4 Der Grundzustand – Energie und Entropie

4.1 Einleitung

Der Grundzustand eines ± I Spinglases ist im allgemeinen durch eine starke Entartung und eine gegenüber dem Ferromagneten deutlich angehobene Energie gekennzeichnet. Abbildung 4.1. zeigt als Beispiel die Energie und die Entartung des Grundzustandes für 200 zufällige kubische 4×4×4 Systeme von Wechselwirkungskonfigurationen mit einem Anteil von 50% antiferromagnetischen Bindungen (vgl. [69]). Zur Orientierung sind zusätzlich die Extremfälle eines total frustrierten und eines unfrustrierten Systems eingezeichnet. Sie bilden eine obere und untere Schranke für die Energie und eine untere Schranke für die Entartung (vgl. Abschn. 2.2.5). Die Streuung zwischen den einzelnen Systemen des Ensembles ist sehr stark.

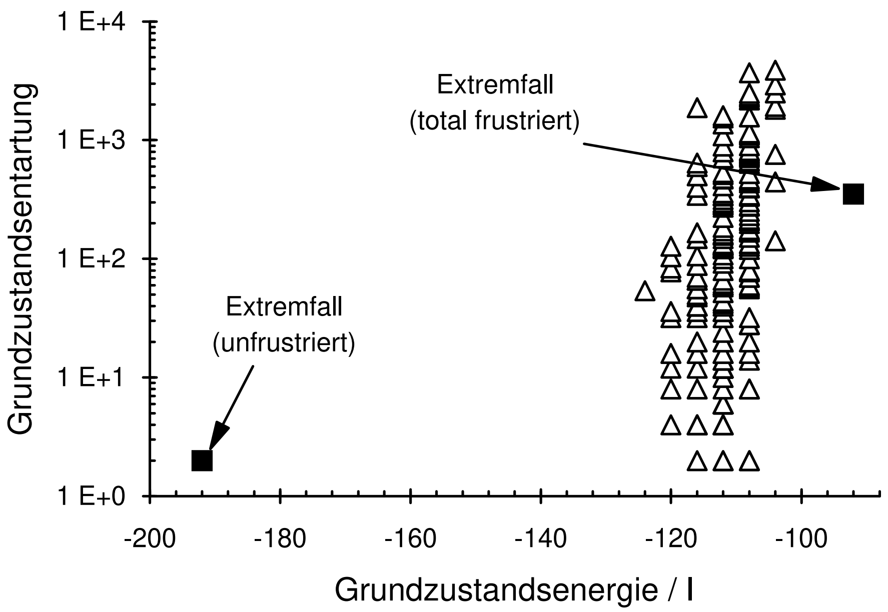

Abbildung 4.1 Grundzustandsenergie und -entartung für 200 Realisierungen eines 4×4×4 Systems bei $p_{\text{afm}} = 0.5$.

In den nachfolgenden Kapiteln wird die Veränderung des Grundzustandes in Abhängigkeit von der Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen im Gitter genauer untersucht. Dazu werden zunächst in diesem Abschnitt die globalen Eigenschaften Energie und Entropie betrachtet. Es geht dabei weniger um eine möglichst genaue Bestimmung dieser Größen als um das Verständnis der prinzipiellen Veränderungen des Konfigurationsraumes bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen. Im Rahmen einfacher Reihenentwicklungen und Näherungen wird versucht die Ergebnisse zumindest im Bereich geringer Konzentrationen quantitativ zu verstehen. Zusätzlich wird der Einfluß der Randbedingungen auf die Grundzustandseigenschaften und deren Stabilität gegenüber geringen Änderungen der Wechselwirkungsstruktur untersucht.

4.2 Die Grundzustandsenergie

4.2.1 Exakte Ergebnisse, Näherungen und Schranken

Die mittlere Grundzustandsenergie wird infolge der zunehmenden Frustration mit steigender Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen ebenfalls angehoben werden. Das Einzelsystem kann jedoch durchaus recht stark von diesem Mittelwert abweichen. Eine untere Schranke dafür ist natürlich durch die Grundzustandsenergie des korrespondierenden ferromagnetischen Systems gegeben. Bei hyperkubischen Systemen der Dimension d folgt somit für die Grundzustandsenergie pro Spin:

$$e_0 \geq -d \,. \tag{4.1}$$

Für die mittlere Grundzustandsenergie pro Spin läßt sich entsprechend [68] eine bessere untere Schranke angeben. Allgemein gilt in einem hyperkubischen Gitter der Dimension d

$$\overline{e}_0 = -d + \frac{2N_\mathrm{B}^-}{N}\,, \tag{4.2}$$

wobei N_B^- die Gesamtzahl aller gebrochenen Bindungen im Grundzustand darstellen soll. Da in d Dimensionen jede gebrochene Bindung zu $d-2$ Einzelstrings gehört, ergibt sich für die mittlere Stringlänge λ eines Einzelstrings

$$\lambda = \frac{2^{d-2} N_\mathrm{B}^-}{N_\mathrm{P}^- / 2}\,, \tag{4.3}$$

mit der Anzahl N_P^- aller frustrierten Plaquetten. Diese läßt sich mittels der Konzentration p_fP der frustrierten Plaquetten und der Anzahl N_P aller Plaquetten als

$$N_\mathrm{P}^- = p_\mathrm{fP} N_\mathrm{P} = p_\mathrm{fP} N \binom{d}{2} \tag{4.4}$$

ausdrücken. Somit folgt letztlich:

$$\bar{e}_0 = -d + p_{\mathrm{fP}} \lambda \frac{d(d-1)}{2^{d-1}}. \tag{4.5}$$

Da stets $\lambda \geq 1$ gilt, erhält man somit als untere Schranke

$$\bar{e}_0 \geq -d + p_{\mathrm{fP}} \frac{d(d-1)}{2^{d-1}}. \tag{4.6}$$

Unter der Annahme, daß jede antiferromagnetische Bindung im Gitter zu einer gebrochenen Bindung im Grundzustand führt, erhält man eine einfache obere Schranke für die Grundzustandsenergie pro Spin:

$$\bar{e}_0 \leq -d(1 - 2p_{\mathrm{afm}}). \tag{4.7}$$

Die Energie des Grenzfalls eines total frustrierten Systems

$$e_{\mathrm{ff}} = -d/2 \geq \bar{e}_0 \tag{4.8}$$

ergibt eine weitere obere Schranke, welche im Bereich hoher Konzentrationen schärfer ist als (4.7) (vgl. Abschn. 2.2.5, [68]).

