln Z_{R,0}(K, L) = -\frac{1}{\beta} f_S. \quad (\text{A.3})$$

Für  $f_{therm}$  gilt jedoch, daß man durch Differentiation nach dem äußeren Feld  $H = -L k_B T = -\frac{L}{\beta}$  den Erwartungswert erhält, einen beliebigen Spin in  $\underline{Q}$  zu finden. Dies ist definiert als Magnetisierung  $m$

$$m \stackrel{Def}{=} \frac{\partial f_{therm}}{\partial H} = \langle \Delta_{\sigma_0} \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Mit Gl.(A.3) folgt somit der Zusammenhang der Magnetisierung mit der berechneten Freien Energie nach Gujrati

$$m = \frac{\partial f_{therm}}{\partial H} = -\frac{\partial f_S}{\partial \beta H} = \frac{\partial f_S}{\partial L} = \frac{z}{2} \frac{\partial f_b}{\partial L}, \quad (\text{A.5})$$

Da die Magnetisierung in unserem betrachteten Modell die Form

$$m = \frac{\bar{q}e^L}{\bar{q}e^L + (q - \bar{q})x^z} \quad (\text{A.6})$$

annimmt, ist folgende Identität zu betrachten:

$$(z(\beta e^L + \gamma x^z)) \frac{\partial f_b}{\partial L} = 2\bar{q}e^L. \quad (\text{A.7})$$

Zu diese Zweck werden folgende Definitionen vereinbart

$$\alpha = e^K + q - \bar{q} - 1 \quad (\text{A.8})$$

$$\beta = \bar{q} \quad (\text{A.9})$$

$$\gamma = q - \bar{q} \quad (\text{A.10})$$

$$\delta = e^K + \bar{q} - 1, \quad (\text{A.11})$$

mit deren Hilfe in der Folge zwei Funktionen  $g(x)$  und  $h(x)$  definieren werden können,

$$g(x) = e^L \delta + \gamma x^{z-1} \quad (\text{A.12})$$

$$\Rightarrow g' = \frac{\partial g}{\partial L} = e^L \delta + (z-1)\gamma \left( x^{z-2} \frac{\partial x}{\partial L} \right) \quad (\text{A.13})$$

und

$$h(x) = e^L \beta + \gamma x^z \quad (\text{A.14})$$

$$\Rightarrow h' = \frac{\partial h}{\partial L} = e^L \beta + z\gamma x \left( x^{z-2} \frac{\partial x}{\partial L} \right), \quad (\text{A.15})$$

so daß sich die Freie Energie pro bond nach (4.29) in knapper Form schreiben läßt:

$$f_b = \ln \left( \frac{g(x)}{h(x)^{(z-2)/z}} \right). \quad (\text{A.16})$$

Für die folgende, knapp zusammengefaßte Rechnung ist weiterhin die Fixpunktgleichung wichtig, hier ausgedrückt durch die neuen Variablen:

$$x = \frac{e^L \beta + \alpha x^{z-1}}{e^L \delta + \gamma x^{z-1}}, \quad (\text{A.17})$$

oder äquivalent umgeformt

$$e^L(\delta x - \beta) = (\alpha - \gamma x)x^{z-1}. \quad (\text{A.18})$$

Durch Auflösen nach  $e^L$  und Differentiation bezüglich  $x$  erhält man

$$x^{z-2} \frac{\partial x}{\partial L} = e^L \frac{(\delta x - \beta)^2}{(z-1)(\delta x - \beta)(\alpha - \gamma x) + x(\gamma \beta - \alpha \delta)}. \quad (\text{A.19})$$

Ziel dieses Anhangs ist es, die Relation (A.7) nachzuweisen. Hierzu benötigen wir zuerst die Ableitung der Freien Energie nach  $L$

$$\frac{\partial f_b}{\partial L} = \frac{1}{hz} \left( \frac{h}{g} z g' - (z-2) h' \right). \quad (\text{A.20})$$

Zum Nachweis der sich ergebenden Gleichung

$$\frac{1}{g} (hzg' - (z-2)gh') = 2 h(x) m \quad (\text{A.21})$$

starten wir mit der linken Seite, indem wir Gl.(A.12) bis (A.15) einsetzen:

$$\begin{aligned} hzg' - (z-2)gh' &= z (e^L \beta n + \gamma x^z) \left[ e^L \delta + (z-1) \gamma x^{z-2} \frac{\partial x}{\partial L} \right] - \\ &\quad (z-2) (e^L \delta + \gamma x^{z-1}) \left[ e^L \beta + z \gamma x^{z-1} \frac{\partial x}{\partial L} \right] \end{aligned}$$

Nach kurzer Umformung unter Verwendung der Rekursionsformel in Form von Gl.(A.18) ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{e^{-L} (hzg' - (z-2)gh')}{g} &= 2\beta + \frac{\gamma z (\delta x - \beta)}{\kappa g} \cdot \\ &\quad \underbrace{\delta (e^L (\delta x - \beta) - \alpha x^{z-1} + \gamma x^z)}_0 x \quad (\text{A.22}) \end{aligned}$$

mit

$$\kappa = (z-1)(\delta x - \beta)(\alpha - \gamma x) + x(\gamma\beta - \alpha\delta). \quad (\text{A.23})$$

Das Verschwinden der Klammer ergibt sich wieder mit Hilfe der Rekursionsformel (A.18). Mit der Definition von  $\beta$  folgt also

$$\frac{1}{g} (hzg' - (z-2)gh') = 2e^L \bar{q} \quad (\text{A.24})$$

und somit Gleichung (A.21), was zu zeigen war.

# Anhang B

## Direkt-Nachbar-Korrelation als Ableitung der Freien Energie

In diesem Anhang wird die Korrektheit der Ableitung der Freien Energie nach  $K$  gezeigt, die sich nach (Gujrati, 1995) beim  $q$ - $\bar{q}$ -Potts-Modell laut Gleichung (4.29) bzw. Gl.(4.30) bei einem Fixpunkt ergibt. Mit Anhang A sind somit die Gleichungen vollständig verifiziert.

Mit Hilfe der Definition eines Erwartungswertes und der Definition der Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{s\}} \exp \left( K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i} \right) \quad (\text{B.1})$$

erhalten wir zunächst

$$\frac{\partial}{\partial K} \ln Z = \frac{N_s z}{2} \langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Damit ergibt sich der Zusammenhang der Ableitung der Freien Energie pro Bond (nach Gurjati) nach  $K$  und der Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_b}{\partial K} &= -\beta \frac{2}{z} \frac{\partial f_{therm}}{\partial K} \\ &= \beta \frac{2}{z} \frac{\partial \ln Z}{N_s \beta \partial K} \\ &= \langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Dies ist zu überprüfen. Es sei noch bemerkt, daß dieser Erwartungswert bis auf additive Größen der inneren Energie entspricht. Dies ist schnell zu sehen, wenn man den Erwartungswert der Hamiltonfunktion  $\mathcal{H}$  mit Hilfe der Translationsinvarianz umformt

$$\begin{aligned} U = \langle \mathcal{H} \rangle &= -K \sum_{\langle ij \rangle} \langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle + L \sum_i \langle \Delta_{\sigma_i} \rangle \\ &= -K N \frac{z}{2} \langle \delta_{\sigma_0 \sigma_1} \rangle + L N m. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

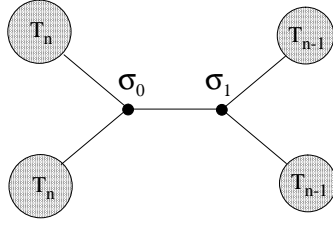


Abbildung B.1: Zur Herleitung des Erwartungswertes  $\langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle$  nach Gleichung (B.10) geht man vom Ursprung  $\sigma_0$  und einem beliebigen benachbarten Spin  $\sigma_1$  aus. Die an  $\sigma_0$  hängenden Trees haben  $n$  Schalen, die an  $\sigma_1$  hängen nur  $n - 1$ .

