2 Modell

2.1 Beschreibung

In dieser Arbeit werden im wesentlichen zwei- bzw. dreidimensionale, endliche Ising-Spinglas-Modelle auf quadratischen Grundgittern mit zufällig gewählten $\pm I$ Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn betrachtet. In allen Richtungen des Gitters werden periodische Randbedingungen angenommen. Die Wechselwirkungen werden entsprechend der Verteilungsfunktion

$$P\left(I_{ij}\right) = p_{\mathrm{afm}}\delta\left(I_{ij} + I\right) + \left(1 - p_{\mathrm{afm}}\right)\delta\left(I_{ij} - I\right) \tag{2.1}$$

zufällig gewählt. Dabei bezeichnet p_{afm} die Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen im System. Ohne äußeres Magnetfeld lautet somit die Energiefunktion:

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} I_{ij} s_i s_j \ . \tag{2.2}$$

Die Summe läuft über nächste Nachbarn im Gitter. Da durch eine einfache Umeichung der Übergang zu dimensionslosen Größen möglich ist, werde im weiteren $|I| = 1$ und $|s_i| = 1$ gesetzt.

Die Form des Hamiltonians, die zugrundeliegende Gittergeometrie und die Verteilung der Wechselwirkungen führen zu verschiedenen Symmetrien des Gesamtproblems (siehe z.B. [69]). So erhält man aufgrund der Diskretheit der Wechselwirkungsenergien in (2.2) auch diskrete Energieniveaus. Für beliebige Gitter ergibt sich dabei, daß die Energiedifferenz zwischen benachbarten Niveaus stets ein ganzzahliges Vielfaches von $2|I|$ ist. Bei gerader Koordinationszahl des Gitters, wie z.B. bei quadratischem Gitter, treten sogar nur Vielfache von $4|I|$ auf. Da die Energielücke nicht von der Systemgröße abhängig ist, verschwindet die Energiedifferenz pro Spin im Grenzfall unendlicher Systemgröße N mit $1/N$.

Unabhängig von Gittergeometrie und Verteilung der Wechselwirkungen ist der Hamiltonian stets invariant gegenüber einer lokalen Eichtransformation der Form

$$\left.\begin{aligned} s_i' &= \tau_i s_i \\ I_{ij}' &= \tau_i I_{ij} \tau_j \end{aligned}\right\} \tau_i, \tau_j = \pm 1 \tag{2.3}$$

am Spin i [17]. Die angegebene Transformation ändert das Vorzeichen des Spins i und aller seiner Wechselwirkungen. Mit dem Hamiltonian bleiben auch alle energetischen thermodynamischen Eigenschaften des Systems bei dieser lokalen Transformation erhalten.

Da diese Transformation auch nacheinander für verschiedene Spins ausgeführt werden kann, ergibt sich als Spezialfall, daß die Energiefunktion (2.2) auch invariant gegen das gleichzeitige Umklappen aller Spins des Systems ist. Bei einem ferromagnetischen System äußert sich diese Symmetrie in der Existenz der beiden ferromagnetischen Grundzustände (alle Spins auf bzw. alle Spins ab).

Viele geordnete Gitter lassen sich derart in genau zwei disjunkte Untergitter aufteilen, daß die Spins an jeder beliebigen Wechselwirkung stets zu verschiedenen Untergittern gehören. Für quadratische Grundgitter läßt sich dies offenbar stets erreichen. Abbildung 2.1 zeigt eine derartige Aufteilung für ein kubisches Gitter.

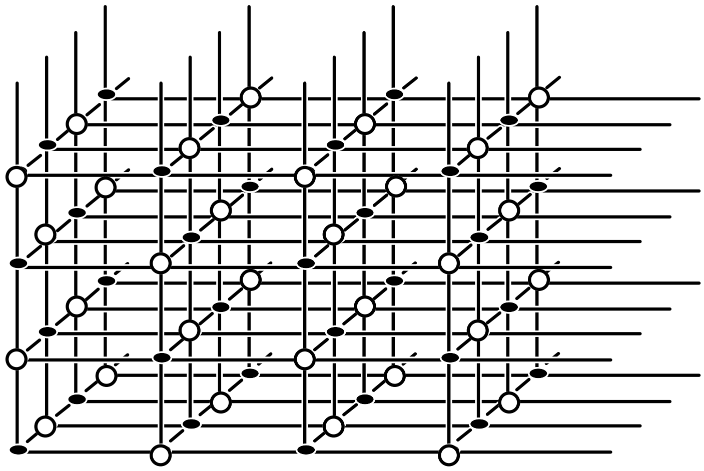

Abbildung 2.1 Zerlegung des kubischen Gitters in genau zwei disjunkte Untergitter

Wendet man nun die oben angegebene lokale Eichtransformation auf jeden Spin eines Untergitters an, so ändert sich das Vorzeichen jeder Wechselwirkung des Systems. Ändert man nun erneut das Vorzeichen aller Bindungen ohne die Spins zu verändern, so erhält man wieder das Ausgangssystem von Wechselwirkungen, wobei der Hamiltonian jedoch sein Vorzeichen geändert hat. Somit können durch einfaches Klappen aller Spins eines Untergitters aus den Zuständen tiefster Energie die Zustände höchster Energie gewonnen werden und umgekehrt. Die Zustandsdichte der Energie ist entsprechend symmetrisch zur Energie Null.