Die rechte Seite in Abschätzung (4.7) entspricht dem linearen Anteil einer Reihenentwicklung für die Grundzustandsenergie um $p_{\mathrm{afm}} = 0$ und stellt daher zumindest bei kleinen Konzentrationen p_{afm}, für welche der ferromagnetische Zustand als Grundzustand erhalten bleibt, eine gute Näherung dar [30]. Die ersten Abweichungen von dieser linearen Abhängigkeit sollten sich ergeben, wenn Plaquetten mit drei antiferromagnetischen Bindungen auftreten. Dann erhält man statt drei gebrochenen Bindungen nur eine und somit

$$\begin{aligned} \bar{e}_0 &= -d\left(1 - 2p_{\mathrm{afm}} + 8p_{\mathrm{afm}}^3(1 - p_{\mathrm{afm}})\right) + O\left(p_{\mathrm{afm}}^4\right) \\ &= -d\left(1 - 2p_{\mathrm{afm}} + 8p_{\mathrm{afm}}^3\right) + O\left(p_{\mathrm{afm}}^4\right). \end{aligned} \tag{4.9}$$

Derartige Plaquetten führen auch dazu, daß der ferromagnetische Zustand nicht mehr als Grundzustand auftritt. In Übereinstimmung mit genaueren Untersuchungen in [30] tritt kein quadratisches Glied in (4.9) auf.

Die Grundzustandseigenschaften eines Systems werden nur durch seine Frustrationsstruktur, d.h. durch die Verteilung der frustrierten Plaquetten im System, bestimmt. Daher sollten sich grundlegende Änderungen dieser Eigenschaften – wie z.B. ein Übergang vom ferromagnetischen zum Spinglasverhalten – auch durch Änderungen in dieser Frustrationsstruktur widerspiegeln.

Nach Gleichung (4.5) wird die Frustrationsstruktur wesentlich durch die Konzentration p_{fP} der frustrierten Plaquetten und die mittlere Stringlänge λ der gebrochenen Bindungen im System charakterisiert. Da nun jede frustrierte Plaquette eines Systems zu einer Anhebung der Grundzustandsenergie führt, erscheint die Einführung einer mittleren Defektenergie $\Delta\bar{e}_{\mathrm{fP}}$ pro frustrierter Plaquette sinnvoll, welche wegen (4.4) und (4.5) entsprechend

$$\Delta\bar{e}_{\mathrm{fP}} = \frac{(\bar{e}_0 + d)}{p_{\mathrm{fP}}\binom{d}{2}} = \frac{\lambda}{2^{d-2}} \tag{4.10}$$

direkt mit der mittleren Stringlänge λ zusammenhängt.

Für geringe Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen erhält man $\lambda = 1$, da frustrierte Plaquetten dann stets als benachbarte Plaquetten auftreten. Im Grenzfall maximaler Frustration, dem völlig frustrierten System, erhält man entsprechend (4.5) ebenfalls $\lambda = 1$. Zwischen diesen beiden Extremfällen sollte die mittlere Stringlänge und damit auch die mittlere Defektenergie offenbar irgendwo ein Maximum besitzen. Sofern dieses Maximum bei Konzentrationen $p_{\mathrm{fP}} \le 0.5$ angenommen wird, ergibt sich dadurch auch ein Maximum für $\lambda(p_{\mathrm{afm}})$.

4.2.2 Numerische Ergebnisse

Die numerischen Ergebnisse in diesem und dem folgenden Kapitel basieren auf der Analyse des Grundzustands von jeweils 100 zufällig gewählten Systemen der Größe $N = 64$ für jeden der $dN + 1$ möglichen diskreten Konzentrationswerte im Intervall $0 \le p_{\mathrm{afm}} \le 0.5$. Die Diskretheit der Konzentrationen ist eine Folge diskreten Zahl von Bindungen im System. Zur Ermittlung des Einflusses der Systemgröße wurden zusätzlich auch die Grundzustände kleinerer Systeme mit jeweils 40 Realisierungen pro Meßpunkt berechnet.

Abbildung 4.2 zeigt die mittlere Grundzustandsenergie e_0 für das planare und das kubische System mit 64 Spins in Abhängigkeit von der Konzentration p_{afm} der antiferromagnetischen Bindungen im System. Zusätzlich sind die oberen Schranken entsprechend (4.7) und (4.8), sowie die unteren Schranken entsprechend (4.6) eingezeichnet.

Der Prozeß der linearen Erhöhung der Grundzustandsenergie durch isolierte antiferromagnetische Bindungen scheint in beiden Systemen etwa bis $p_{\mathrm{afm}} \approx 0.1$ dominant zu sein. Danach treten vermutlich zunehmend andere Konstellationen negativer Bindungen entsprechend (4.9) auf, welche die Stabilität des ferromagnetischen Grundzustandes aufweichen. Da ein derartiger Grundzustand sich exakt nach (4.7) verhalten würde, ergibt die Abweichung von dieser linearen Abhängigkeit ein grobes Maß dafür, wie stark der eigentliche Grundzustand vom ferromagnetischen Zustand abweicht. Die Näherung nach (4.9) ist für das dreidimensionale System etwas schlechter als für das zweidimensionale.

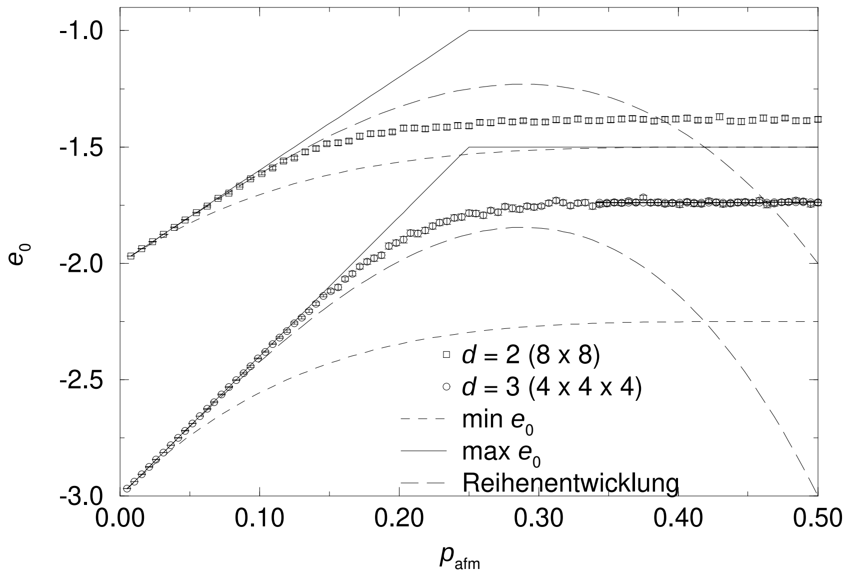

Abbildung 4.2 Mittlere Grundzustandsenergie e_0 in Abhängigkeit von der Konzentration p_{afm} und der Dimension *d*.
Die Reihenenwicklung entspricht der Entwicklung nach (4.9). Die Kurven für $\min e_0$ und $\max e_0$ entsprechen den Schranken nach (4.6), (4.7) und (4.8).