Mit den in Anhang A eingeführten Kurznotationen und Definitionen (A.8)-(A.11) und (A.12), (A.14) erhalten wir die benötigten Ableitungen

$$g' = \frac{\partial g}{\partial K} = e^{L+K} + (q - \bar{q})(z - 1) x^{z-2} \frac{\partial x}{\partial K} \quad (\text{B.5})$$

und

$$h' = \frac{\partial h}{\partial K} = (q - \bar{q}) z x^{z-1} \frac{\partial x}{\partial K}. \quad (\text{B.6})$$

Die hier gebrauchte Ableitung  $\frac{\partial x}{\partial K}$  erhält man, indem man die Rekursionsformel nach  $e^K$  auflöst:

$$\frac{\partial x}{\partial K} = e^K \frac{N^2}{N Z' - Z N'} \quad (\text{B.7})$$

mit

$$Z = (q - \bar{q} - 1)x^{z-1} - (q - \bar{q})x^z + e^L (\bar{q} - (\bar{q} - 1)x) \quad (\text{B.8})$$

und

$$N = x e^L - x^{z-1}. \quad (\text{B.9})$$

Die gestrichenen Größen sind hierbei Ableitungen nach  $x$ .

Mit Hilfe einfacher Überlegungen erhält man den Erwartungswert in Gleichung (B.3) in anderer Form:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\underline{\sigma}} \delta_{\sigma_0 \sigma_1} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_0} e^{L \Delta(\sigma_0)} T_n(\sigma_0)^{z-1} e^{K+L \Delta(\sigma_0)} T_{n-1}(\sigma_0)^{z-1} \\ &= \frac{1}{Z} e^K \left( e^{2L \bar{q}} T_n(\underline{Q})^{z-1} T_{n-1}(\underline{Q})^{z-1} + \right. \\ &\quad \left. + (q - \bar{q}) [T_n(\bar{Q})^{z-1} T_{n-1}(\bar{Q})^{z-1}] \right). \quad (\text{B.10}) \end{aligned}$$

Dies wird in Abbildung B.1 veranschaulicht.

Ersetzt man schließlich noch die Zustandssumme durch den Ausdruck (2.24) erhält man nach kurzer Rechnung

$$\langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle = e^K \frac{e^{2L} \bar{q} + (q - \bar{q}) x_n^{z-1} x_{n-1}^{z-1}}{(e^L (e^K + \bar{q} - 1) + (q - \bar{q}) x_{n-1}^{z-1}) (\bar{q} e^L + (q - \bar{q}) x_n^z)}. \quad (\text{B.11})$$

Dies läßt sich nun noch kompakter schreiben mit Hilfe der Funktionen  $g$  und  $h$  aus (A.12) und (A.14), wenn man zusätzlich bedenkt, daß hier ein Fixpunkt betrachtet wird

$$\langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle = e^K \frac{\bar{q} e^{2L} + (q - \bar{q}) x^{2(z-1)}}{g \cdot h}. \quad (\text{B.12})$$

Mit der Form aus Gleichung (A.16) der Freien Energie pro bond bleibt die Identität

$$\frac{\partial f_b}{\partial K} = \frac{\frac{\partial g}{\partial x} h z - (z-2) \frac{\partial h}{\partial x} g}{z g h} \stackrel{?}{=} e^K \frac{\bar{q} e^{2L} + (q - \bar{q}) x^{2(z-1)}}{g \cdot h} \quad (\text{B.13})$$

zu überprüfen.

Dies wird hier im Spezialfall  $L = 0$  gezeigt. Zum weiteren Vorgehen kürzen wir und setzen die Definitionen (A.12) und (A.14) ein

$$(q - \bar{q}) x^{2z-2} - (q - \bar{q}) x^z = (q - \bar{q}) x^{z-2} \left( (z-1) \bar{q} + (q - \bar{q}) x^z - (z-2) x (e^K + \bar{q} - 1) \right) \frac{N^2}{\frac{\partial Z}{\partial x} N - Z \frac{\partial N}{\partial x}}. \quad (\text{B.14})$$

Kurzes Umformen führt auf die zu überprüfende Gleichung

$$\frac{\partial N}{\partial x} Z - N \frac{\partial Z}{\partial x} = \left( (z-1) \bar{q} + (q - \bar{q}) x^z - (z-2) x (e^K + \bar{q} - 1) \right) (1 - x^{z-2}). \quad (\text{B.15})$$

Einsetzen der Gleichungen (B.8) und (B.9) ergibt zunächst

$$\frac{\partial N}{\partial x} Z - N \frac{\partial Z}{\partial x} = x^{z-2} \left[ x^z (q - \bar{q}) + (q - \bar{q})(z-1) x^2 + x (2\bar{q} - q)(z-2) - \bar{q}(z-1) \right] \quad (\text{B.16})$$

und hiermit folgt für  $z \neq 2$  die Form

$$x^{z-1} (\bar{q} - 1 - (q - \bar{q} - 1)) = \bar{q} - (q - \bar{q}) x^z + (e^K + \bar{q} - 1) (x^{z-1} - x). \quad (\text{B.17})$$

Dies ist aber die umgeformte Fixpunktgleichung (2.29), womit Gleichung (B.13) gezeigt ist und damit Gleichung (B.3), was zu zeigen war.