2.2 Frustration

2.2.1 Einleitung

Der Begriff der *Frustration* kennzeichnet ein grundlegendes Konzept zur Erklärung der interessanten Eigenschaften ungeordneter Systeme [17], welches in diesem Kapitel noch einmal kurz erläutert werden soll. Die Frustration eines Systems entsteht zumeist durch die Existenz sich prinzipiell widersprechender Forderungen oder Nebenbedingungen, denen das System gleichzeitig gehorchen soll. Derartige widersprüchliche Restriktion können z.B. allein durch das Auftreten sogenannter konkurrierender Wechselwirkungen, aber auch durch den Charakter der Randbedingungen, durch vorhandene Störstellen oder durch geometrische Nebenbedingungen erzeugt werden. In den in dieser Arbeit betrachteten Systemen wird die Frustration durch das unterschiedliche Vorzeichen und die Unordnung der Wechselwirkungen verursacht. Dadurch steht die Minimierung der lokalen Energien der einzelnen Spins im Widerspruch zur Minimierung der Gesamtenergie.

Diese Minimierung der Gesamtenergie bedeutet für ein System von wechselwirkenden Spins, daß möglichst alle Wechselwirkungen befriedigt sein sollten. Bei einem Ferromagneten ist dies durch Parallelstellung aller Spins möglich. Sind konkurrierende – in unserem Fall also zusätzlich antiferromagnetische – Wechselwirkungen vorhanden, so ist eine Befriedigung aller Bindungen nicht immer möglich. Unabhängig von der Dimension des Systems kann es bei einer beliebigen geschlossenen Kette von wechselwirkenden Spins vorkommen, daß eine Wechselwirkung nicht optimal eingestellt werden kann. Man erhält eine einzelne, sogenannte *gebrochene Bindung*.

Die betrachtete Kette von Spins wird allgemein als *Plaquette* bezeichnet. Aus zwei Plaquetten mit mindestens einer gemeinsamen Bindung kann durch Fortlassen dieser Bindung eine neue größere Plaquette zusammengesetzt werden. Plaquetten, die sich nicht aus anderen kleineren Plaquetten zusammensetzen lassen, heißen *elementare Plaquetten*. Die Form dieser Plaquetten ist natürlich von der Systemgeometrie abhängig. Meist entspricht die Form der elementaren Plaquetten der Form des zugrundeliegenden Grundgitters des System.

Betrachtet man für eine beliebige Spinkonfiguration das Produkt

$$\Phi = \prod_{Loop} I_{ij} s_i s_j \tag{2.4}$$

aller Energieterme $I_{ij} s_i s_j$ auf dem Rand einer beliebigen Plaquette, so erhält man für den im weiteren betrachteten Fall von $\pm I$ Wechselwirkungen $\Phi = \pm 1$ [17]. Da eine unbefriedigte Bindung mit einem Term -1 und eine befriedigte Bindung mit einem Term +1 in das Produkt eingeht, erhält man für eine ungerade Anzahl von gebrochenen Bindungen $\Phi = -1$ und ansonsten $\Phi = +1$. Φ ist nur von den I_{ij} abhängig, da jede Spinvariable doppelt bei der Berechnung von Φ eingeht und $s_i s_i = 1$ ist. Deshalb ist Φ invariant gegenüber dem Klappen eines beliebigen Spins. Das bedeutet, daß eine ungerade Anzahl von gebrochenen Bindungen in einer Plaquette auch nach beliebigen Spin-Klapp-Prozessen ungerade bleibt. Somit können für $\Phi = -1$ niemals alle Bindungen befriedigt werden. Man nennt diese Plaquette frustriert. Φ ist ein lokales Maß für die Frustration.

Setzt man mehrere benachbarte elementare Plaquetten zu einer Gesamtplaquette zusammen, so multiplizieren sich einfach die einzelnen Frustrationswerte Φ der beteiligten Plaquetten. Da in diesem Produkt alle Faktoren der Bindungen, die zu zwei der elementaren Plaquetten gehören, doppelt auftreten und sich somit zu Eins ergänzen, tragen tatsächlich nur die 'echten' Randbindungen der resultierenden Plaquette bei. Damit wird eine frustrierte Gesamtplaquette immer aus einer ungeraden Anzahl frustrierter elementarer Plaquetten zusammengesetzt.