Das Einmünden der Kurven auf ein Plateau oberhalb von $p_{\text{afm}} \approx 0.3$ wird offenbar im wesentlichen durch die nur noch sehr schwachen Änderungen des Frustrationsgrades der Systeme in diesem Konzentrationsbereich verursacht (vgl. auch Abschn. 2.2.2).

Abbildung 4.3 zeigt die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von der Systemgröße im Falle maximaler Frustration. Durch Extrapolation auf $N \to \infty$ erhält man

$$\begin{aligned} \bar{e}_0\left(p_{\text{afm}} = 0.5\right) &= -1.40\,(\pm 0.06)\,I \quad \text{für } d = 2 \quad \text{und} \\ \bar{e}_0\left(p_{\text{afm}} = 0.5\right) &= -1.778\,(\pm 0.014)\,I \quad \text{für } d = 3. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Obwohl die Extrapolation nur von wenigen und vor allem sehr kleinen Systemgrößen ausging, stimmen diese Werte innerhalb der Fehlergrenzen gut mit den Ergebnissen anderer Arbeiten überein [77–82, 27]. Damit sollten in diesen Systeme trotz ihrer geringen Größe schon die wesentlichen für Spingläsern typischen Effekte auftreten.

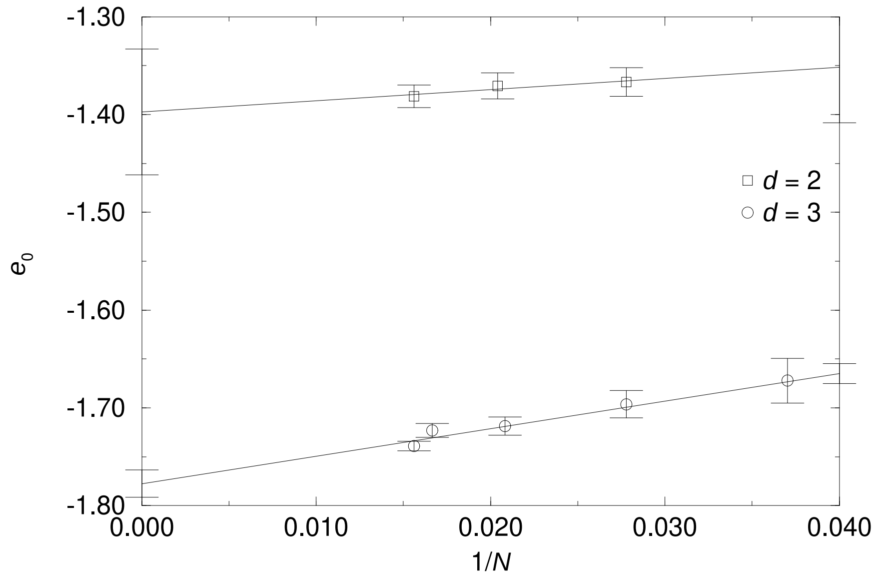

Abbildung 4.3 Grundzustandsenergie bei $p_{\mathrm{afm}} = 0.5$ für verschiedene Systemgrößen N und Dimensionen d.

Ein System mit offenen Randbedingungen (obc) besitzt im Grenzfall unendlicher Systemgröße dieselbe Grundzustandsenergie pro Spin wie ein System mit periodischen Randbedingungen (pbc). Bei endlichen Systemgrößen ergeben sich jedoch aufgrund der unterschiedlichen Anzahl von Bindungen pro Spin auch unterschiedliche Grundzustandsenergien. Bei der Diskussion der Grundzustandsenergien für beide Arten von Randbedingungen muß daher die Energie eines Systems mit offenen Randbedingungen entsprechend

$$e'_{0,\mathrm{obc}} = \frac{N_{\mathrm{B,pbc}}}{N_{\mathrm{B,obc}}} e_{0,\mathrm{obc}} \tag{4.12}$$

korrigiert werden.

Zum Vergleich der Grundzustandsenergien wurden 4×4×4 Systeme mit periodischen Randbedingungen in zwei Raumrichtungen und offenen Rändern in der dritten Richtung untersucht. Man erhält in Übereinstimmung mit [82], daß trotz der Korrektur nach (4.12) die Energie bei offenen Rändern speziell für hohe Konzentrationen stets etwas geringer ist als die Energie bei periodischen Randbedingungen (Abb. 4.4). Wie in [82] vermutet, ist die Frustration des Systems am Rand geringer als im Inneren. Aufgrund der geringeren Gesamtzahl von Plaquetten im System treten bei gleicher Konzentration frustrierter Plaquetten bei offenen Randbedingungen stets weniger frustrierte Plaquetten auf als bei periodischen Randbedingungen.

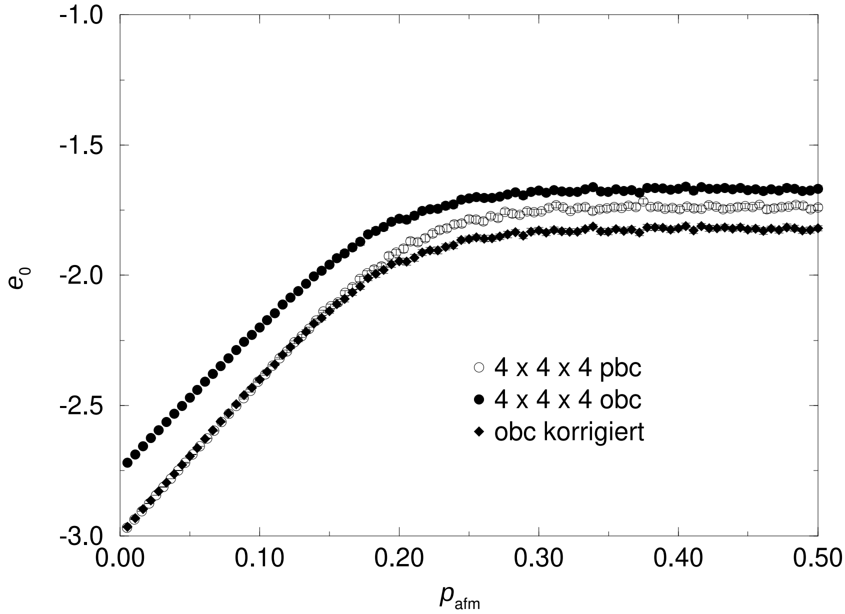

Abbildung 4.4 Vergleich der Grundzustandsenergien für unterschiedliche Randbedingungen im Fall $d = 3$.
Die Rhomben entsprechen den nach (4.12) korrigierten Werten für das System mit offenen Randbedingungen.