# Anhang C

## Äquivalenz der Rekursionsgleichung zur Logistischen Abbildung im Perkolationslimes $\varepsilon \rightarrow 0$

In diesem Anhang wird die Transformation der ursprünglichen Fixpunktgleichung (5.1) in die Form (5.2) gezeigt. Hierzu führen wir die Kurznotation

$$\nu = e^K + \varepsilon - 1 \quad (\text{C.1})$$

ein, mit der sich die Fixpunktgleichung zu

$$f(x) = \frac{1 + \nu x^2}{e^K + \varepsilon x^2} \quad (\text{C.2})$$

ergibt. Mit der linearen Transformation  $z_n = x_n + c$  erhält man weiter

$$z_{n+1} = \frac{(\nu + \varepsilon c) z_n (z_n - 2c)}{e^K + \varepsilon c^2 + \varepsilon z_n (z_n - 2c)} \quad (\text{C.3})$$

wenn  $c$  als Lösung der kubischen Gleichung

$$1 + ce^K + c^2(\nu + \varepsilon c) = 0 \quad (\text{C.4})$$

gewählt wird. Mit der Definition

$$4\lambda = -\frac{\nu + \varepsilon c}{e^K + \varepsilon c^2} \quad (\text{C.5})$$

und

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{e^K + \varepsilon c^2} \quad (\text{C.6})$$

ergibt sich schließlich die Rekursionsformel in der Form

$$z_{n+1} = -\frac{4\lambda z(z-2c)}{1+\bar{\varepsilon}z(z-2c)} \quad (\text{C.7})$$

die sich mit der Umbenennung

$$\bar{x} = \frac{z}{2c} \quad (\text{C.8})$$

und

$$8\lambda c = 4\bar{\lambda} \quad (\text{C.9})$$

zur Form (5.2) ergibt.



# Anhang D

## Zusammenhang des $q - \bar{q}$ -Potts-Modells mit Perkolation

In diesem Anhang wird ganz analog zu (Wu, 1978) der allgemeine Zusammenhang von Perkolation und dem  $q - \bar{q}$ -Potts-Modell im Fall  $q = \bar{q}$  für jedes Gitter hergeleitet.

Hierbei gehen wir von der Hamiltonfunktion

$$-\beta H_N^{(q, \bar{q})} = K \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + L \sum_i \Delta_{\sigma_i} \quad (\text{D.1})$$

aus. Die Zustandssumme ist gegeben durch

$$\begin{aligned} Z(q, \bar{q}; K, L) &= \sum_{\sigma} \prod_{\langle i, j \rangle} e^{K \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} \prod_i e^{L \Delta_{\sigma_i}} \\ &= \sum_{\sigma} \left( \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + v \delta_{\sigma_i, \sigma_j}) \right) \left( \prod_i e^{L \Delta_{\sigma_i}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

mit

$$v = e^K - 1. \quad (\text{D.3})$$

Zunächst entwickelt man beide Produkte nach allen Möglichkeiten, ein Untergitter  $G'$  mit beliebig vielen bonds zu zeichnen (wobei die bonds dem Faktor  $v \delta_{\dots}$  symbolisieren sollen). Dazu definieren wir folgende Abkürzungen

$$\begin{aligned} n(G') &\simeq \text{Gesamtzahl der Cluster } c \text{ im Untergitter } G', \\ b_c &\simeq \text{Anzahl bonds im Cluster } c, \\ s_c &\simeq \text{Anzahl sites im Cluster } c, \\ \sigma_c &\simeq \text{Spineinstellung des (gesamten) Clusters } c. \end{aligned}$$

Bei diesem Vorgehen sind auch isolierte sites als Cluster mit  $s_c = 1, b_c = 0$  zu betrachten. Es gilt somit weiter

$$\begin{aligned}
Z_N(q, \bar{q}; K, L) &= \sum_{G'} \left( \sum_{\sigma_1=1}^q \sum_{\sigma_2=1}^q \cdots \sum_{\sigma_{n(G')}=1}^q \prod_{c=1}^{n(G')} v^{b_c} (e^{L\Delta\sigma_c})^{s_c} \right) \\
&= \sum_{G'} \left( v^{\sum b_c = b(G')} \prod_{c=1}^{n(G')} (\bar{q}e^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right) \\
&= \sum_{G'} (e^{-K})^{b(G')} (1 - e^{-K})^{b(G')} (e^K)^M (e^{-K})^M \left( \prod_c (\bar{q}e^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right) \\
&= e^{KM} \sum_{G'} (1 - e^{-K})^{b(G')} (e^{-K})^{M-b(G')} \left( \prod_c (\bar{q}e^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right)
\end{aligned}$$

Hier kann  $1 - e^{-K} = p$ , also  $e^{-K} = 1 - p$  gesetzt werden, so daß man als Darstellung der Zustandssumme einen Erwartungswert erhält

$$Z_N(q, \bar{q}; K, L) = e^{KM} \left\langle \prod_c (\bar{q}e^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right\rangle \quad (\text{D.4})$$

Nun kann  $q$  auch reell gewählt werden, so daß sich Ableitungen nach diesem Parameter ausführen lassen.

Zum weiteren Vorgehen definieren wir die freie Energie pro Gitterplatz

$$f(q, \bar{q}, K, L) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(q, \bar{q}; K, L) \quad (\text{D.5})$$

und eine Hilfsfunktion  $h$

$$h(\bar{q}, K, L) = \left. \frac{\partial}{\partial q} f(q, \bar{q}, K, L) \right|_{q=\bar{q}}. \quad (\text{D.6})$$

Hiermit und mit der Darstellung (D.4) der Zustandssumme folgt weiter

$$\begin{aligned}
h(\bar{q}, K, L) &= \left[ \frac{\partial}{\partial q} f(q, \bar{q}, K, L) \right]_{q=\bar{q}} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[ \frac{\partial}{\partial q} \ln \left( e^{MK} \left\langle \prod_c (qe^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right\rangle \right) \right]_{q=\bar{q}} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[ \frac{\partial}{\partial q} \left( MK + \ln \left( \sum_{G'} p^{b(G')} (1 - p)^{M-b(G')} \prod_c (qe^{Ls_c} + q - \bar{q}) \right) \right) \right]_{q=\bar{q}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[ \frac{\sum_{G'} p^{b(G')} (1-p)^{M-b(G')} \sum_c \left( \frac{\prod_{c'} (\bar{q} e^{L s_{c'}} + q - \bar{q})}{\bar{q} e^{L s_c} + q - \bar{q}} \right)}{\sum_{G'} p^{b(G')} (1-p)^{M-b(G')} \prod_c (\bar{q} e^{L s_c} + q - \bar{q})} \right]_{q=\bar{q}} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{G'} p^{b(G')} (1-p)^{M-b(G')} \sum_c \frac{1}{\bar{q} e^{L s_c}}, \\
&\qquad\qquad\qquad \text{mit } \sum_{G'} p^{b(G')} (1-p)^{M-b(G')} = 1 \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c \frac{1}{\bar{q} e^{L s_c}} \right\rangle \tag{D.7}
\end{aligned}$$

Hier können wir mit der Kurzschreibweise

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c \frac{1}{\bar{q} e^{L s_c}} \right\rangle = \left\langle \sum_c \frac{1}{\bar{q} e^{L s_c}} \right\rangle_0 \tag{D.8}$$

das Ergebnis bei  $L = 0$  folgendermaßen schreiben

$$\left\langle \sum_c \frac{1}{\bar{q}} \right\rangle_0 = \frac{1}{\bar{q}} \langle n \rangle_0 = h(\bar{q}, K, 0) \tag{D.9}$$