2.2.2 Konzentration frustrierter Plaquetten

Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer frustrierten Plaquette entspricht der Wahrscheinlichkeit, in dieser Plaquette eine ungerade Anzahl von gebrochenen also eine ungerade Zahl von antiferromagnetischen Bindungen anzutreffen. Wenn p_{afm} die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer antiferromagnetischen Wechselwirkung ist, so ist $(1-p_{\mathrm{afm}})$ die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer ferromagnetische Wechselwirkung. Die Wahrscheinlichkeit für eine beliebige Plaquette aus n Spins ist somit:

$$\begin{aligned} 1^n &= \left((1-p_{\mathrm{afm}})+p_{\mathrm{afm}}\right)^n \\ &= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(1-p_{\mathrm{afm}})^{n-k}\,p_{\mathrm{afm}}^{k}\,. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Die Wahrscheinlichkeit p_{fP} für eine frustrierte Plaquette ergibt sich aus der Summation der Terme mit ungeraden Potenzen von p_{afm} in (2.5) zu

$$\begin{aligned} p_{\mathrm{fP}} &= P(\Phi=-1) \\ &= \sum_{l=0}^{n/2}\binom{n}{2l+1}(1-p_{\mathrm{afm}})^{n-2l-1}\,p_{\mathrm{afm}}^{2l+1}\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n/2}\binom{n}{2l+1}(1-p_{\mathrm{afm}})^{n-2l-1}\,p_{\mathrm{afm}}^{2l+1} &= \frac{1}{2}\left\{\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(1-p_{\mathrm{afm}})^{n-k}\,p_{\mathrm{afm}}^{k}\right. \\ &\qquad \left. -\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(1-p_{\mathrm{afm}})^{n-k}(-1)^k\,p_{\mathrm{afm}}^{k}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left(\left((1-p_{\mathrm{afm}})+p_{\mathrm{afm}}\right)^n-\left((1-p_{\mathrm{afm}})-p_{\mathrm{afm}}\right)^n\right) \end{aligned} \tag{2.7}$$

und (2.6) erhält man

$$p_{\mathrm{fP}} = \frac{1}{2}\left\{1-(1-2p_{\mathrm{afm}})^n\right\}. \tag{2.8}$$

Für den Spezialfall eines quadratischen Grundgitters ergibt sich demzufolge (siehe auch [68])

$$p_{\mathrm{fP}} = 4p_{\mathrm{afm}}(1-p_{\mathrm{afm}})\left\{p_{\mathrm{afm}}^2+(1-p_{\mathrm{afm}})^2\right\}. \tag{2.9}$$

Abbildung 2.2 zeigt die Konzentration frustrierter Plaquetten in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen im System für diesen Fall. Oberhalb von $p_{\mathrm{afm}}=0.3$ ändert sich der Frustrationsgrad des Systems nur noch wenig.

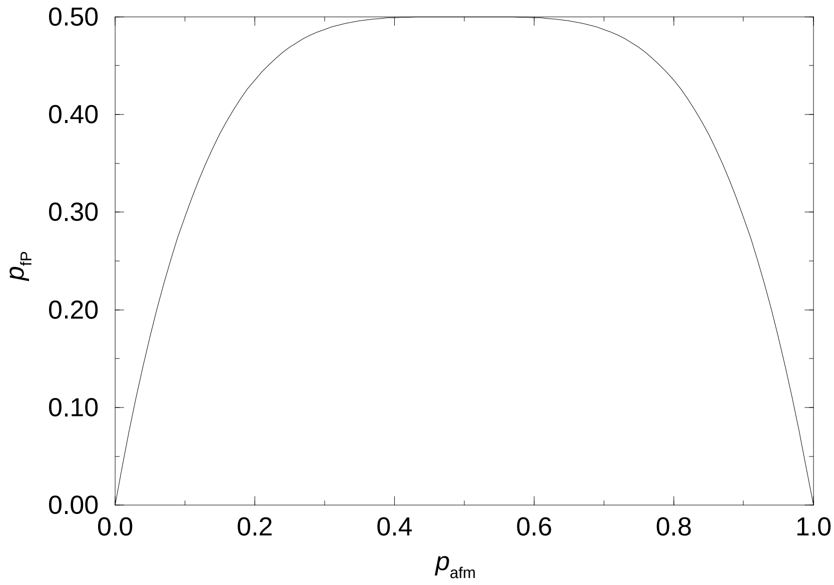

Abbildung 2.2 Konzentration p_{fP} der frustrierten Plaquetten in Abhängigkeit von der Konzentration p_{afm} antiferromagnetischer Bindungen im System für quadratische Grundgitter ($n = 4$) nach (2.8).

Für die Extrema von (2.8) muß gelten:

$$\frac{dp_{\mathrm{fP}}}{dp} = n\left(1 - 2p_{\mathrm{afm}}\right)^{n-1} = 0 \,. \tag{2.10}$$

Die einzige Lösung von (2.10) ist $p_{\mathrm{afm}} = 0.5$. Für ungerade n ist diese Lösung jedoch nur ein Wendepunkt für $p_{\mathrm{fP}}(p)$, so daß das Maximum bei $p_{\mathrm{afm}} = 1$ angenommen wird. Für ein Gitter mit ungerader Anzahl von Bindungen pro elementarer Plaquette erhält man also mit der Wahrscheinlichkeit Eins eine frustrierte Plaquette, falls die Wahrscheinlichkeit für antiferromagnetische Bindungen ebenfalls Eins ist. Realisiert wird dies zum Beispiel in einem triangularen Gitter mit vollständig antiferromagnetischer Wechselwirkung.

