1 Einleitung

Spinglasmodelle können als eine Art Prototyp ungeordneter Systeme mit Frustration angesehen werden. Derartige Systeme sind nicht nur in der Physik wichtig, sondern auch zunehmend bedeutend bei Fragestellungen in anderen Gebieten der Naturwissenschaften und auch der Technik, wie z.B. beim Problem des Coulomb Glases [1, 2], beim sogenannten Problem des Handelsreisenden [3] oder bei der Modellierung der Proteinfaltung [4]. Die Frustration der Systeme kann dabei durch die unterschiedlichsten Mechanismen wie etwa das Auftreten konkurrierender Wechselwirkungen, einschränkende Randbedingungen, geometrische bzw. topologische Nebenbedingungen oder auch durch die Unordnung selbst verursacht werden.

Die Schwierigkeit ist dabei stets, daß an das betrachtete System widersprüchliche Forderungen gestellt werden. In ihrer mathematischen Formulierung und Modellierung lassen sich die Probleme oftmals auf eine Grundaufgabe der nichtlinearen diskreten Optimierung der folgenden Art abbilden:

$$E_0 = \min_{s_i = 1 \vee -1} \left(-\sum_{i<j} I_{ij} s_i s_j \right). \tag{1.1}$$

Der zu minimierende Term in (1.1) entspricht dem Hamiltonian eines Ising-Spinsystems ohne äußerem Feld. Abhängig von der Verteilung der Wechselwirkungen I_{ij} und der zugrundeliegenden Systemgeometrie kann die Frustration in diesem System sowohl durch die Unordnung, als auch durch die konkurrierenden Wechselwirkungen erzeugt werden.

Die Lösung von (1.1) liefert offenbar den Grundzustand des betrachteten Systems. Da bei tiefen Temperaturen hoch angeregte Zustände sehr unwahrscheinlich sind, wird das Tieftemperaturverhalten im wesentlichen durch die Struktur dieses Grundzustands und der energetisch tiefliegenden Anregungen bestimmt. Daher interessieren oftmals zusätzlich zu den optimalen auch die postoptimalen Lösungen von (1.1).

Zur Behandlung des obenstehenden Problems wurden die verschiedensten exakten Verfahren entwickelt. Aufgrund der Komplexität des Problems und der großen Zahl von 2^N Konfigurationen eines Systems mit N Spins ist die einfachste Methode der exakten Enumeration aller Konfigurationen auf Systemgrößen bis etwa $N = 30\ldots40$ beschränkt. Eine Methode zur Berechnung der vollständigen Zustandssumme für $L \le 36$ wurde in [5] beschrieben.

Für die spezielle Systemklasse der zweidimensionalen $\pm I$ Spingläser auf einem quadratischen $L \times L$ Grundgitter konnte man zeigen, daß man den Grundzustand in nur polynomial mit der Systemgröße N wachsender Zeit finden kann [6–9]. Allgemeinere Probleme, wie z.B. das zweidimensionale System mit äußerem Feld [10] oder dreidimensionale Systeme [11], gehören zur Klasse der sogenannten NP-harten Probleme [12]. Dies macht es unwahrscheinlich, daß für diese Systemklassen ein ebenso effizienter Algorithmus wie für die rein zweidimensionalen Probleme ohne äußeres Feld gefunden werden kann. Die für diese Systeme bis heute gefundenen exakten Algorithmen sind daher aufgrund des exponentiell wachsenden numerischen Aufwands stets stark in der maximal untersuchbaren Systemgröße begrenzt.

So wurde unter Ausnutzung der Ergebnisse der nichtlinearen kombinatorischen Optimierung in [13] ein branch-and-bound Algorithmus erstmalig zur Grundzustandssuche in zweidimensionalen amorphen Ising-Systemen mit $N = 40\ldots60$ antiferromagnetisch wechselwirkenden Spins angewendet [14–16]. Die erste exakte Analyse der Grundzustandsmorphologie eines Spinsystems mit periodischen Randbedingungen wurde in [7] für $L = 20$ mit der Methode des sogenannten „minimal matchings“ frustrierter Plaquetten [17] durchgeführt.