Abbildung 4.5 zeigt analog zu Abbildung 4.2 die mittlere Grundzustandsenergie e_0 für das planare und das kubische System, diesmal jedoch in Abhängigkeit von der Konzentration p_{fP}. Die einzigen kritischen Punkte in diesen Kurven stellen jeweils die Wendepunkte bei $p_{\mathrm{fP}} \approx 0.3$ für $d = 2$ bzw. $p_{\mathrm{fP}} \approx 0.4$ für $d = 3$ dar. Bei dieser Konzentration der frustrierten Plaquetten erreicht die Zunahme der Energie bei einer Änderung des Frustrationsgrades offenbar ein Maximum. Dabei wird sowohl der Effekt der Erhöhung der Zahl der frustrierten Plaquetten im System als auch der damit verbundene teilweise gegenläufige Effekt der Verringerung des Abstandes dieser Plaquetten bei höheren Konzentrationen berücksichtigt. In gewissem Sinne ist der Widerstand des Systems gegenüber einer Erhöhung des Frustrationsgrades bei dieser Konzentration maximal.

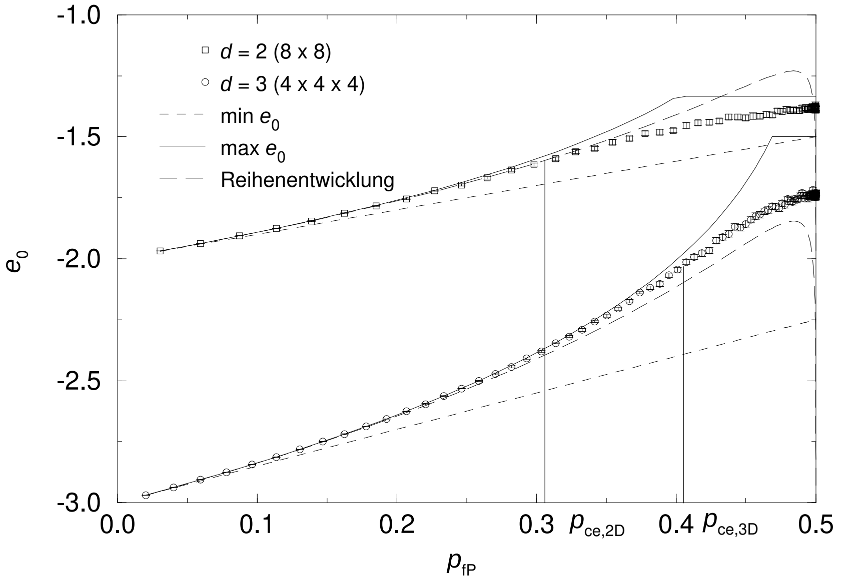

Abbildung 4.5 Mittlere Grundzustandsenergie e_0 in Abhängigkeit von der Konzentration p_{fP} der frustrierten Plaquetten und der Dimension d.
Die Näherungen und Schranken sind analog Abb. 4.2 eingezeichnet.

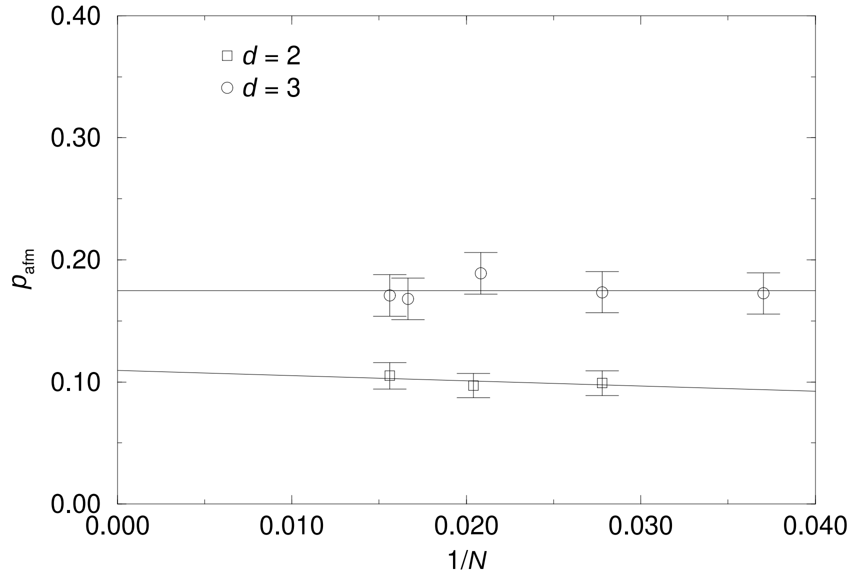

Abbildung 4.6 Kritische Konzentration p_{ce}, bei der die Energiezunahme bei Änderung des Frustrationsgrades maximal wird, in Abhängigkeit von der Systemgröße N.
Man beachte die Rückrechnung auf Konzentrationen p_{afm}.

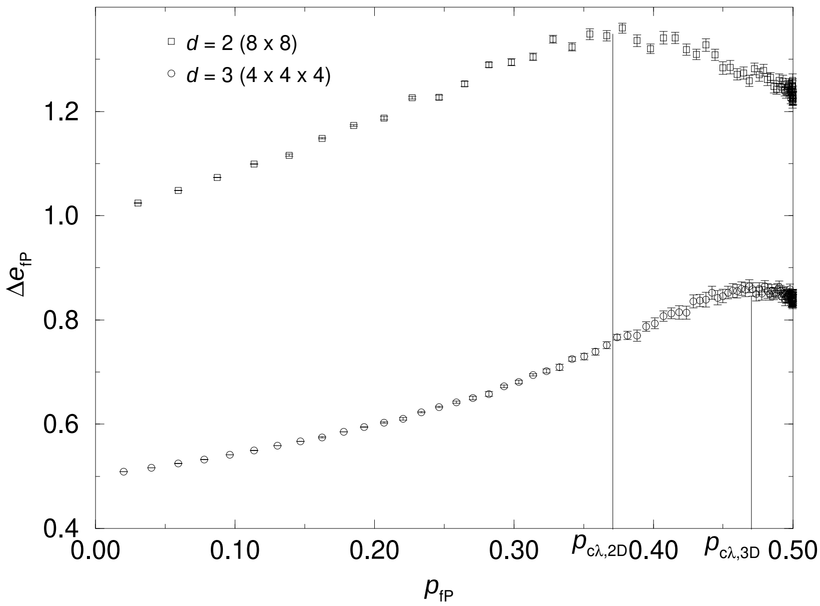

Abbildung 4.7 Defektenergie Δe_{fP} pro frustrierter Plaquette in Abhängigkeit von der Konzentration p_{fP} der frustrierten Plaquetten.

