5 Grundzustandscluster im Konfigurationsraum

5.1 Einleitung

Die Existenz von isolierten freien Einzelspins führt zu einer Erhöhung der Entartung des Grundzustandes. Wie im vorhergehenden Kapitel gezeigt, bestimmen diese Einzelspins bei kleinen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen das Verhalten der Grundzustandsentropie. Bei höheren Konzentrationen treten jedoch auch größere freie Spincluster im Realraum auf, welche zusätzlich zu einer Separation der Grundzustandskonfigurationen in verschiedene Grundzustandstäler im Konfigurationsraum führen können.

Im folgenden werden ausgehend von der Geometrie des dem System zugrundeliegenden Grundgitters zunächst die prinzipiellen Bedingungen für die Existenz solcher freien Spincluster im Realraum diskutiert. Anschließend wird die Wahrscheinlichkeit für das tatsächliche Auftreten selbiger abgeschätzt.

Zur quantitativen Beschreibung der entstehenden Grundzustandscluster im Konfigurationsraum, werden nachfolgend die Entartung dieser Cluster, die Magnetisierung und verschiedene Ordnungsparameter, welche eng mit diversen Abstandsmaßen im Zustandsraum zusammenhängen, untersucht. Die Abhängigkeit dieser Parameter von der Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen im System wird jeweils mit der Näherung freier Einzelspins und freier Spincluster im Realraum verglichen.

5.2 Elementare freie Spincluster im Realraum

5.2.1 Bedingungen für die Existenz freier Spincluster

Ein elementarer freier Spincluster im Realraum sei dadurch gekennzeichnet, daß ein Umklappen dieses Clusters sich nicht auch durch eine Folge von umklappenden kleineren freien Spinclustern erreichen läßt. Dabei soll die Größe durch die Anzahl der im Cluster enthaltenen Spins gemessen werden. Die Existenz eines elementaren freien Spinclusters der Größe n_G im Grundzustand führt dazu, daß zwei Grundzustandskonfigurationen, bei denen dieser Spincluster jeweils entgegengesetzt geklappt ist, einen Hamming-Abstand von mindestens n_G besitzen. Falls nun $n_{\mathrm{G}} > 1$ erhält man somit zwei verschiedene Grundzustandscluster im Konfigurationsraum (vgl. Abschn. 2.3) mit einem Mindestabstand n_{G}.

Die im vorhergehenden Abschnitt diskutierten einzelnen freien Spins bilden somit zwar triviale elementare freie Spincluster, führen jedoch nicht zu einer Separation der Grundzustandskonfigurationen in verschiedene Grundzustandscluster. Dazu sind mindestens elementare freie Spincluster der Größe $n_{\mathrm{G}} \geq 2$ erforderlich. Im weiteren werden daher einzelne freie Spins nicht als Spincluster, sondern einfach als freie Einzelspins bezeichnet. Als freie Spincluster werden nur Spincluster mit mehr als einem Spin bezeichnet werden. Welchen Bedingungen müßte ein solcher Spincluster nun genügen?

Zum einen muß er als freier Spincluster von einer Null-Energie-Fläche umrandet sein. Dementsprechend muß genau die Hälfte der Randbindungen befriedigt und die andere Hälfte gebrochen sein. Es gilt also in einem Spincluster G mit n_{G} Spins

$$\sum_{k \in \mathrm{G}} b_k^{a+} = \sum_{k \in \mathrm{G}} b_k^{a-} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathrm{G}} b_k^{a}, \tag{5.1}$$

wobei b_k^a die Zahl der äußeren (Rand-) Bindungen des Spins k darstellt und b_k^{a-} bzw. b_k^{a+} den Anteil der gebrochenen bzw. befriedigten Bindungen bezeichnen.