Für gerade n – also auch bei quadratischen Grundgittern – verschwindet die Konzentration frustrierter Plaquetten im System bei $p_{\mathrm{afm}} = 0$ und $p_{\mathrm{afm}} = 1$. Bei $p_{\mathrm{afm}} = 0.5$ ergibt sich die maximale Konzentration frustrierter Plaquetten zu $p_{\mathrm{fP}} = 0.5$.

2.2.3 Frustration in zwei Dimensionen

Verbindet man in einem zweidimensionalen System für eine beliebige Spinkonfiguration die Mittelpunkte aller gebrochenen Bindungen mit den Mittelpunkten der jeweils angrenzenden Plaquetten, so sieht man, daß sich Ketten bilden, die offensichtlich nur bei frustrierten Plaquetten (oder am Rand des Systems) beginnen und enden, da nur diese Plaquetten eine ungerade Anzahl von gebrochenen Bindungen haben können. Da jede unbefriedigte Wechselwirkung zu einer Energieerhöhung führt, muß die Gesamtlänge dieser Ketten im Grundzustand minimal sein.

Dies läßt sich durch einen graphentheoretischen Zugang besser verstehen (siehe auch [63]). Ein Gesamtsystem aus Spins und deren Wechselwirkungen läßt sich auch direkt als ein Graph auffassen, bei dem die Knoten den Spins und die Kanten den Wechselwirkungen entsprechen. Eine spezielle Klasse derartiger Graphen bilden die sogenannten *planaren Graphen*. Vereinfacht gesagt, gibt es für planare Graphen stets eine Möglichkeit, sie auf eine Ebene abzubilden, ohne daß sich zwei Kanten dieses Graphen schneiden. Unter anderem bilden speziell die üblichen zweidimensionalen Gitter, wie z.B. triangulare oder quadratische Gitter, planare Graphen.

Bei einem planaren Graphen wird durch den Übergang vom ursprünglichen zum dazugehörigen sogenannten *dualen Graphen* jede elementare Plaquette in einen Knoten überführt und umgekehrt. Die Kanten des ursprünglichen Graphen werden wieder in Kanten des dualen Graphen überführt, wobei ihnen die Stärke der ursprünglichen Wechselwirkung zugeordnet wird. Eine frustrierte Plaquette im ursprünglichen Graphen ist nun dadurch gekennzeichnet, daß im zugehörigen dualen Knoten stets eine ungerade Anzahl von gebrochenen dualen Bindungen endet. Damit bilden sich die schon erwähnten Ketten aus gebrochenen Bindungen – sogenannte Strings – aus, die nur bei frustrierten Knoten beginnen und enden können. Auf der anderen Seite muß in jedem frustrierten dualen Knoten mindestens ein derartiger String enden. Somit treten die frustrierten Plaquetten im allgemeinen stets paarweise auf[1].

Ordnet man jedem String als Länge die Summe der Stärken der zugehörigen gebrochenen Bindungen zu, so wird das Problem der Grundzustandssuche in das Problem des sogenannten „*minimal matchings*“ im dualen Graphen überführt [63]. Jeder Realisierung eines „minimal matchings“, d.h. jeder Konstellation von Strings kürzester Gesamtlänge, entsprechen dann aufgrund der Symmetrie des Hamiltonians zwei Grundzustandskonfigurationen der Spins. Bemerkenswert ist, daß letztlich die Gesamtlänge der Strings und somit auch die Grundzustandsenergie und die energetischen thermodynamischen Eigenschaften nur von der Lage der frustrierten Plaquetten und nicht von den einzelnen Wechselwirkungen I_{ij} abhängig ist.

Unabhängig von der Dimension des Problems ändert die durch (2.3) eingeführte lokale Eichtransformation den Frustrationsgrad einer Plaquette nicht, da bei der Tansformation entweder zwei oder keine Bindung einer Plaquette ihr Vorzeichen ändert. Damit läßt sich zu einer gegebenen Wechselwirkungskonfiguration über diese Transformation eine ganze Klasse von Wechselwirkungskonfigurationen mit derselben Frustrationsstruktur konstruieren. Ausgehend

[1] Bei endlichen Systemen mit Rand können die Strings auch am Rand des Systems enden. Allerdings kann man dem Rand des Systems über die Transformation auf den dualen Graphen ebenfalls eine Plaquette zuordnen.

von einem unfrustrierten Ferromagneten lassen sich auf diese Art und Weise ungeordnete, unfrustrierte Systeme, die sogenannten sogenannten Mattis-Spingläser [70], erzeugen. Ein Beispiel für ein derartiges System wird in Kapitel 2.2.5 vorgestellt.