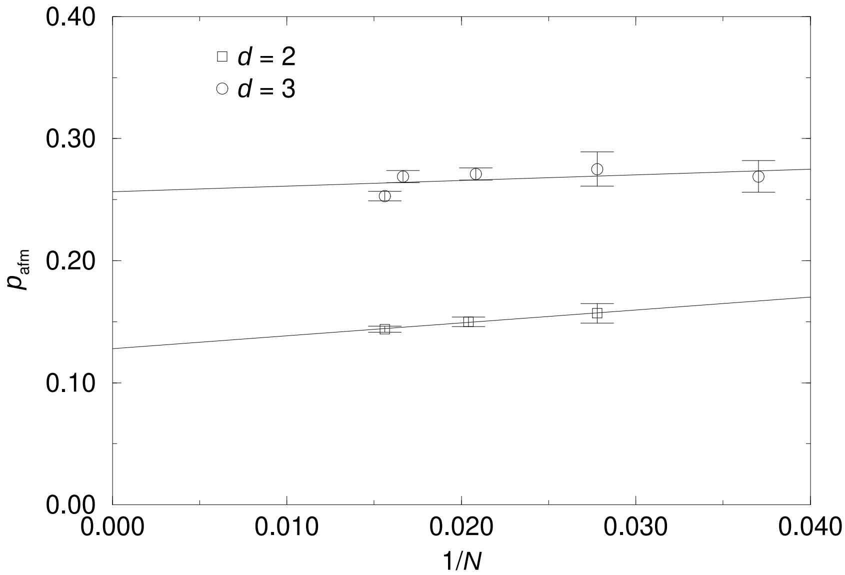

Abbildung 4.8 Kritische Konzentrationen $p_{c\lambda}$ in Abhängigkeit von der Systemgröße.

Bei der Untersuchung verschiedener Systemgrößen zeigt sich, daß diese Konzentration nur schwach von der Zahl der Spins im System abhängt (Abb. 4.6). Im Grenzfall unendlicher Systemgröße ergibt sich umgerechnet auf die Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen

$$\begin{aligned} p_{ce} &= 0.109 \quad (\pm 0.010) \quad \text{für } d=2 \quad \text{und} \\ p_{ce} &= 0.175 \quad (\pm 0.020) \quad \text{für } d=3\,. \end{aligned} \tag{4.13}$$

Zur Bestimmung der Wendepunkte der Kurven wurde ein Fit mittels eines kubischen Polynoms genutzt. Die Fehler wurden abgeschätzt.

Die Kurven für die Defektenergie Δe_{fP} zeigen, wie vermutet, ein deutlich ausgeprägtes Maximum bei Konzentrationen um $p_{\mathrm{fP}} \approx 0.37$ bzw. $p_{\mathrm{fP}} \approx 0.47$ für zwei- bzw. dreidimensionale Systeme (Abb. 4.7). Im dreidimensionalen Fall ist der Effekt jedoch etwas schwächer. Die Extrapolation auf unendliche Systemgröße (Abb. 4.8) liefert für die zugehörigen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen

$$\begin{aligned} p_{c\lambda} &= 0.128\,(\pm 0.005) \quad \text{für } d=2 \text{ und} \\ p_{c\lambda} &= 0.256\,(\pm 0.010) \quad \text{für } d=3\,. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Die Konzentrationen p_{ce} stimmen recht gut mit den in anderen Arbeiten vermuteten kritischen Konzentrationen des Übergangs von der ferromagnetischen zur Spinglas-Phase überein (2*d* 0.12 [83], 0.105 [62], 0.10 [64] / 3*d* 0.17 [66], 0.154 [67]). Die Konzentrationen $p_{c\lambda}$ liegen jedoch deutlich höher. Auf der anderen Seite stimmen diese wiederum recht gut mit den in [6] (2*d* 0.145), [11] (3*d* 0.27) und [68] (3*d* 0.20–0.25) gefundenen Werten überein. Für eine genauere Diskussion dieser Konzentrationen und ihres Zusammenhangs zu den Veränderungen des Realraums sei auf Abschnitt 5.6 verwiesen.

4.3 Die Grundzustandsentropie

4.3.1 Exakte Ergebnisse, Näherungen und Schranken

Das ‘normale’ ferromagnetische System zeigt im Grundzustand entsprechend der schon besprochenen Symmetrie der Energiefunktion gegenüber Spiegelung aller Spins nur eine triviale Entartung. Darüber hinaus ist es in ungeordneten Systemen jedoch möglich, daß es im Grundzustand einzelne Spins oder nichttriviale Spincluster gibt, welche ohne Änderung der Energie komplett umgeklappt werden können. Derartige ‘freie’ Spins oder Spincluster führen zu einer zusätzlichen Entartung des Grundzustandes und dementsprechend zu einer Erhöhung der Grundzustandsentropie.

Die einfachste untere Schranke für diese Entropie bildet wiederum das unfrustrierte System

$$s_0 \geq s_{\mathrm{uf}} = \ln 2 / N\,. \tag{4.15}$$

Das völlig frustrierte System bildet hingegen mit seiner Entropie von

$$\bar{s}_{ff} = \begin{cases} 0.37 & \text{für } d = 2 \\ \ln 2 \Big/ 4\sqrt[3]{N} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0 & \text{für } d = 3 \end{cases} \tag{4.16}$$

anscheinend keine obere Schranke für die Entropie [84, 85]. Schon ein System mit schachbrettartig verteilten Frustrationen hat mit $s_0 = 0.37$ eine höhere Entropie im zweidimensionalen Fall [84].

Eine – allerdings nur sehr schwache – obere Schranke ist natürlich durch die Größe des gesamten Konfigurationsraumes mit

$$s_0 \le \ln\left(2^N\right) / N = \ln 2 \tag{4.17}$$

gegeben.