Für die Perkolationswahrscheinlichkeit  $P(p)$  ergibt sich beispielsweise mit der Translationsinvarianz und mit der Definition

$$\gamma_0 = \begin{cases} 1 & , \text{ falls Größe des Clusters, der den Ursprung enthält, endlich ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{D.10}$$

$$\begin{aligned}
P(p) &= 1 - \langle \gamma_0 \rangle = 1 - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c s_c \right\rangle \\
&= 1 - \bar{q} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c \left( \frac{s_c}{\bar{q} e^{L s_c}} \right) \right\rangle_{L=0^+} \\
&= 1 - \bar{q} \frac{\partial}{\partial L} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_c \frac{1}{\bar{q} e^{L s_c}} \right\rangle_{L=0^+} \\
&= 1 + \bar{q} \left[ \frac{\partial}{\partial L} h(\bar{q}, K, L) \right]_{L=0^+} \tag{D.11}
\end{aligned}$$

Die bond-Wahrscheinlichkeit ergibt sich nach kurzer Rechnung zu

$$p = \frac{1}{2} \left( 1 - \left| \frac{e^K - \bar{q} - 1}{e^K + \bar{q} - 1} \right| \right). \tag{D.12}$$

Wie Kasteleyn und Fortuin (Kasteleyn et al., 1969) zuerst zeigten, entspricht die Magnetisierung der Perkolationswahrscheinlichkeit.

# Anhang E

## Perkolationslimes $q \rightarrow 1$ mit Übernächst-Nachbar- Wechselwirkung

In diesem Anhang werden die Ergebnisse der Rechnungen beim Bilden des Perkolationslimes  $q \rightarrow \bar{q}$  mit  $\bar{q} = 1$  im Modell mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung aufgelistet und kurz auf die Simulationsergebnisse gezeigt.

Durch Bilden des Limes  $q \rightarrow \bar{q} = 1$  erhalten wir aus den Gleichungen (6.26)-(6.32) aus Kapitel 6.1 folgende analytischen Rekursionsformeln:

$$w_{n+1}(w_n, x_n, y_n, z_n) = e^{-K-L} (w_n^2 + a_1 e^{-2M} + 2b_1 e^{-3M}) \quad (\text{E.1})$$

$$x_{n+1}(w_n, x_n, y_n, z_n) = e^{-L} (x_n^2 + a_2 e^{-2M} + 2 w_n b_2 e^{-3M}) \quad (\text{E.2})$$

$$y_{n+1}(z_n) = e^{-K} (z_n^2 + (1 + 2z_n - 3z_n^2)e^{-2M} + 2z_n(z_n - 1)e^{-3M}) \quad (\text{E.3})$$

$$z_{n+1}(w_n, x_n, y_n, z_n) = e^{-K-L} (y_n^2 + a_2 e^{-2M} + 2z_n(z_n - 1)e^{-3M}) \quad (\text{E.4})$$

mit

$$a_1 = a_1(x_n, y_n, w_n) = x_n^2 + y_n^2 + 2w_n(x_n + y_n) - 6w_n^2 \quad (\text{E.5})$$

$$a_2 = a_2(x_n, y_n, w_n) = y_n^2 + 2x_n y_n - w_n(w_n + 2x_n) \quad (\text{E.6})$$

$$b_1 = b_1(x_n, y_n, w_n) = x_n y_n - 2w_n(x_n + y_n) + 3w_n^2 \quad (\text{E.7})$$

$$b_2 = b_2(w_n, y_n) = w_n - y_n. \quad (\text{E.8})$$

Wie in Kapitel 5.1 und in Anhang C gezeigt, folgt bei verschwindender Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung die transformierte Logistische Abbildung, die zum reinen Feigenbaum-Szenario führt. Dies sehen wir in Abbildung E.1. Bei zunehmender Stärke dieser Wechselwirkung aber verschwinden die chaotischen Eigenschaften, bis schließlich in jeder Variablen ein einziger Fixpunkt übrig bleibt, der bei einem charakteristischem  $K$ -Wert ebenfalls instabil wird. Im Übergangsbereich entstehen sehr interessante Fixpunktdiagramme, die in Abbildung E.3 und E.4 gezeigt werden.

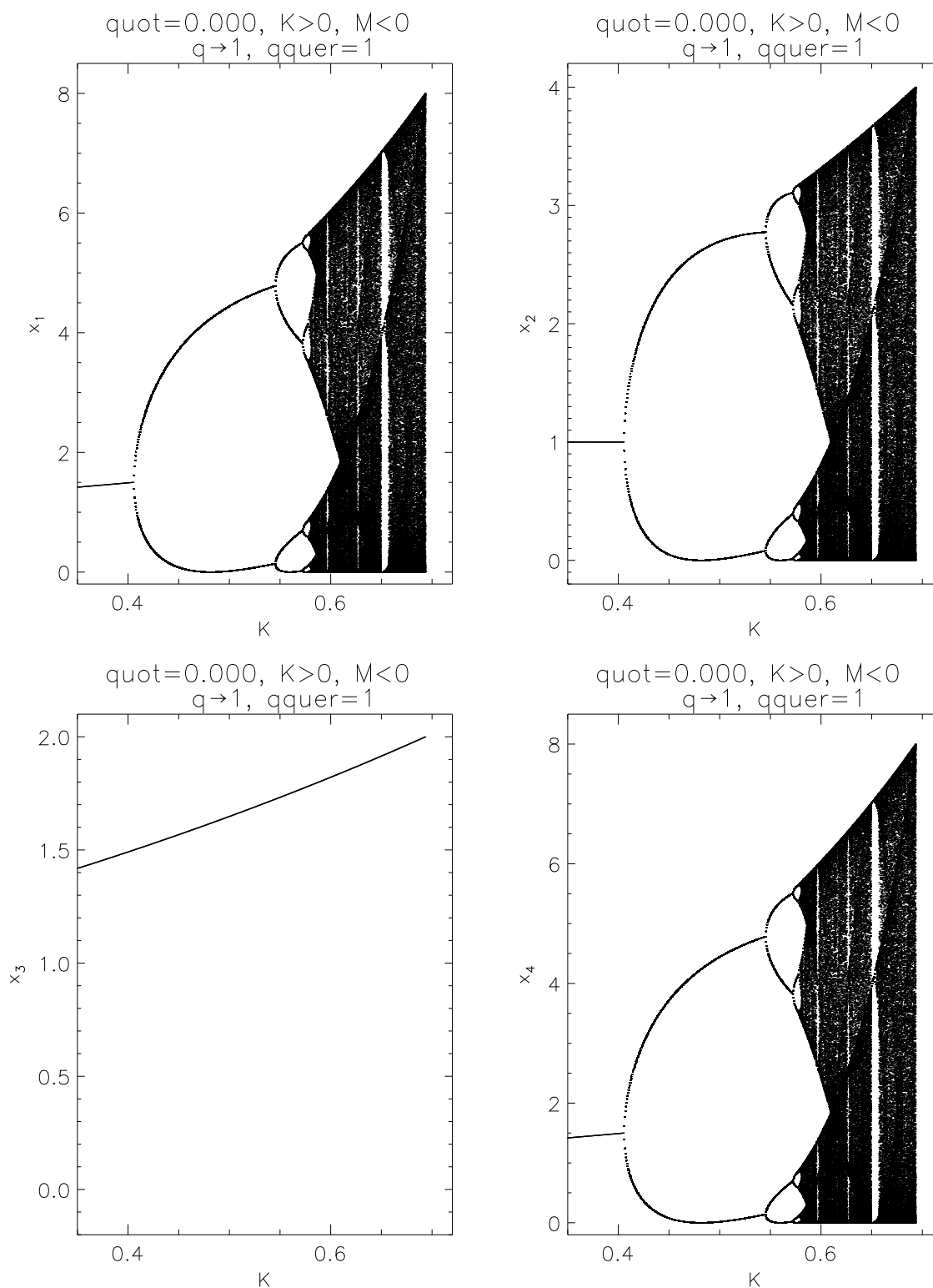


Abbildung E.1: Bei verschwindender  $\ddot{U}$ bernächst-Nachbar-Wechselwirkung erhalt man wie in Kapitel 5.1 vorausgesagt das reine Feigenbaum-Szenario.