Kubische $\pm I$ Systeme der Größe $L = 4$ mit periodischen Randbedingungen wurden in [18] mit Hilfe eines rekursiven branch-and-bound-Algorithmus untersucht [19]. Dabei wurden alle Grundzustände und energetisch tiefliegenden Anregungen bezüglich ihrer Verbindungen im Konfigurationsraum klassifiziert. Grundzustandsberechnungen für analoge Systeme, jedoch mit offenen Randbedingungen, wurden auch auf Grundlage der Transfermatrixmethode durchgeführt [20].

Neben diesen exakten Verfahren gibt es eine fast unüberschaubare Vielfalt von numerischen Näherungsverfahren (siehe z.B. [21]). Die meisten von ihnen basieren prinzipiell auf Monte-Carlo-Methoden (siehe z.B. [22] für dreidimensionale $\pm I$ Spingläser bis $L = 64$). Abgesehen davon, daß das eigentliche Hauptziel dieser Verfahren oftmals nicht die Grundzustandssuche, sondern z.B. die Simulation dynamischer Vorgänge oder die Untersuchung der Gleichgewichtseigenschaften bei endlichen Temperaturen sind, haben die einfachen Verfahren stets in irgendeiner Form Probleme mit einer kritischen Verlangsamung der Dynamik. Diese verhindert, daß das System bei tiefen Temperaturen seinen wirklichen Gleichgewichtszustand erreicht. Unterhalb einer kritischen Temperatur ist es dem System nur noch schwer möglich, die im Phasenraum existierenden energetischen und entropischen Barrieren zu überwinden.

Es gibt verschiedene Ansätze, dies zu umgehen. Beim multikanonischen Zugang werden die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den einzelnen Energieniveaus entsprechend der Zustandsdichte angepaßt und die störenden Energiebarrieren in gewisser Weise einfach flach gedrückt [23]. Die große Gruppe der Clusteralgorithmen umgeht das Problem durch gezieltes Umklappen ganzer Spincluster [24, 25]. Bei den biologisch motivierten genetischen Algorithmen und auch bei den parallelen Algorithmen verfolgt man die Entwicklung eines ganzen Ensembles von einzelnen weit im Konfigurationsraum verteilten Zuständen [26–28].

Ein grundsätzliches Problem aller dieser Näherungsverfahren bei der Grundzustandssuche ist jedoch stets die Frage nach der Exaktheit der gefundenen Lösung und deren Entartung. Ein wesentliches Gütekriterium bei der Beurteilung numerischer Näherungsverfahren oder analytischer Zugänge über Reihenentwicklungen [29, 30] ist daher der Vergleich mit den Ergebnissen exakter numerischer Verfahren.

Exakte Grundzustandsberechnungen sind in gewissem Sinne komplementär zu den Monte-Carlo Verfahren. Eine sinnvolle Kombination beider Verfahren ermöglicht eine Analyse der energetisch tiefliegenden Strukturen zumindest in einem lokal begrenzten Gebiet des Phasenraums [31, 32].

Wie schon erwähnt, ist die Frustration eine wesentliche Eigenschaft aller komplexen ungeordneten Systeme. Toulouse führte für $\pm I$ Spingläser auf Gittern ein lokales Maß für die Frustration eines geschlossenen Rings von Wechselwirkungen ein. Als globales Maß für die Frustration wurde in [21] ein sogenannter Misfit-Parameter eingeführt, der die globalen energetischen Effekte der Frustration berücksichtigt und auch auf allgemeinere Fragestellungen, wie z.B. das „*p*-partitioning" Problem oder Potts-Gläser, anwendbar ist.