Dies ist nur bei einer geraden Gesamtzahl von Randbindungen möglich. Für die Anzahl der Bindungen im Spincluster gilt nun

$$\sum_{k \in \mathrm{G}} \left(b_k^i + b_k^a \right) = c n_{\mathrm{G}}, \tag{5.2}$$

wobei b_k^i die Zahl der inneren Bindungen des Spins k zu Spins dieses Clusters und c die Koordinationszahl im zugrundeliegenden Gitter ist. Damit ergibt sich für die Gesamtzahl der Randbindungen

$$\sum_{k \in \mathrm{G}} b_k^a = c n_{\mathrm{G}} - \sum_{k \in \mathrm{G}} b_k^i. \tag{5.3}$$

Die Summe auf der rechten Seite von (5.3) ist stets gerade, da jede innere Bindung doppelt gezählt wird. Damit kann die Zahl der Randbindungen nur ungerade werden, wenn sowohl die Koordinationszahl des Gitters c als auch die Größe des Spinclusters n_{G} ungerade sind. Im allgemeinen und speziell bei quadratischen Grundgittern ist die Koordinationszahl jedoch gerade. Eine interessante Folgerung aus (5.3) ist, daß es in Gittern mit ungerader Koordinationszahl – wie z.B. dem hexagonalen Gitter – keine einzelnen freien Spins geben kann und somit alle mikrokanonischen Cluster im Konfigurationsraum aus exakt einer Spinkonfiguration bestehen müssen.

Eine zweite Bedingung für einen elementaren freien Spincluster ergibt sich daraus, daß es keine freien Teilcluster geben darf, damit ein Klappen des Gesamtclusters nicht durch successives Klappen einzelner Teilcluster erreicht werden kann. Ganz speziell dürfen natürlich keine freien Einzelspins existieren. Daher ergibt sich für jeden Spin des betrachteten Clusters:

$$b_k^{a-} + b_k^{i-} < b_k^{a+} + b_k^{i+} \,. \tag{5.4}$$

b_k^{i-} bzw. b_k^{i+} bezeichnen wiederum den Anteil der gebrochenen bzw. befriedigten Bindungen. Da die Beziehung (5.4) auch nach dem Umklappen des Spinclusters erfüllt sein muß und dabei befriedigte äußere Bindungen zu gebrochenen Bindungen werden und umgekehrt, gilt ebenso:

$$b_k^{a+} + b_k^{i-} < b_k^{a-} + b_k^{i+} \,. \tag{5.5}$$

Die Summe aller Bindungen eines Spins entspricht der Koordinationszahl und man erhält aus (5.4):

$$\begin{aligned} &2\left(b_k^{a-} + b_k^{i-}\right) < b_k^{a+} + b_k^{i+} + b_k^{a-} + b_k^{i-} = c \\ \Rightarrow \qquad &b_k^{a-} + b_k^{i-} < \frac{c}{2} \,. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Bei gerader Koordinationszahl c und ganzzahligen Bindungszahlen folgt schärfer:

$$b_k^{a-} + b_k^{i-} \le \frac{c}{2} - 1 \,. \tag{5.7}$$

Analog ergibt sich aus (5.5)

$$b_k^{a+} + b_k^{i-} \le \frac{c}{2} - 1 \,. \tag{5.8}$$

Die Summation von (5.7) und (5.8) liefert

$$\begin{aligned} &b_k^{a} + 2b_k^{i-} = c - b_k^{i} + 2b_k^{i-} \le c - 2 \\ \Rightarrow \qquad &2 \le b_k^{i} - 2b_k^{i-} \le b_k^{i} \,. \end{aligned} \tag{5.9}$$

Somit muß bei gerader Koordinationszahl des Gitters in einem elementaren freien Spincluster jeder Spin wenigstens zwei Bindungen zu Spins aus diesem Cluster haben. In einem quadratischen Grundgitter ist dies für Spincluster der Größe $n = 2$ bzw. $n = 3$ nicht möglich. Der kleinste nichttriviale elementare freie Spincluster besteht aus einem quadratischen Spincluster mit vier Spins. Abbildung 5.1a zeigt eine Realisierung eines solchen Clusters. In Abbildung 5.1b und 5.1c sind zusätzlich Beispiele für kleinste nichtriviale elementare freie Spincluster im triangularen und im hexagonalen Gitter angegeben.

Da die Koordinationszahl im hexagonalen Gitter ungerade ist, ergeben sich für dieses Gitter einige Besonderheiten. Wie schon erwähnt, kann es aufgrund von (5.3) keine freien Einzelspins in derartigen Gittern geben. Zusätzlich sind jedoch auch keine freien Spincluster mit ungerader Anzahl von beteiligten Spins möglich. Damit muß der nächste größere, elementare freie Spincluster aus vier Spins bestehen. Dies ist bei einer sternförmige Anordnung der Spins auch realisierbar.