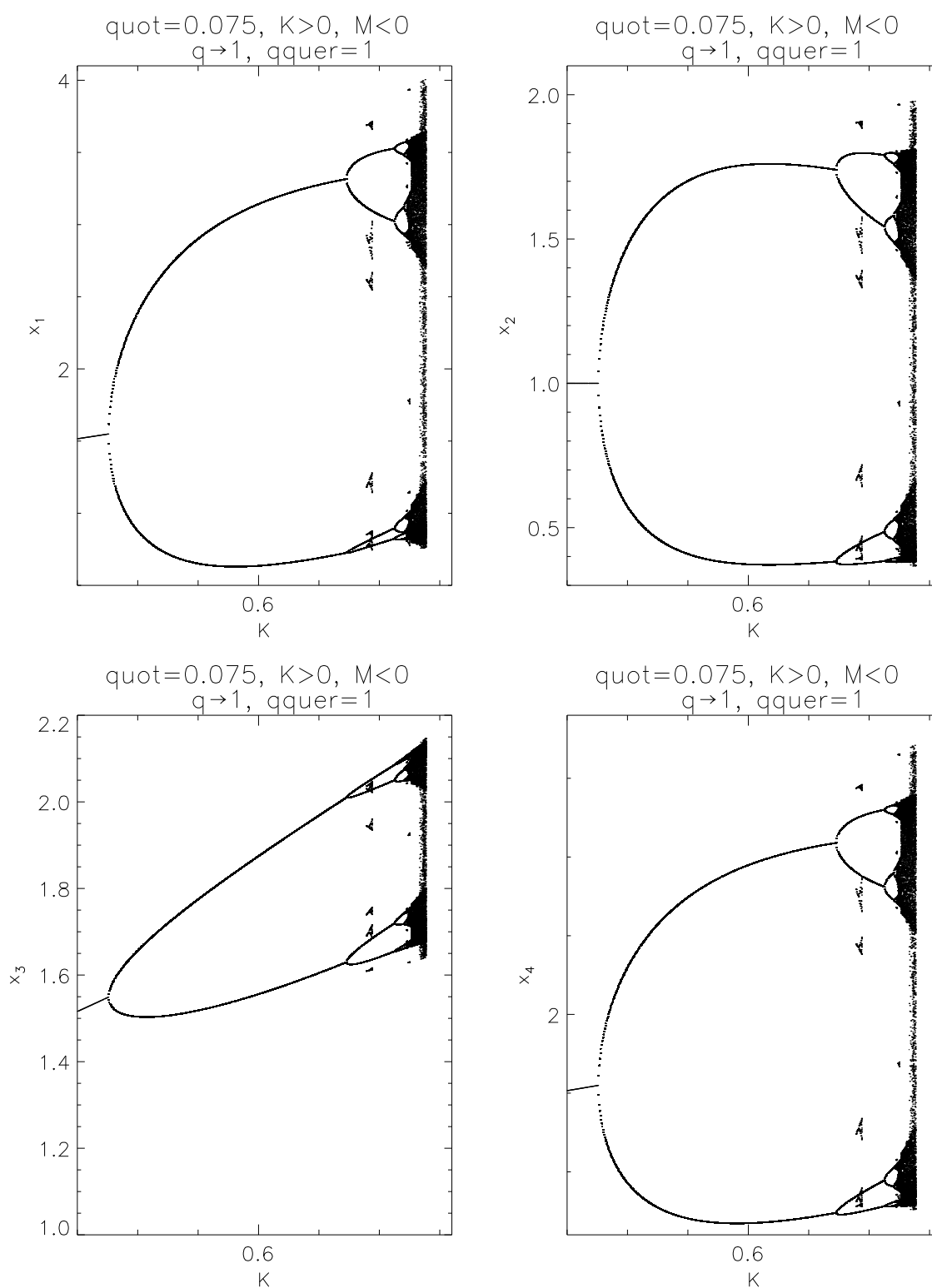


Abbildung E.2: Bei Zunahme von  $M$  verschwindet das Chaos. Es treten aber zwischenzeitlich neue Fixpunkte auf.