Allgemein führt die Frustration eines Systems in dessen Konfigurationsraum meist zu einer komplexen Energielandschaft mit vielen Energieminima und -maxima. Gewöhnlich wird dies durch ein schematisches Bild wie in Abbildung 1.1 veranschaulicht. Die komplizierte Struktur dieser Energielandschaft scheint der Schlüssel zum Verständnis des ungewöhnlichen Relaxations- und Alterungsverhaltens ungeordneter komplexer Systeme zu sein. Bis heute ist jedoch selbst im einfachen Fall eines Ising-Spinglas-Modells sehr wenig über die Details dieser Struktur bekannt.

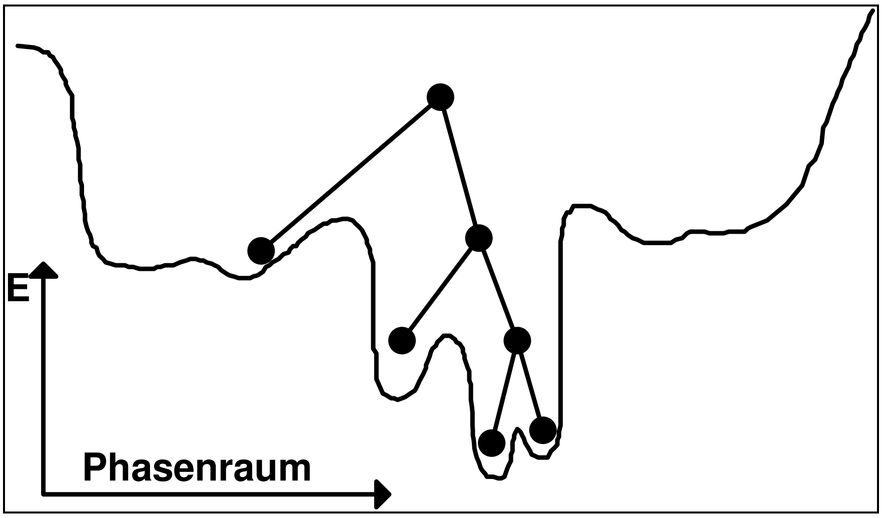

Abbildung 1.1 Schematisches Bild der Phasenraumstruktur komplexer Systeme

Rein phänomenologisch kann das anomal langsame dynamische Verhalten dieser Systeme mit empirischen Gesetzen beschrieben werden. Meist wird das Kohlrausch-Gesetz [33] benutzt, um die Zeitabhängigkeit physikalischer Eigenschaften mit sogenannten „stretched exponentials“ zu beschreiben.

Es existieren verschiedene Ansätze für ein physikalisches Verständnis dieses Zusammenhangs. Die heuristische Basis dazu liegt in der komplizierten Morphologie des Phasenraums und der Annahme, daß dieser durch bifurkationsartiges Aufbrechen in verschiedene Phasenraumkomponenten aufgeteilt ist [34, 35]. Eine komplexe netzartige Struktur wird durch Untersuchungen mit Hilfe des „damage-spreading“ Verfahrens [36] in Analogie zur Perkolation in hochdimensionalen Hyperwürfeln [37] vorgeschlagen.

Obwohl die energetisch tiefliegenden Zustände nicht wie bei Perkolationsprozessen zufällig im Phasenraum verteilt sind, sondern wesentlich stärker korreliert sind, und die Konzentration der Zustände wesentlich geringer als bei typischen Perkolationsclustern ist [18], konnten unter Annahme solch einer zufälligen Verteilung qualitativ gute Übereinstimmung zum Relaxationsverhalten in Spinglas- und ähnlichen Systemen erzielt werden [36].

In verschiedenen mesoskopischen Modellen werden spezielle plausible Annahmen für die Phasenraumstruktur gemacht. So wurden mit der Methode des steilsten Abstiegs für verschiedene Modellsysteme Baumstrukturen im Konfigurationsraum gefunden [38]. In [39] wurde gezeigt, daß die Annahme einer solchen einfachen Baumstruktur ausreichend ist, um wesentliche Eigenschaften des Relaxationsverhaltens zu reproduzieren. Dabei wurden benachbarte Zustände im Phasenraum, die ohne Energieänderung erreichbar sind, durch Knotenpunkte ähnlich der Baumstruktur in Abbildung 1.1 repräsentiert. Die innere Struktur dieser Knoten wurde vernachlässigt.