2.2.4 Frustration in drei Dimensionen

Im dreidimensionalen Fall ist die Situation etwas komplizierter, da jede Bindung zu mehr als zwei Plaquetten gehören kann. Auch hier lassen sich Ketten von frustrierten Plaquetten und ein dualer Graph einführen [71]. Der Einfachheit wird im folgenden nur ein kubisches Grundgitter betrachtet. Das Diskutierte läßt sich jedoch auch auf andere Gitter verallgemeinern.

Betrachtet man das Produkt der Frustrationen aller Plaquetten einer kubischen Elementarzelle, so erhält man stets $\prod \Phi_i = 1$, da alle Wechselwirkungen doppelt in das Produkt eingehen. Somit ist die Zahl der frustrierten Plaquetten auf dieser Elementarzelle stets gerade.

Verbindet man die Mittelpunkte der frustrierten Plaquetten, so entstehen geschlossene ‘Röhren’ aus diesen Plaquetten, welche nirgends beginnen und enden können (außer an der Oberfläche des Systems). Abbildung 2.3 zeigt eine solche Röhre.

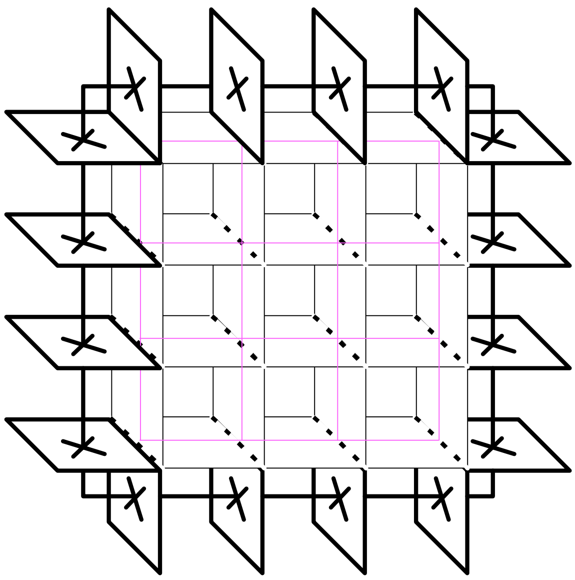

Abbildung 2.3 Beispiel für eine Röhre aus frustrierten Plaquetten.
Die Plaquetten mit einem Kreuz sind frustriert. Die gestrichelten Linien entsprechen gebrochenen Bindungen. Die roten Linien kennzeichnen das aufgespannte Netzwerk aus gebrochenen Bindungen

Da sich an jeder Bindung zwei planare Ebenen kreuzen, enden oder kreuzen sich an einer gebrochenen Bindung auch stets zwei Strings derartiger Bindungen. Somit spannen die Röhren frustrierter Plaquetten eine Art Netzfläche aus gebrochenen Bindungen auf, welche nur an einer 'Frustrationsröhre' enden kann. In Abbildung 2.3 ist ein solches Netz mit roten Linien eingezeichnet.

In Analogie zur Dualitätsbetrachtung in zwei Dimensionen kann man in drei Dimensionen ebenfalls von dem nun nicht mehr planaren ursprünglichen Graphen zu einer Art dualem Graphen übergehen. Dabei ordnet man jeder Plaquette im ursprünglichen Graphen eine Kante des dualen Graphen zu und umgekehrt. Jede räumlichen Elementarzelle wird dabei in einen dualen Knoten umgewandelt und jeder Knoten entspricht im dualen System einer Raumzelle. Die Frustrationsröhren werden bei der Transformation in Ringe frustrierter dualer Kanten überführt und die ursprünglichen Netzflächen gebrochener Bindungen, welche durch die Frustrationsröhren aufgespannt werden, entsprechen wirklichen Flächen aus zusammengesetzten gebrochenen dualen Plaquetten.

Im allgemeinen existiert in einem System jedoch nicht nur eine Frustrationsröhre sondern mehrere, die sich durchdringen oder auch kreuzen können. Diese spannen dann ein komplexes Netzwerk gebrochener Bindungen auf. Dabei können die einzelnen Netzflächen auch an verschiedenen Frustrationsröhren enden. Im Extremfall kann sogar eine einzelne Netzfläche alle verschiedenen Frustrationsröhren verbinden. Das Energieminimum des Gesamtsystems wird erreicht, wenn die Gesamtfläche des Netzwerks von gebrochenen Bindungen minimal wird. Zur Veranschaulichung des komplexen Systems aus frustrierten Plaquetten und gebrochenen Bindungen kann man sich ein Drahtgeflecht mit dazwischen aufgespannten Seifenblasen vorstellen, wobei an jedem Draht genau eine (oder genauer eine ungerade Zahl) von Seifenblasen beginnt bzw. endet.[2] Da die Fläche von Seifenblasen aufgrund ihrer Oberflächenspannung stets im Rahmen der Nebenbedingungen minimal wird, entspricht im Prinzip jede stationäre zugelassene Konstellation der Seifenblasen einem lokalen Minimum der Energiefunktion.

Wie schon im planaren Fall hängen die Grundzustandseigenschaften im wesentlichen nur von der Form und Position der einzelnen 'Röhren' ab und nicht direkt von der konkreten Realisierung der Wechselwirkungen.