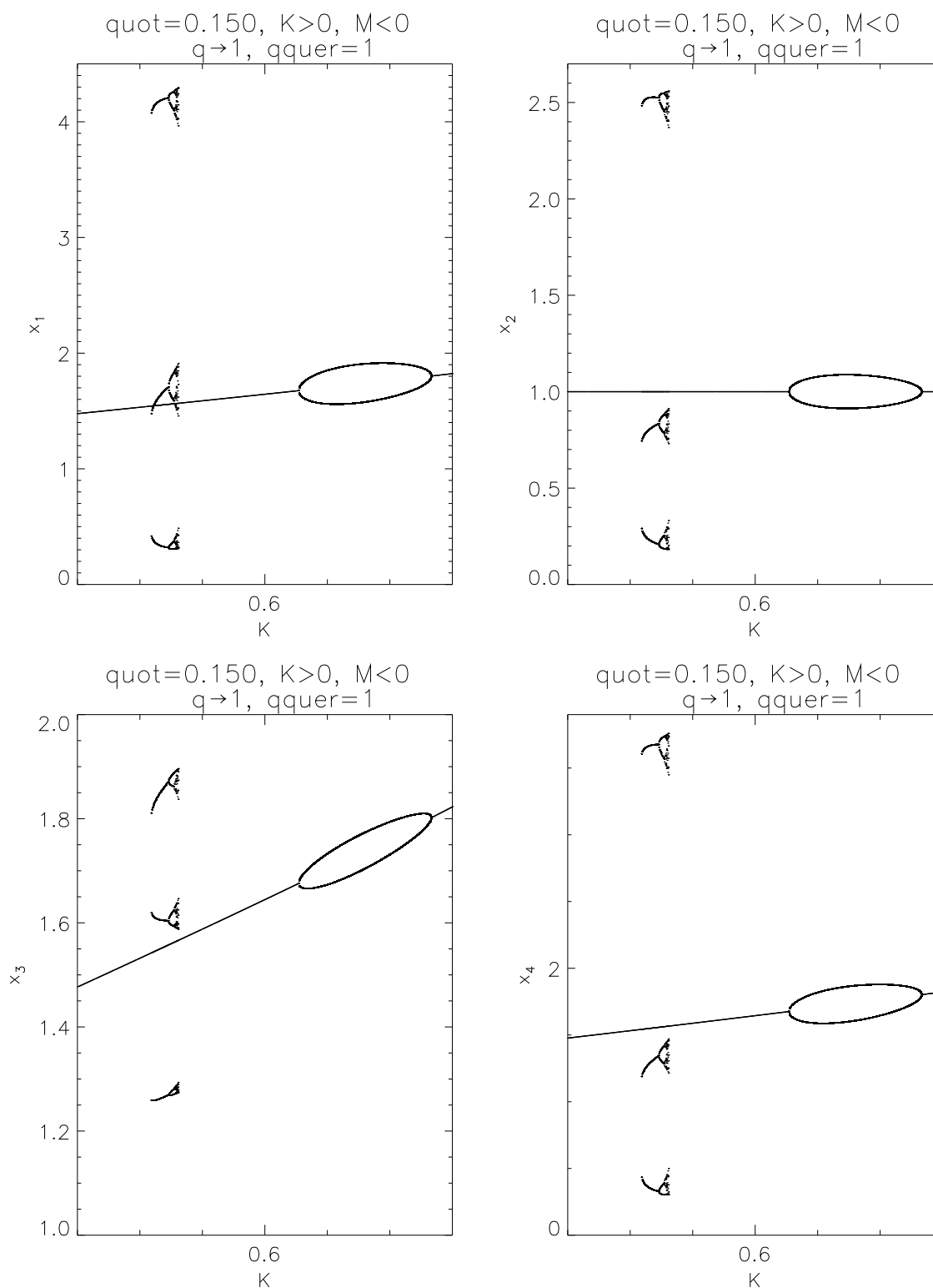


Abbildung E.3: Bei weiterer Zunahme von  $M$  erscheinen vollkommen neue Fixpunkt-Szenarien.

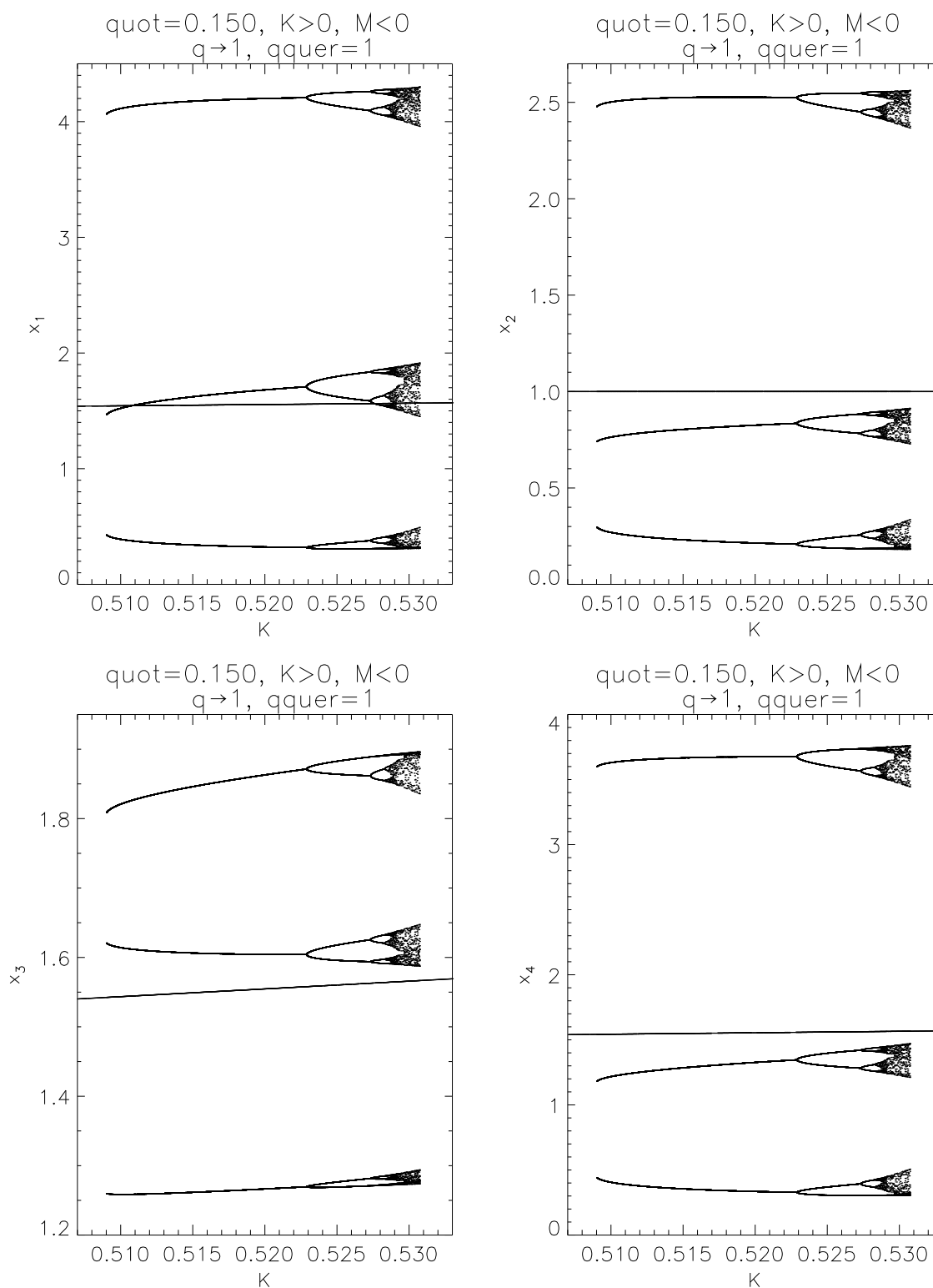


Abbildung E.4: Vergrößert dargestellt die zusätzlichen 'Feigenbäume' aus der vorigen Abbildung, die bei weiterer Zunahme von  $M$  wieder verschwinden. Übrig bleiben schließlich vier Fixpunkte der vier Zustandsgrößen, die bei großen Werten für  $K$  instabil werden.