Grundsätzliche Bedingung für eine nichttriviale Entartung des Grundzustands ist die Existenz eines *freien Spinclusters*, welcher ohne Energieänderung insgesamt umgeklappt werden kann. Die Energiedifferenz, die sich beim Klappen eines derartigen Spinclusters ergibt, entspricht offenbar der doppelten Gesamtenergie seiner Randbindungen, d.h. der Summe aller Bindungsenergien zwischen jeweils einem Spin innerhalb und einem Spin außerhalb des Clusters. Daher muß diese Energie bei einem freien Spincluster in der Summe verschwinden. Der Cluster ist von einer sogenannten Null-Energie-Fläche umgeben.

Bei schwachen Konzentrationen der antiferromagnetischen Bindungen ist der wahrscheinlichste freie Spincluster ein einzelner freier Spin. Dieser Spin muß unter der Annahme einer ferromagnetischen Umgebung genau zur Hälfte von antiferromagnetischen Bonds umgeben sein. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines solchen *freien Einzelspins* ergibt sich somit zu

$$w_1 = \binom{2d}{d} p_{\text{afm}}^d \left(1 - p_{\text{afm}}\right)^d . \tag{4.18}$$

Für ein System mit N Spins folgt als mittlere Zahl freier Einzelspins etwa

$$n_1 = N \binom{2d}{d} p_{\text{afm}}^d \left(1 - p_{\text{afm}}\right)^d . \tag{4.19}$$

Dies gilt nur, falls die freien Spins unabhängig voneinander sind. Im Bereich geringer Konzentrationen ist dies jedoch gewährleistet. Bei höheren Konzentrationen und endlichen Systemen ist diese Annahme nicht mehr exakt, da sie vernachlässigt, daß zwei freie Einzelspins nicht unabhängig sein können, falls sie benachbart sind.

Da jeder dieser freien Einzelspins zu einer Verdopplung der Grundzustände führt, erhält man für die Grundzustandsentropie in erster Näherung:

$$
\begin{aligned}
s_0 &\approx \left(\frac{1+n_1}{N}\right)\ln 2 \\
&= \left\{\frac{1}{N} + \binom{2d}{d} p_{\mathrm{afm}}^d \left(1-p_{\mathrm{afm}}\right)^d\right\}\ln 2 \qquad (4.20)\\
&\approx \left\{\frac{1}{N} + \binom{2d}{d} p_{\mathrm{afm}}^d\right\}\ln 2 \,.
\end{aligned}
$$

4.3.2 Numerische Ergebnisse

Abbildung 4.9 zeigt die Grundzustandsentropie pro Spin für verschiedene Konzentrationen der antiferromagnetischen Bindungen. Die Entartung verhält sich für $d = 2$ bzw. $d = 3$ bei Variation der Konzentration p_{afm} prinzipiell ähnlich.

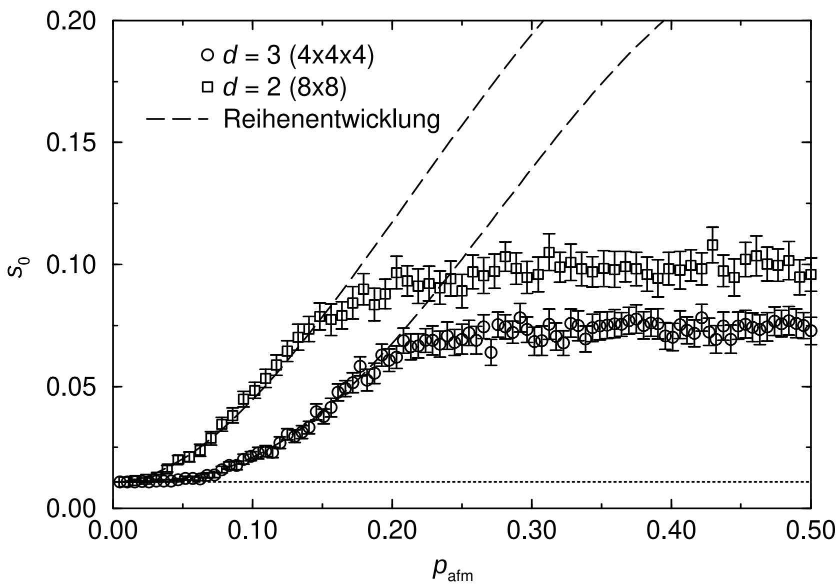

Abbildung 4.9 Grundzustandsentropie in Abhängigkeit von p_{afm} und der Dimension d.
Die gestrichelten Linien entsprechen der Näherung nach (4.20).

Für sehr kleine Konzentrationen unter 3-5 % ergibt sich zunächst keine wesentliche Erhöhung der Entartung. Der ferromagnetische Zustand bleibt als einziger Grundzustand dominant. Bei weiterer Erhöhung des antiferromagnetischen Anteils der Bindungen ergibt sich jedoch eine signifikante Erhöhung der Entropie durch zusätzliche nicht triviale Grundzustände. Die Näherung (4.20) isolierter freier Einzelspins stimmt dabei bis etwa $p_{\mathrm{afm}} = 0.15$ für d = 2 bzw. $p_{\mathrm{afm}} = 0.2$ für d = 3 sehr gut mit den gefundenen Werten überein. Danach verändert sich die

Entropie ähnlich der Grundzustandsenergie nicht mehr sehr stark, was wiederum durch den sich nur noch schwach verändernden Frustrationsgrad der Systeme verursacht wird.

Die Extrapolation der Grundzustandsentropie bei maximalem Frustrationsgrad auf unendliche Systemgröße (Abb. 4.10) ergibt

$$\begin{aligned} \bar{s}_0(p_{\text{afm}} = 0.5) &= 0.077\,(\pm 0.021)\,k_{\text{B}} \quad \text{für } d = 2 \text{ und} \\ \bar{s}_0(p_{\text{afm}} = 0.5) &= 0.054\,(\pm 0.016)\,k_{\text{B}} \quad \text{für } d = 3 \end{aligned} \tag{4.21}$$

in guter Übereinstimmung mit anderen Arbeiten [78–82, 27].