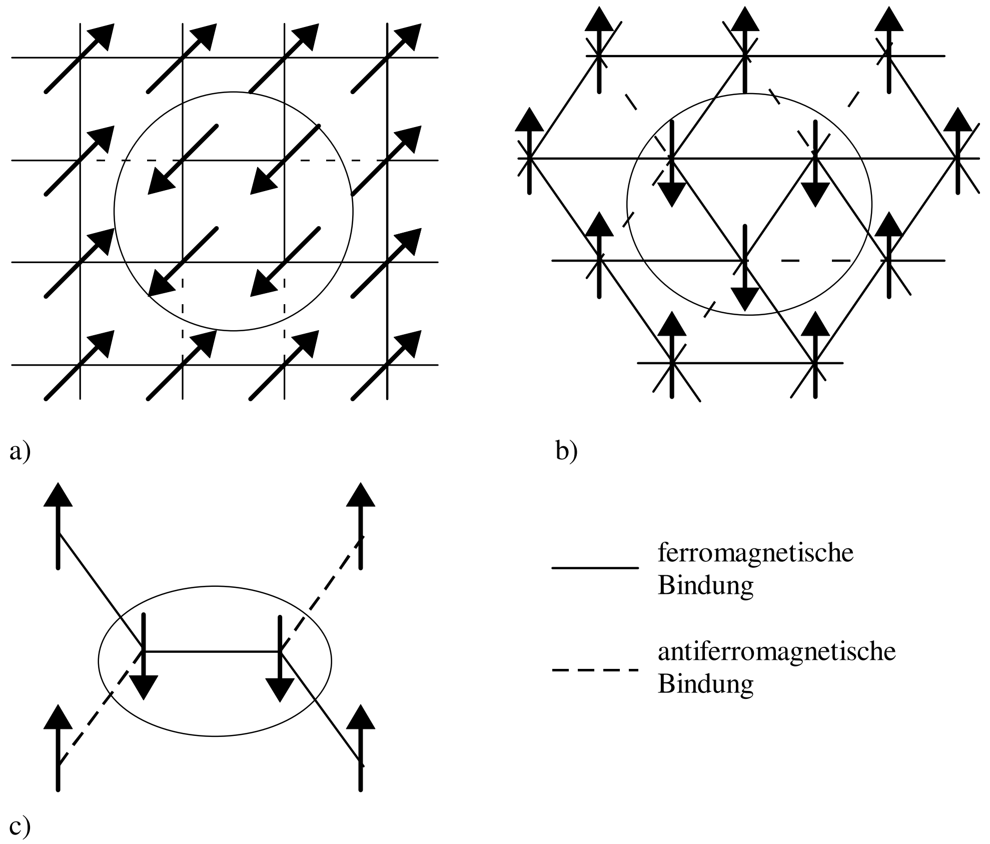

Abbildung 5.1 Beispiele kleinster nichttrivialer elementarer freier Spincluster in verschiedenen planaren Grundgittern.
a) quadratisch b) triangular c) hexagonal
Die freien Spincluster wurden umrahmt.

5.2.2 Näherungen für kleine Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen

Für den Bereich kleiner Konzentrationen wird die Struktur des Konfigurationsraumes im wesentlichen durch die freien Einzelspins und die freien Spincluster im Realraum beeinflußt. Die Einzelspins des Realraums bestimmen die Eigenschaften der einzelnen Cluster im Konfigurationsraum und die freien Spincluster bestimmen die Häufigkeit und den Abstand verschiedener Konfigurationsraumcluster.

Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten freier Einzelspins wurde schon in (4.18) abgeschätzt. Im folgenden soll daher noch die Wahrscheinlichkeit für die Existenz größerer freier Spincluster approximiert werden.

Für kleine Konzentrationen p_{afm} treten sicherlich die kleinsten elementaren freien Spincluster am häufigsten auf. Bei einem quadratischen Grundgitter sind dies Spincluster entsprechend Abbildung 5.1a. Für jeden der vier Spins gilt nach (5.9)

$$b_k^{i-} = 0 \tag{5.10}$$

und nach (5.7) bzw. (5.8) folgt

$$\begin{aligned} & c - b_k^i - b_k^{a-} = b_k^{a+} \leq \frac{c}{2} - 1 \\ \Rightarrow \quad & \frac{c}{2} - 1 \leq b_k^{a-} \leq \frac{c}{2} - 1 \\ \Rightarrow \quad & b_k^{a-} = b_k^{a+} = \frac{c}{2} - 1 = d - 1\,. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Damit müssen alle inneren Bindungen ungebrochen sein. Zusätzlich muß an jedem Spin exakt die Hälfte der äußeren Bindungen gebrochen und die andere Hälfte ungebrochen sein. Welche äußeren Bindungen gebrochen werden ist beliebig.