# Anhang F

## Der Limes $z \rightarrow \infty$

In diesem Anhang wird das Verhalten der Fixpunktdiagramme bei zunehmendem  $z$  betrachtet. Zunächst läßt sich anmerken, daß in diesem Grenzfall nach Gleichung (2.51) der paramagnetische Bereich  $x = 1$  auf den Punkt  $K = 0$  zusammenschrumpft. Für weitere Fixpunkte betrachten wir die Fixpunktgleichung (2.48). Sie degeneriert im Limes  $z \rightarrow \infty$  zu

$$x = \lim_{z \rightarrow \infty} f(x) = \begin{cases} x^{(1)} \stackrel{Def}{=} e^{-K} & \text{für } |x| < 1 \\ x^{(2)} \stackrel{Def}{=} 1 + \frac{\epsilon^K - 1}{\epsilon} & \text{für } |x| > 1. \end{cases} \quad (\text{F.1})$$

Da aber

$$x^{(1)} \begin{cases} > 1 & \text{für } K < 0 \\ < 1 & \text{für } K > 0 \end{cases} \quad (\text{F.2})$$

und

$$x^{(2)} \begin{cases} < 1 & \text{für } K < 0 \\ > 1 & \text{für } K > 0 \end{cases} \quad (\text{F.3})$$

kommen im ferromagnetischen Fall beide Lösungen  $x^{(1)}$  und  $x^{(2)}$  in Frage, hingegen entfällt im antiferromagnetischen Fall aus Konsistenzgründen die Lösung  $x^{(1)}$  und es bleibt nur die zweite Lösung mit der Einschränkung  $x^{(2)} < -1$  bestehen. Dies ergibt die Bedingung

$$e^K < 1 - 2\epsilon, \quad (\text{F.4})$$

was eine Bedingung an die Temperatur stellt:  $T < T^*$  mit  $e^{K^*} = 1 - 2\epsilon$ . Hier ist  $x^{(2)}$  stabil. Für  $T > T^*$  ist  $x^{(1)}, x^{(2)}$  ein superstabiler Zweierzyklus. Diese alternierende Eigenschaft sieht man leicht, wenn man bedenkt, daß für  $K < 0$  und  $T > T^*$

1.

$$x^{(1)} > 1 \quad \Rightarrow \quad f(x^{(1)}) = x^{(2)} \quad (\text{F.5})$$

und

2.

$$|x^{(2)}| < 1 \quad \Rightarrow \quad f(x^{(2)}) = x^{(1)} \quad (\text{F.6})$$

# Literaturverzeichnis

- [Gujrati, 1995] P.D. Gujrati, *Bethe or Bethe-like Lattice Calculations Are More Reliable Than Conventional Mean-Field Calculations*, Phys. Rev. Lett. **74**(5) (1995).
- [Gujrati, 1993] P.D. Gujrati, , Phys. Rev. Lett. **98** pp. 1613 (1993).
- [Runnels, 1967] L.K. Runnels, , J.Math.Phys. **8** pp. 2081 (1967).
- [Mittag et al., 1974] L. Mittag und M.J. Stephen, J. Phys. A: Math. Gen. **7** (1974).
- [Staley et al., 1973] J.P. Staley und M.E. Fischer, J. Phys. A: Math.Gen. **6** (1973).
- [Eggarter, 1974a] T.P. Eggarter, , J.Phys.C **7** pp.3433 (1974).
- [Eggarter, 1974b] T.P. Eggarter, , Phys. Rev. B **9** pp.3433 (1974).
- [Müller-Hartmann, 1974] E. Muller-Hartmann and J. Zittartz, , Phys. Rev. Lett. **33** pp. 893 (1974).
- [Gradshteyn et al., 1980] I.S. Gradshteyn und I.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products* ACADEMIC PRESS, INC. (1980).
- [Baxter, 1982] *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* Academic Press, London (1982).
- [Peruggi et al., 1983] F. Peruggi, F. di Liberto and G. Monroy , J. Phys. A; Math. Gen. **16**, pp.811 (1983).
- [Zia et al., 1975] R.K.P. Zia and D. Wallace, J. Phys. A **8** (1975).
- [Wallace et al., 1977] D.J. Wallace und A.P. Young, Phys. Rev. B **17** (1977).
- [Southern et al., 1979] B.W. Southern und M.F. Thorpe, J. Phys. C: Solid State Phys. **12** (1979).
- [Peruggi et al., 1987] F. Peruggi, F. di Liberto and G. Monroy, Physica **141** (1987).

- [Fudenberg et al., 1991] D. Fudenberg and J. Tirole *Game Theory*, The MIT Press, Cambridge (1991).
- [Holler et al., 1996] M.J. Holler und G. Illing *Einführung in die Spieltheorie*, Springer-Verlag, Berlin (1996).
- [Wheeler et al., 1967] J.C. Wheeler und B. Widom, J. Chem. Phys. **52** (1967).
- [Isihara, 1971] *Statistical Physics*, ACADEMIC PRESS, London (1971).
- [Wu, 1982] F.Y. Wu, *The Potts model*, Reviews of Modern Physics, **54(1)** (1982).
- [Neumann et al., 1961] J.v. Neumann und O. Morgenstern *Spieltheorie und wirtschaftliches Verhalten*, Physica-Verlag, Würzburg (1961).
- [Schuster, 1994] H.G. Schuster *Deterministisches Chaos*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1994).
- [Kosterlitz et al., 1978] J.M. Kosterlitz und K.J. Thouless *Potts Model*, Prog. Low. Temp. Phys., **7b**, (1978).
- [Nelson, 1979] D.R. Nelson, Phys. Rep. **49**, (1979).
- [Essam et al., 1995] J.W. Essam, J.C. Liu und P.L. Taylor, Phys. Rev. E **52**, (1995).
- [Barber, 1980] M.N. Barber, Phys. Rep. **59**, (1980).
- [Wang et al., 1976] Y.K. Wang und F.Y. Wu, *Multi-component spin model on a Cayley tree*, J. Phys. A **9**, (1976).
- [Potts, 1952] R.B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, (1952).
- [de Jongh et al., 1974] L.J. de Jongh und A.R. Miedema, Adv. Phys. **23**, (1974).
- [Inawashiro et al., 1983] S. Inawashiro, C.J. Thompson und G. Honda, *Ising Model with Competing Interactions*, J. Stat. Phys. **33**, (1983).
- [Chern et al. a, 1994] J.L. Chern und K. Otsuka *Memory characteristic of locally deforming nature in chaos*, Phys. Lett. A **188** (1994).
- [Chern et al. b, 1994] J.L. Chern und T.C. Chow *Nonstationary characteristic of probability association in chaos*, Phys. Lett. A **192** (1994).
- [Mukamel et al., 1974] D. Mukamel, M.E. Fischer und E. Domany, Phys. Rev. Lett. **37**, (1976).
- [Barabara et al., 1978] B. Barabar, M.F. Rossignol und P. Bak, J. Phys. C **11**, (1978).