2.2.5 Extremfälle

Zwei Grenzfälle für die Frustrationsstruktur sind durch ein völlig unfrustriertes System und ein maximal frustriertes System gegeben. Die Abbildungen 2.4 und 2.5 zeigen jeweils ein Beispiel

[2] Man beachte, daß der Draht im allgemeinen einen nicht vernachlässigbaren Querschnitt von einer elementaren Plaquette hat. Weiterhin wären die Seifenblasen stets am zugrundeliegenden diskreten Grundgitter festgepinnt.

für die Wechselwirkungsstruktur derartiger Systeme für den Fall eines $4 \times 4 \times 4$ Gitters. Dabei sind die durchgezogenen Linien ferromagnetische, und die unterbrochenen Linien antiferromagnetische Bindungen. Beide Wechselwirkungsstrukturen lassen sich periodisch in alle Richtungen fortsetzen. Die angegebenen Systeme wurden bereits detaillierter in [69] untersucht.

Die Wechselwirkungskonfiguration des unfrustrierten Systems entspricht der eines – allerdings geordneten – Mattis-artigen Systems. Da keine der Plaquetten des unfrustrierten System frustriert ist, läßt sich das System über eine lokale Eichtransformation in einen Ising Ferromagneten umwandeln. Wendet man die Transformation auf alle Spins an den mit einem ungefüllten Kreis markierten Gitterpunkten in Abb. 2.4 an, so erhält man tatsächlich nur noch ferromagnetische Bindungen.

Dementsprechend hat jedes unfrustrierte System im Grundzustand eine Energie pro Spin von $-c/2$, wobei c die Koordinationszahl des Grundgitters bezeichnet, und genau zwei spiegelsymmetrische Grundzustände, die vom Ferromagneten abgeleitet werden können. Die erste Anregung erhält man durch Klappen eines einzelnen Spins. Somit ergeben sich bei N Spins im System in der ersten Anregung $2 \times N$ Zustände mit einer Energie von $-(1-4/N)c/2$.

Das System in Abbildung 2.5 enthält nur frustrierte Plaquetten. Da in einem hyperkubischen System der Dimension d durch eine unbefriedigte Bindung maximal $2(d-1)$ Plaquetten frustriert werden können und ein derartiges System

$$N_P = N\binom{d}{2} \tag{2.11}$$

Plaquetten besitzt, erhält man somit mindestens

$$N_B^- = N\frac{d}{4} \tag{2.12}$$

unbefriedigte Bindungen. Die Grundzustandsenergie pro Spin eines total frustrierten Systems der Dimension ergibt sich somit zu:

$$e_0 = -\frac{d}{2}. \tag{2.13}$$

Diese Ableitung ist jedoch nur korrekt, wenn in dem betrachteten System tatsächlich alle Plaquetten frustriert werden können. Für die in dieser Arbeit betrachteten zwei- und dreidimensionalen Systeme ist dies der Fall. Für höhere Dimension stimmt dies jedoch nicht mehr [72, 73].

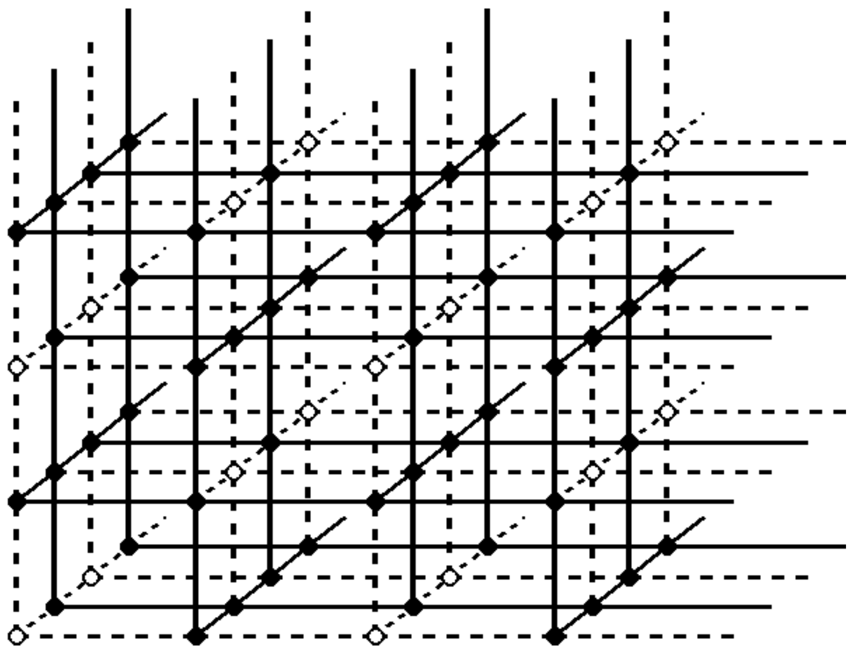

Abbildung 2.4 Wechselwirkungsstruktur und Grundzustand eines unfrustrierten Mattis-Systems.
Die gestrichelten Linien entsprechen antiferromagnetischen, die durchgezogenen Linien ferromagnetischen Bindungen.