Analytische Zugänge auf Basis der Replica-Methode ergaben für das langreichweitige Sherrington-Kirckpatrick (SK) Modell [40] eine spezielle hierarchische Topologie des Phasenraums, welche durch eine ultrametrische Organisation der verschiedenen durch Energiebarrieren getrennten metastabilen Zustände gekennzeichnet ist [41]. Die Ultrametrizität entspricht im Prinzip einer speziellen Korrelation der Grundzustandstäler, bei der die Dreiecksungleichung derart verschärft wird, daß nur noch gleichseitige oder gleichschenklige Dreiecke auftreten. Dabei sind die gleich langen Seiten stets die längeren (siehe z.B. [42]).

Dieses Bild scheint konsistent mit exakten Ergebnissen für Systeme der Größe $N = 24$ [43], heuristischen Ergebnissen [44] und Experimenten [45, 46] zu sein. Auf der anderen Seite gibt es jedoch auch Argumente gegen eine derartig hierarchisch beschränkte Dynamik zumindest für bestimmte Zeitskalen [47]. Unklar ist, ob das ultrametrische Szenarium auch für kurzreichweitige Systeme gültig ist.

Ein alternatives Bild ist das sogenannte Tröpfchen-Modell („droplet model“) [48–50]. Ausgehend von der Annahme eines einzelnen Grundzustands (abgesehen von der Spiegelsymmetrie des Hamiltonians) wird ein Tröpfchen der Längenskala l durch denjenigen Multispincluster gemeinsam flippender Spins gebildet, der einen bestimmten Spin enthält und die geringste Anregungsenergie beim Klappen des Clusters besitzt [49]. Derartige Tröpfchen wurden auch schon in zweidimensionalen amorphen Ising-Systemen mit antiferromagnetischen Wechselwirkungen gefunden ($N = 40\ldots60$) [15, 16, 51]. Die Voraussagen des Tröpfchen-Konzepts für niederenergetische Anregungen stimmen qualitativ mit dem in Experimenten gefundenen Relaxationsverhalten der Magnetisierung von Spingläsern überein [52]. Weitere theoretische Untersuchungen, z.B. zum Altern in Spingläsern [53], stützen ebenfalls das Tröpfchenbild. Die Frage, ob das Tröpfchenmodell für kurzreichweitige Spingläser in Widerspruch zu den hierarchischen Konzepten für das unendlich-reichweitige SK-Modell steht, wird zur Zeit kontrovers diskutiert (siehe z.B. [46, 54, 55]). Speziell die Gültigkeit der Tröpfchentheorie in mehr als zwei Dimensionen ist noch ungeklärt [56, 57].

Einige der noch offenen Fragen können vermutlich mit Hilfe mikroskopischer Konzepte behandelt werden. Erste Untersuchungen, die von der exakten Kenntnis der niederenergetischen Phasenraumstruktur komplexer Systeme ausgehen, lassen diesen Zugang vielversprechend erscheinen. So wurden in [3] alle mit einer suboptimalen Lösung des Handelsreisenden-Problems ($N = 32$) verbundenen Konfigurationen betrachtet. Diese Zustände formen eine Art 'Phasenraummulde' um dieses Minimum herum. Die benutzte Methode wurde auch auf zweidimensionale ($L = 8$) und dreidimensionale ($L = 4$) kurzreichweitige Ising-Spinglas-Systeme mit Gauß-verteilten Wechselwirkungen erweitert [32].