- [Feigenbaum, 1980] M.J. Feigenbaum, *Universal Behavior in Nonlinear Systems*, Los Alamos Science **1**, (1980).
- [Domany et al., 1978] E. Domany und E.K. Riedel, *J. Appl. Phys.* **49**, (1978).
- [Binney et al., 1992] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fischer und M.E.J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1992).
- [Hu, 1982] B. Hu und J.M. Mao, *Period doubling: Universality and critical-point order*, *Phys. Rev. A* **25**, (1982).
- [Argyris et al., 1994] J. Argyris, G. Faust und M. Haase, *Die Erforschung des Chaos* Vieweg-Verlag, Braunschweig (1994).
- [Boukraa et al., 1994] S. Boukraa, J.-M. Maillard und G. Rollet *From integrability to weak chaos*, *Physica A* **205** (1994).
- [Iooss et al., 1980] G. Iooss und D.D. Joseph, *Elementary Stability and Bifurcation Theory*, Springer-Verlag, Berlin (1980).
- [Chen et al., 1974] M. Chen, L. Onsager, J. Bonner und J. Nagle, *J. Chem. Phys.* **60** (1974).
- [McCoy et al., 1973] B.M. McCoy und T.T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts (1973).
- [Domb, 1960] C. Domb, *Adv. Phys.* **9**, (1960).
- [Aguiar, 1998] F.S. Aguiar und S.G. Rosa Jr., *The Potts model on the Bethe lattice*, *Physica A* **253**, (1998).
- [Huang, 1963] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., London (1963).
- [Wagner et al., 1999] F. Wagner, D. Gensburg und J. Heide, *Potts Model on a Cayley Tree and logistic equation*, *J. Phys. A* **32** (1999).
- [Römer et al., 1994] H. Roemer und T. Filk, *Statistische Mechanik*, VCH, Weinheim (1994).
- [Tsallis et al., 1982] C. Tsallis und A.C.N. Mangelhaes, *Phys. Rep.* **268** (1982).
- [Voglis et al., 1998] N. Voglis und C. Efthymiopoulos *Angular dynamical spectra. A new method for determining frequencies, weak chaos and cantori*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** (1998).
- [Blobel et al., 1998] V. Blobel und E. Lohrmann, *Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse*, Teubner Studienbücher, Stuttgart (1998).

- 
- [Wu, 1978] F.Y. Wu, *Percolation and the Potts Model*, J. Stat. Phys. **18** (1978).
- [Stauffer et al., 1995] D. Stauffer und A. Aharony, *Perkolatinstheorie*, VCH, Weinheim (1995).
- [Bethe, 1935] H.A. Bethe, Proc. R. Soc. A **150** (1935).
- [Beck et al., 1993] C. Beck und F. Schlögel, *Thermodynamics of chaotic systems*, Cambridge University Press, (1993).
- [Kasteleyn et al., 1969] P.W. Kasteleyn und C.M. Fortuin, *Phase Transitions in Lattice Systems with Random Local Properties*, J. Phys. Soc. Japan (Suppl.) **26** (1969).

# Danksagung

Zum Schluß möchte ich meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. F. Wagner sehr für seine unermüdete Gesprächsbereitschaft und Unterstützung während der gesamten Zeit der Erstellung dieser Arbeit danken. Er war nahezu täglich bereit, auf meine Fragen trotz anderer Aufgaben intensiv einzugehen und mit mir Lösungen von auftretenden Problemen auszuarbeiten. Dafür möchte ich ihm sehr danken.

Außerdem gilt mein besonderer Dank Herrn Prof. Dr. D. Gensing, der in guter Kooperation mir häufig richtige und wichtige Ideen und Hilfestellungen gegeben hat.

Den Diplomanden und Doktoranden des Instituts für Theoretische Physik und Astrophysik danke ich für ein angenehmes und aufheiterndes Arbeitsklima während der gesamten Jahre. Sie alle haben mich auch fachlich unterstützt.

Herausheben möchte ich an dieser Stelle meinen Mitbewohner Dipl.-Phys. Claus-Henning Solterbeck für zahlreiche Hilfen im Bereich der Computerproblematik, aber auch für interessante Gespräche. Ebenso fand ich bei Dipl.-Phys. Thomas Strasser und bei Dr. Jens Christian Claussen große Unterstützung.

Dipl.-Phys. Oliver Tiedje, Dipl.-Phys. Sven Brodersen und Dipl.-Phys. Robert Bahnsen haben nicht nur ständig zu meiner Motivation beigetragen, sondern mir auch entscheidend unter anderem bei Codierungsproblemen geholfen.

Der gesamten astrophysikalischen Abteilung möchte ich für die freundschaftlichen Gespräche danken, die teilweise auch den Rahmen der Physik verließen.

Ich möchte Dipl.-Volkswirtin Martina Limmer danken für die Durchsicht dieser Arbeit, vor allem aber dafür, daß sie mich gerade in der Endphase der Dissertation durch ihre lebenslustige und liebenswerte Art aus "meinem Chaos" zurück auf den Boden holte.

Vor allem möchte ich aber meiner Mutter danken, die mich während der ge-

samten Phase meines Studiums (und auch davor) optimal unterstützte. Ihrem Einsatz ist es zuzuschreiben, daß diese Arbeit erst möglich wurde.

# Lebenslauf

Name: **Heide**  
Vorname: **Jesper**  
Geburtsdatum: 18. März 1971  
Geburtsort: Kiel  
Staatsangehörigkeit: Deutsch  
Wohnort: Gutenbergstraße 8, 24118 Kiel  
Telefon: 0170 / 32 27 039  
Familienstand: ledig

## Ausbildung:

1981-1990 **Humboldt-Gymnasium Kiel, Abitur**  
Leistungskurse: Mathematik, Physik

1990-1991 **Grundwehrdienst, 7. Schnellbootgeschwader**  
Ausbildung zum Navigator

1991-1993 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
Grundstudium der Physik und Vordiplom

1991-1993 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
Grundstudium der Mathematik und Vordiplom

1993-1995 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
Hauptstudium der Physik

1995-1996 Als Konsequenz eines schweren Unfalls werden zwei Pausensemester nötig, die zur vollständigen Behebung aller Folgen beansprucht werden.

1996-1997 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
Diplomprüfungen Physik  
Einjährige Diplomarbeit in der Theoretischen Physik  
Thema: "Simulationsergebnisse und Feedback in Neuronalen  $\Phi^4$ -Netzen"  
Betreuer: Prof. Dr. F. Wagner

seit Jan. 1998 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
Dissertation  
Doktorvater: Prof. Dr. F. Wagner  
Finanzierung: Max Planck-Promotionsstipendium der Landesbank SH



**Praktische Erfahrung:**

- 1992 **Bauunternehmen Wöhlermann GmbH**  
Zweimonatiges Praktikum
- 1995 **Bauhaus GmbH & Co. KG Nord**  
Zweimonatiges Praktikum
- 1994-1998 **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**  
6 Semester Lehrveranstaltungen in der Theoretischen Physik
- 1999 **Bain & Company Germany Inc., München**  
Dreimonatiges Praktikum als Consultant in der strategischen Unternehmensberatung

**Weitere Aktivitäten:**

- 1981-1990 **THW Kiel**  
Leistungssportler im Bereich Hallenhandball, 3. der deutschen Jugendhandballmeisterschaften 1986, Norddeutscher Meister, mehrfacher Landesmeister, Jugendtrainer.

Kiel, 13. September 2000

# Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich an Eides Statt, daß die vorliegende Abhandlung - abgesehen von der Beratung durch meine akademischen Lehrer - nach Inhalt und Form meine eigene Arbeit ist. Sie hat weder ganz noch zum Teil bereits an einer anderen Stelle im Rahmen eines Prüfungsverfahrens vorgelegen.

Kiel, im September 2000