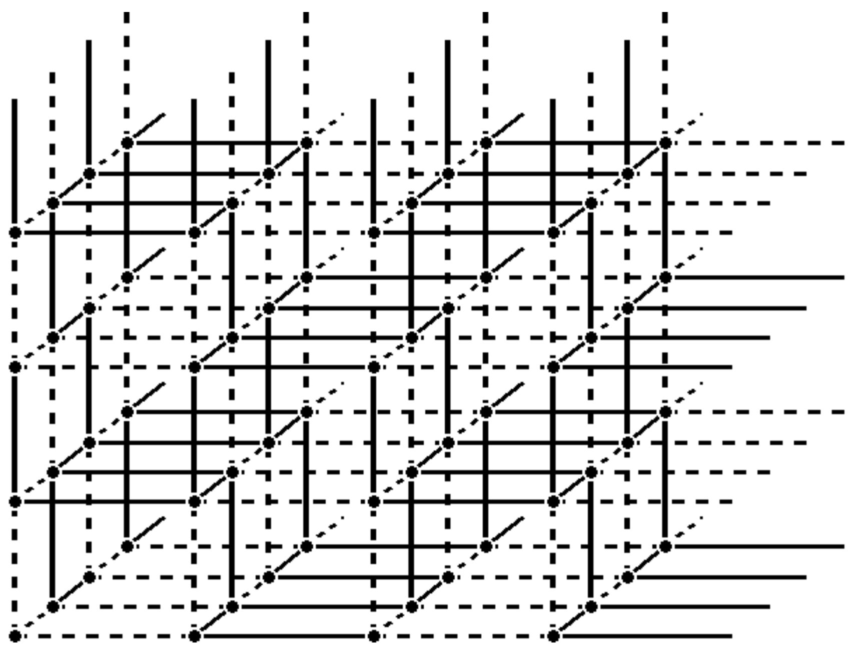

Abbildung 2.5 Wechselwirkungsstruktur eines völlig frustrierten Systems.

Die Berechnung der Entartung des Grundzustandes ist etwas komplizierter als im unfrustrierten Fall. Für große Systeme erhält man für die Grundzustandsentartung M_0 nach [74]

$$\begin{aligned} M_0 &= 2\exp(2G/\pi)^{N/2} \quad \text{mit } G = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2} \approx 0.916 \\ &\approx 2 \cdot 1.79^{N/2} \end{aligned} \tag{2.14}$$

für $d = 2$ und für $d = 3$ nach [85]

$$M_0 = 2^{N^{2/3}/4}. \tag{2.15}$$

Während die Grundzustandsentropie per Spin im dreidimensionalen Fall für unendliche Systemgrößen verschwindet, bleibt sie im zweidimensionalen endlich und von Null verschieden ($s_0 \approx 0.2916$). Für kleinere Systeme treten jedoch Abweichungen von (2.14) und (2.15) auf. So erhält man beispielsweise für $N = 64$ und $d = 2$ bzw. $d = 3$ eine Grundzustandsentartung von $2.60 \cdot 10^7$ bzw. 352, statt $2.54 \cdot 10^8$ bzw. 16 entsprechend (2.14).

2.3 Der Konfigurationsraum – grundlegende Begriffe

Der Konfigurationsraum eines Systems aus N Ising-Spins wird durch einen N-dimensionalen Hyperwürfel repräsentiert. Genauer gesagt, charakterisiert jede Kombination der Spinkoordinaten (±1) eine Ecke eines solchen Hyperwürfels. Für die Analyse von Strukturen in diesem Konfigurationsraum ist zunächst die Diskussion der grundsätzlichen Eigenschaften diese hochdimensionalen Raumes und die Einführung einiger Begriffe sinnvoll.

Durch die Anzahl der verschiedenen Spins zweier Spinkonfigurationen kann ein Abstandsmaß im Konfigurationsraum, der sogenannte *Hamming-Abstand*, definiert werden. Da der maximale Hamming-Abstand eines Systems von dessen Größe abhängig ist, benutzt man stattdessen oft einen entsprechend *normierten Hamming-Abstand*. Charakterisiert man jede Spinkonfiguration durch einen entsprechenden Spinvektor **s**, so kann man den normierten Hamming-Abstand zweier Konfiguration i und j leicht entsprechend

$$\Delta(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j}{|\mathbf{s}_i||\mathbf{s}_j|}\right) \tag{2.16}$$

über das Skalarprodukt der zugehörigen Spinvektoren bestimmen.

Die lokale Eichtransformation nach (2.3) läßt den Hamming-Abstand offenbar unverändert. Demnach bleiben alle Abstände und somit auch die Gesamtstruktur des Konfigurationsraums bzw. seine Energielandschaft bei dieser Transformation erhalten. Der Konfigurationsraum des Systems wird während einer derartigen Transformation nur an einer senkrecht zur gewählten Spinrichtung stehenden Hyperebene des Konfigurationsraums gespiegelt. Demzufolge haben alle Systeme mit der gleichen Frustrationsstruktur prinzipiell auch die gleiche Struktur der Energielandschaft.