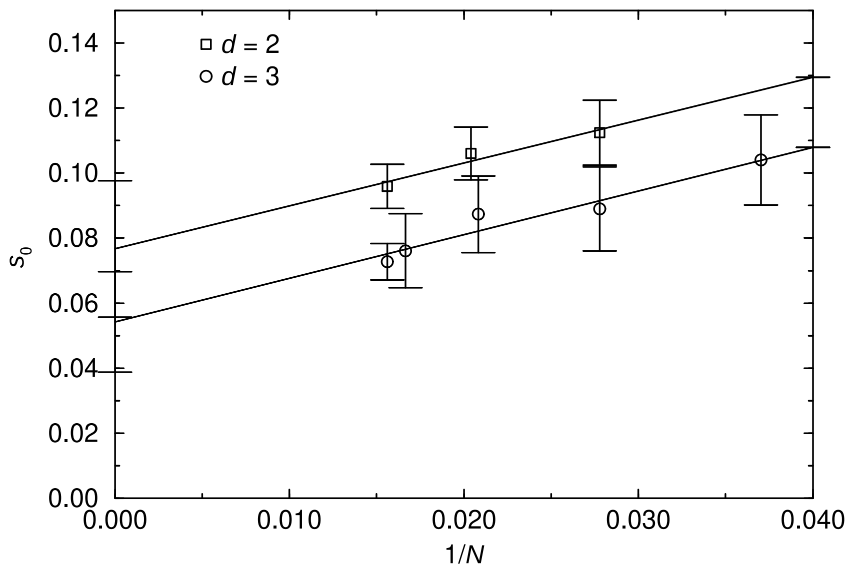

Abbildung 4.10 Grundzustandsentropie bei $p_{\text{afm}} = 0.5$ in Abhängigkeit von der Systemgröße N und der Dimensionen d.

Die Grundzustandsentropie eines 4×4×4 Systems ist bei periodischen Randbedingungen etwa um den Faktor 2 größer als bei offenen Randbedingungen (Abb. 4.11). Da die Entartung wesentlich durch freie Einzelspins erzeugt wird und Randspins wegen ihrer ungeraden Anzahl von Bindungen niemals zu derartigen freien Einzelspins werden können, sollte für die Entropien unter Berücksichtigung von (4.20) etwa

$$\begin{aligned} \frac{s_{0,\text{obc}} - \ln 2/N}{s_{0,\text{pbc}} - \ln 2/N} &\approx \frac{n_{1,\text{obc}}}{n_{1,\text{pbc}}} \\ &= \frac{N - N_{\text{Rand,obc}}}{N} \\ &= 1 - 2\frac{N_{\text{B,pbc}} - N_{\text{B,obc}}}{\text{N}} \end{aligned} \tag{4.22}$$

gelten. Die entsprechend (4.22) korrigierte Kurve für offene Randbedingungen in Abbildung 4.11 stimmt recht gut mit der für periodische Randbedingungen gefundenen Abhängigkeit überein. Allerdings überschätzt (4.22) den Einfluß des Randes etwas, da seine Bedeutung für größere freie Spincluster vermutlich abnimmt.

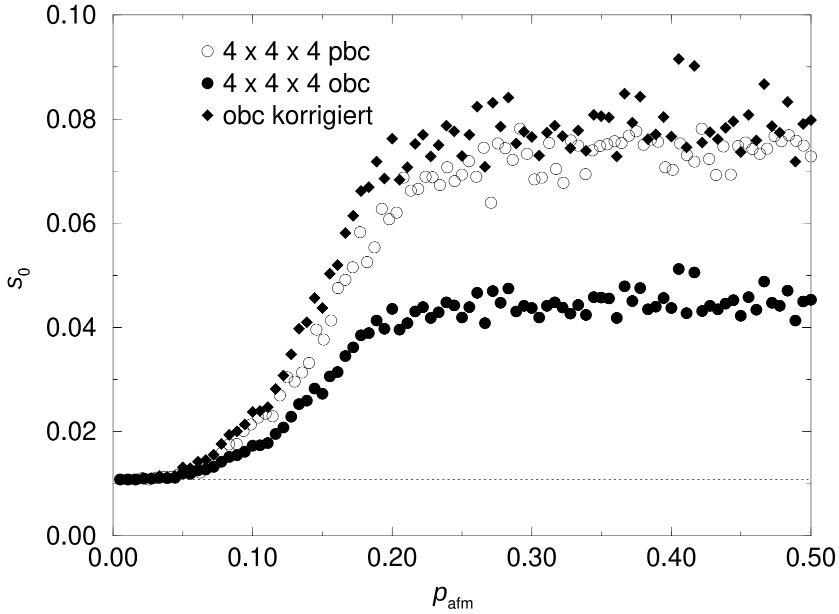

Abbildung 4.11 Vergleich der Grundzustandsentropien für unterschiedliche Randbedingungen.
Die Rhomben entsprechen der Korrektur der Werte für offenen Randbedingungen nach (4.22).

4.4 Stabilität gegen Änderung der Wechselwirkungs-Struktur

Um abzuschätzen, wie sensibel der Grundzustand auf eine kleine Änderung in der Struktur der Wechselwirkungen reagiert, wurde ausgehend von einem repräsentativen System mit $p_{afm} = 0.5$ (vgl. Abb. 4.1) die Wechselwirkungskonfiguration durch Ändern des Vorzeichens einer beliebigen ferromagnetischen und einer ebenfalls beliebigen antiferromagnetischen Bindung eine neue Wechselwirkungskonfiguration erzeugt und deren Grundzustandsenergie und -entropie bestimmt. Es wurden stets zwei Bindungen entgegengesetzten Vorzeichens gedreht, damit die Gesamtzahl der antiferromagnetischen Bindungen erhalten blieb. Sukzessiv wurden alle möglichen Kombinationen von Bindungen gedreht, wobei das Ausgangssystem immer das ausgewählte repräsentative System blieb.

Die resultierende Verteilung in Abbildung 4.12 ähnelt der in Abbildung 4.1 für beliebige Wechselwirkungskonfigurationen angegebenen und erscheint im wesentlichen unkorreliert zum Ausgangssystem. Allerdings streuen die Werte insgesamt nicht ganz so stark. Auffällig ist, daß die Entropie offenbar wesentlich stärker variiert als die Grundzustandsenergie.

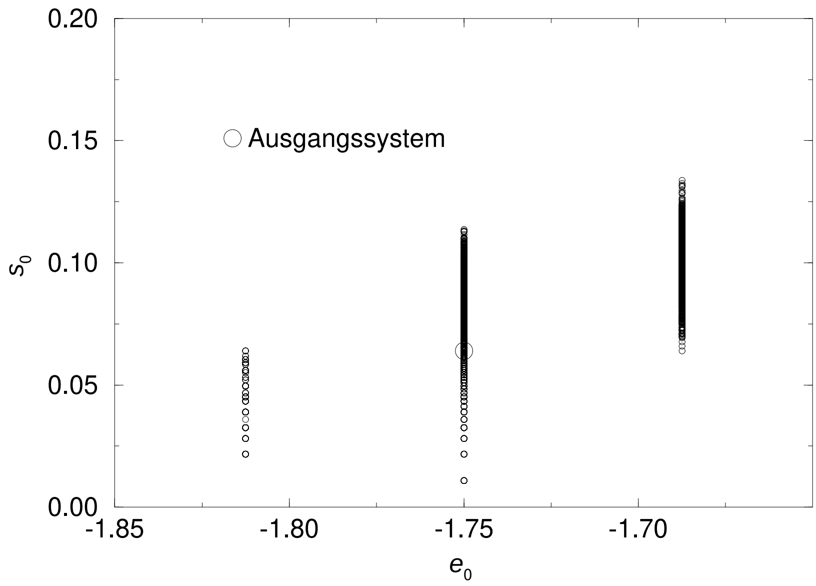

Abbildung 4.12 Veränderungen von Grundzustandsenergie und -entropie bei geringfügiger Variation der Wechselwirkungskonfiguration.