Während das Verhalten ferromagnetischer Systeme und deren Konfigurationsraumstruktur im wesentlichen durch die Existenz zweier jeweils ferromagnetischer Grundzustände geprägt ist, tritt bei Zunahme der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen p_{afm} eine kritische Konzentration p_{c} auf, bei welcher der ferromagnetische Grundzustand verschwindet. Numerische Simulationen von $\pm I$ Systemen mit quadratischem Grundgitter deuteten darauf hin, daß dieser Prozeß mit einem kritischen Verhalten der zugrundeliegenden Frustrationsstrukturen verbunden ist, welches bei $15-20\%$ antiferromagnetischer Bindungen in zweidimensionalen und bei etwa 24% in dreidimensionalen Systemen beobachtet wurde [58]. Analytische Betrachtungen mittels Reihenentwicklungen führten für derartige Systeme auf $p_{\mathrm{c}}(2d) \approx 9.9\%$ bzw. $p_{\mathrm{c}}(3d) \approx 12-13\%$ [30]. Im Gegensatz dazu führten Untersuchungen an zweidimensionalen quadratischen Systemen zu einem kritischen Verhalten von Spinclustern im Realraum bei 14.5% antiferromagnetischer Bindungen [59]. Dieser Wert stimmt auffallend mit der kritischen Konzentration des sogenannten „annealed model“ überein [60].

Unter Anwendung der exakten Methode des „minimal matching“ wurde in [7] abhängig von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen für zweidimensionale quadratische Systeme drei verschiedene Regimes mit zwei Übergangskonzentrationen vorgeschlagen. Bei geringen Konzentrationen p_{afm} ist der Grundzustand fixiert und ferromagnetisch. Die in allen Grundzuständen fixierten Bindungen bilden einen perkolierenden Cluster durch das gesamte System. In der Region von $10-15\%$ wird der Grundzustand durch unendlich ausgedehnte Domänen von Spins gleichen Vorzeichens („random-antiphase state“ RAS) charakterisiert. Domänen mit entgegengesetzter Magnetisierung werden durch magnetische Wände getrennt. Der Cluster fixierter Bindungen bleibt jedoch weiterhin perkolierend. Im Bereich hoher Konzentrationen werden die Gebiete gemeinsam klappender Spins endlich und durch sogenannte Bruchlinien („fracture lines“) getrennt. Die Existenz der RAS-Phase wird von anderen Autoren [61] gestützt und in ähnlicher Weise auch auf dreidimensionale Probleme verallgemeinert. Andere Untersuchungen für zweidimensionale Systeme, die vom kritischen Verhalten der Frustrationsstrukturen der untersuchten Systeme ausgehen, finden für quadratische Grundgitter jedoch nur einen Übergang bei $p_c = 10\%$ [62–64].

Für dreidimensionale Systeme ist die Situation ebenfalls noch unklar. Die Spanne der vorgeschlagenen Übergangskonzentrationen reicht von etwa 13% [30] bis 27% [7] für die verschiedenen Verfahren [11, 61, 65–68]. Die jüngsten Ergebnisse in [67] liefern eine Übergangskonzentration von 15.4% ausgehend von einer Verallgemeinerung der Analyse der Frustrationsstrukuren in zwei Dimensionen. Die Existenz und gegebenenfalls der Charakter einer RAS-Phase in drei Dimensionen ist noch weitgehend ungeklärt.

In der Diskussion der kritischen Phänomene beim Übergang von ferromagnetischen zu spinglasartigen Systemen wurde bisher im allgemeinen nur der Charakter der Strukturen im Realraum[1] dieser Systeme berücksichtigt. Es ist jedoch anzunehmen, daß sich das kritische Verhalten der Realraumstrukturen eines Systems auch in den Eigenschaften seines Konfigurationsraums widerspiegelt. Den Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit bildet daher die Untersuchung der Eigenschaften des Konfigurationsraums von ungeordneten $\pm I$ Ising-Systemen und deren Veränderung bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen.