Die Symmetrie des Hamiltonians gegenüber dem gleichzeitigen Umklappen aller Spins des Systems führt im Konfigurationsraum zu einer Inversionssymmetrie bezüglich des Mittelpunkts des Hyperwürfels. Die entstehenden Spiegelzustände haben den größtmöglichen Hamming-Abstand. Die durch Klappen aller Spins eines Untergitters erzeugten Zustände – also auch Energieminima und die zugehörigen Energiemaxima – haben den halben maximalen Hamming-Abstand.

Zur Analyse der Strukturen im Konfigurationsraum lassen sich die Nachbarschaftsbeziehungen bezüglich Einzelspinflips betrachten. Einem solchen Einzelspinflip entspricht im Konfigurationsraum die Bewegung von einer Ecke des Hyperwürfels entlang einer Kante zu einer benachbarten Ecke. Im Ergebnis gelangt man zu einem *nächsten Nachbarn im Konfigurationsraum* bezüglich solcher Einzelspinflips.[3] Bei N Spins im System hat jede Spinkonfiguration also stets N nächste Nachbarn im Konfigurationsraum mit einem normierten Hamming-Abstand von $1/N$.

Betrachtet man nun eine beliebige Menge von Spinkonfigurationen (z.B. die Menge aller Grundzustandskonfigurationen), so läßt sich diese in verschiedene *Cluster im Konfigurationsraum*[4] unterteilen. Angenommen das Gitter in Abbildung 2.6 wäre die Darstellung des Konfigurationsraums eines betrachteten Spinsystems. Jeder Knoten in diesem Gitter gehöre zu genau einer Spinkonfiguration. Die Spinkonfigurationen von zwei benachbarten Knoten seien jeweils nächste Nachbarn im Konfigurationsraum. Wenn die markierten Knoten die betrachtete Gesamtmenge von Spinkonfigurationen darstellten, dann ist offenbar eine Unterteilung in zwei verschiedene Cluster im Konfigurationsraum möglich. Allgemein gehören zwei Spinkonfigurationen zum selben Cluster im Konfigurationsraum, wenn sie durch eine Kette von jeweils benachbarten Konfigurationen dieses Clusters verbunden werden können.

Entsprechend der Einschränkungen der betrachteten Teilmenge des Konfigurationsraums ist es möglich, verschiedene spezielle Cluster zu definieren. Gelten keine Nebenbedingungen für die betrachteten Spinkonfigurationen, so erhält man zum Beispiel den trivialen Cluster des gesamten Konfigurationsraums. Läßt man nur Spinkonfigurationen einer bestimmten festen Energie zu, so erhält man einen *mikrokanonischen Cluster*. Mikrokanonische Cluster sind energetisch offenbar besonders interessant, da die Zustände eines derartigen Clusters ohne Energie-

---

[3] Bezieht man auch k - Spin - Klapp Prozesse mit ein ($k > 1$), so können nächste Nachbarn durch Bewegung auf einer k - dimensionalen Hyperebene erreicht werden. In dieser Arbeit werden im weiteren jedoch nur Ein - Spin - Klapp Prozesse betrachtet.

[4] Man beachte, daß es sich hierbei um Cluster aus Spinkonfigurationen im Konfigurationsraum und nicht um Spincluster im Realraum handelt.

änderung ineinander übergehen können. Im weiteren werden mikrokanonische Cluster kurz als Cluster bezeichnet.

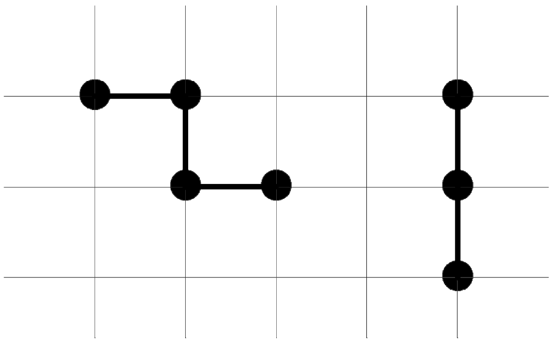

Abbildung 2.6 Schematische Darstellung von Clustern im Konfigurationsraum

Ein *Tal im Konfigurationsraum* ist in Anlehnung an die übliche Bezeichnungsweise ein maximaler Cluster mit Spinkonfigurationen, deren Energie einen bestimmten Wert nicht überschreitet. Somit ist der Begriff Tal nur sinnvoll in Bezug auf eine vorgegebene Energie. Ein Cluster aus Grundzuständen ist dementsprechend gleichzeitig ein mikrokanonischer Cluster und ein Tal bezüglich der Grundzustandsenergie, weshalb zur Charakterisierung des Grundzustandes in den folgenden Kapiteln beide Begriffe gleichbedeutend verwendet werden.