Vermutlich hängt dies damit zusammen, daß sich beim Drehen einer beliebigen Bindung im Grundzustand eines Systems zum einen die Energie der betreffenden Bindung, aber auch der Frustrationsgrad aller umliegenden Plaquetten ändert. Die Strings gebrochener Bindungen, welche an dieser Bindung eventuell zusammentreffen, werden dabei insgesamt nur um eine Bindung verlängert oder verkürzt, wodurch sich die Grundzustandsenergie etwas ändert. Die Frustrationsstruktur hingegen ändert sich im Umfeld dieser Bindung recht drastisch, da ja der Frustrationscharakter von $2d$ Plaquetten geändert wird. Dies führt zu einer entsprechenden Änderung der Zahl möglicher Paarungen der frustrierten Plaquetten.

4.5 Zusammenfassung

In den vorangegangenen Abschnitten wurde die Abhängigkeit der makroskopischen Grundzustandseigenschaften Energie und Entropie für $\pm I$ Ising Spinsysteme in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Wechselwirkungen im System untersucht. Dabei zeigte sich trotz gleicher Konzentration eine recht starke Streuung dieser Größen für die verschiedenen Einzelsysteme eines Ensembles.

Die Erhöhung der Grundzustandsenergie stimmt im Bereich geringer Konzentrationen recht gut mit den Vorhersagen einer einfachen Reihenentwicklung überein. Das Verhalten der Entropie bei Veränderung der Konzentration negativer Wechselwirkungen läßt sich für $p_{\mathrm{afm}} \leq 0.15$ bei zwei- bzw. für $p_{\mathrm{afm}} \leq 0.20$ bei dreidimensionalen Systemen im Rahmen des einfachen Modells freier Einzelspins verstehen. Für hohe Konzentrationen treten sowohl für die Energie als auch für die Entropie deutliche Abweichungen von diesen Näherungen und ein Sättigungseffekt auf, welcher im wesentlichen auf eine nur noch geringe Änderung des Frustrationsgrades der Systeme zurückzuführen ist.

Wegen des nicht polynomial mit der Systemgröße wachsenden numerischen Aufwands ist die maximale Zahl der Spins im System stark begrenzt. Trotzdem stimmen die Ergebnisse der Extrapolation auf unendliche Systemgrößen im Rahmen der Fehler erstaunlich gut mit den Resultaten anderer Autoren für wesentlich größere Systeme überein. Daher ist anzunehmen, daß Systeme dieser Größe schon wesentliche für Spingläser typische Eigenschaften zeigen. Damit stellen sie geeignete Untersuchungsobjekte für eine detaillierte Untersuchung der Eigenschaften des Konfigurationsraums dar.

Die Frustration eines endlichen Systems wird in der Umgebung seiner Ränder deutlich verringert. Der Einfluß des Rands auf die Grundzustandsenergie ist in erster Linie durch die dort fehlenden Bindungen erklärbar. Für die Grundzustandsentropie hängt der Effekt von der Zahl der fehlenden Plaquetten am Rand ab.

Da eine kleine Änderung der Wechselwirkungsstruktur zu recht drastischen Änderungen der Frustrationsstruktur des Gesamtsystems führen kann, hängen die Energie und die Entartung des Grundzustandes sehr sensibel von der jeweiligen Realisierung der Wechselwirkungen ab. Dabei ist die Änderung der Entropie bei Variation der Bindungen wesentlich deutlicher als die mit dieser Variation verbundene Energieänderung des Grundzustandes.

Ein Phasenübergang bei Erhöhung der Konzentration negativer Bindungen im System sollte sich auch in der Frustrationsstruktur dieses Systems widerspiegeln. Charakterisierungsmerkmale dieser Struktur sind die Konzentration frustrierter Plaquetten und die mittlere Länge der im System auftretenden Strings unbefriedigter Bindungen. Die mittlere Stringlänge hängt indirekt mit der Grundzustandsenergie zusammen und zeigt sowohl für $d = 2$ als auch für $d = 3$ ein Maximum bei $p_{\mathrm{c}\lambda}(2d) = 12.8\%$ bzw. $p_{\mathrm{c}\lambda}(3d) = 25.6\%$. Dementsprechend sind bei diesen Konzentrationen die frustrierten Plaquetten im System maximal voneinander entfernt. Beide Konzentrationen liegen deutlich höher als die von anderen Autoren vorgeschlagenen kritischen Konzentration für das Verschwinden der ferromagnetischen Phase. Unklar ist, ob in drei Dimensionen anstelle der mittleren Stringlänge im System besser die nur schwer zugängliche mittlere Fläche des Netzwerks frustrierter Bindungen, d.h. die mittlere Zahl gebrochener Bindungen pro Fläche des Netzwerks, untersucht werden sollte (vgl. Abschn. 2.2.4).

Als ein weiterer kritischer Punkt ergibt sich die Konzentration p_{ce} antiferromagnetischer Bindungen, bei der eine maximale Zunahme der Grundzustandsenergie bei Änderung der Konzentration frustrierter Plaquetten auftritt. Anschaulich gesprochen, ist der Widerstand des Systems gegenüber einer Erhöhung des Frustrationsgrades bei dieser Konzentration maximal. Dabei wird sowohl der Effekt der Erhöhung der Zahl der frustrierten Plaquetten im System als auch der damit verbundene teilweise gegenläufige Effekt der Verringerung des Abstandes dieser Plaquetten bei höheren Konzentrationen berücksichtigt. Die gefundenen Konzentration von $p_{ce}(2d) = 0.109$ und $p_{ce}(3d) = 0.175$ sind nur sehr schwach von der Systemgröße abhängig und stimmen innerhalb der Fehlergrenzen mit den von anderen Autoren gefundenen kritischen Konzentrationen überein [62, 64, 66, 67, 83]) (siehe auch Abschn. 5.6).