Ausgangspunkt dieser Untersuchungen ist die exakte Bestimmung aller Spinkonfigurationen des Grundzustands und der niederenergetischen Anregungen endlicher zwei- bzw. dreidimensionaler $\pm I$ Ising-Spinsysteme auf quadratischen Grundgittern mittels der Methode des rekursiven „branch-and-bound“ [13]. Die dabei gefundenen Spinkonfigurationen werden entsprechend ihrer Nachbarschaftsbeziehungen im Konfigurationsraum analysiert und in verschiedene Cluster bzw. Täler des Konfigurationsraums sortiert. Diese Cluster und Täler bilden die Grundlage für weitere quantitative Untersuchungen. Die Prinzipien und Einzelheiten der verwendeten Methoden, sowie eine Diskussion ihres numerischen Aufwands werden in Kapitel **3** detailierter erörtert.

Zuvor werden jedoch im zweiten Kapitel die allgemeinen Eigenschaften des untersuchten Modells zusammengestellt. In diesem Zusammenhang wird auf das Konzept der Frustration in zwei und drei Dimensionen etwas ausführlicher eingegangen. Zur besseren Beschreibung der

---

[1] Als Realraum wird im weiteren das Gitter bezeichnet, auf dem die Spins angeordnet sind. Im Gegensatz dazu ist der Konfigurationsraum der Raum der verschiedenen Spinkonfigurationen des Systems.

Strukturen im Konfigurationsraum erweist sich die Einführung einiger neuer Begriffe als sinnvoll und notwendig.

In Kapitel 4 werden dann zunächst die globalen Grundzustandseigenschaften Energie und Entropie untersucht. Trotz der geringen Größe der untersuchten System stimmen die Ergebnisse qualitativ und bei Extrapolation auf unendliche Systemgrößen auch quantitativ gut mit den für wesentlich größere Systeme gefundenen Resultaten anderer Autoren überein. Damit sollten diese kleinen Systeme schon geeignete Objekte zur detaillierten Untersuchung der prinzipiellen Strukturen und Eigenschaften des Konfigurationsraums sein.

Die gefundenen Strukturen sind im wesentlichen durch die Existenz von Grundzustandsclustern im Konfigurationsraum geprägt, deren Eigenschaften in Kapitel 5 ausführlich diskutiert werden. Dabei werden speziell die Entartung, die Gesamtmagnetisierung und verschiedene Abstandsmaße im Konfigurationsraum numerisch untersucht. Es zeigt sich, daß man das Verhalten der betrachteten Größen im Bereich geringer Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen recht gut durch ein einfaches Modell frei beweglicher Einzelspin und freier Spincluster im Realraum des Systems verstehen kann.

Über einen Vergleich der Entartung mit den Abständen im Konfigurationsraum ergibt sich die Möglichkeit, indirekt Information über den tatsächlichen Charakter der Strukturen im Realraum des Systems zu gewinnen. Dabei erweist sich das Modell freier Einzelspins schon bei kleinsten Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen im System als inkorrekt. Es kann jedoch durch die Annahme von sukzessiv klappenden Spinketten im Realraum sinnvoll erweitert werden. Im Rahmen dieses erweiterten Modells werden anschließend zusammenfassend die wesentlichsten Effekte im Konfigurations- und im Realraum bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen diskutiert.

Der Untersuchung des Grundzustandes schließt sich im vorletzten Kapitel eine detaillierte Analyse der niederenergetischen Anregungen im Konfigurationsraum an. Diese führt im speziell betrachteten Fall maximaler Frustration ($p_{\mathrm{afm}} = 50\%$) auf eine sehr komplexe Energielandschaft, welche durch die Existenz sogenannter mikrokanonischer Cluster geprägt ist. Abschließend wird, ausgehend von dieser gefundenen Clusterstruktur des Konfigurationsraums, ein vereinfachtes Clustermodell des Phasenraums als möglicher Ansatzpunkt zur weiteren Untersuchung des Langzeitrelaxationsverhaltens der behandelten Systeme vorgeschlagen und diskutiert.