Daher ergibt sich für das Auftreten eines solchen freien Spinclusters in einem Gitter der Dimension d eine Wahrscheinlichkeit von

$$w_4 = \binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\mathrm{afm}}^{4(d-1)} \left(1 - p_{\mathrm{afm}}\right)^{4d}. \tag{5.12}$$

Unter Berücksichtigung der Anzahl der Plaquetten im Gitter erhält man als mittlere Anzahl derartiger Vier-Spin-Cluster

$$\begin{aligned} n_4 &\approx N \binom{d}{2} \binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\mathrm{afm}}^{4(d-1)} \left(1 - p_{\mathrm{afm}}\right)^{4d} \\ &\approx N \binom{d}{2} \binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\mathrm{afm}}^{4(d-1)}. \end{aligned} \tag{5.13}$$

Diese Näherung gilt wiederum nur für unabhängige Vier-Spin-Cluster. Für kleine Konzentrationen p_{afm} ist dies jedoch gewährleistet.

5.3 Entropien der Grundzustandscluster

5.3.1 Definitionen

Die im vorigen Abschnitt diskutierten elementaren freien Spincluster im Realraum führen offenbar zu grundlegenden Änderungen in der Struktur des Konfigurationsraumes. Um diese strukturellen Veränderungen zu diskutieren, erweist es sich als günstig, zusätzliche Entropien für Grundzustandscluster im Konfigurationsraum einzuführen.

Da ein System mit verschiedenen Grundzustandstälern bei verschwindender Temperatur nicht die Möglichkeit hat, die Energiebarrieren zwischen den einzelnen Tälern zu überwinden, wird es nur eines dieser Täler und dessen Entartung ‘spüren’. In diesem Zusammenhang spricht man auch von einem „reinen Zustand“ [42], da dieses Tal den makroskopischen Zustand des Systems bestimmt. Damit erscheint die Definition einer Entropie

$$s_{0,\mathrm{St}}^{\alpha} = -\sum_{i \in \mathrm{C}_\alpha} \frac{1}{M_\alpha} \ln \frac{1}{M_\alpha} = \ln M_\alpha \tag{5.14}$$

des Grundzustandsclusters C_α sinnvoll. Dabei numeriert α die Grundzustandscluster und M_α bezeichnet die Zahl der Zustände i im Grundzustandscluster C_α. Im weiteren wird $s_{0,\mathrm{St}}^{\alpha}$ kurz als *Zustandsentropie* bezeichnet.

Durch Mittelung über alle Grundzustandscluster erhält man die *mittlere Zustandsentropie*

$$s_{0,\mathrm{St}} = \frac{\sum_\alpha M_\alpha \ln M_\alpha}{\sum_\alpha M_\alpha} = \frac{\sum_\alpha M_\alpha \ln M_\alpha}{M} \tag{5.15}$$

mit der Gesamtzahl M aller Grundzustandskonfigurationen.

Offenbar kann man nun die Gesamtentropie entsprechend

$$\begin{aligned} s_0 &= \ln M \\ &= \sum_\alpha \frac{M_\alpha}{M} \ln \frac{M M_\alpha}{M_\alpha} \\ &= \sum_\alpha \frac{M_\alpha}{M} \ln \frac{M}{M_\alpha} + \sum_\alpha \frac{M_\alpha}{M} \ln M_\alpha \\ &= s_{0,\mathrm{Cl}} + s_{0,\mathrm{St}} \end{aligned} \tag{5.16}$$

in die mittlere Zustandsentropie und eine *Clusterentropie* $s_{0,\mathrm{Cl}}$ zerlegen, welche die Aufteilung des Konfigurationsraums in unterschiedliche Cluster beschreibt. Bei Clustern gleicher Größe gibt $s_{0,\mathrm{Cl}}$ die Anzahl der Cluster und $s_{0,\mathrm{St}}$ die Größe eines einzelnen Clusters an.

Entsprechend ihrer Definition sind die Zustands- und die Clusterentropie nur für den Grundzustand selbst erklärt und daher keine Entropien im thermodynamischen Sinne. Sie entsprechen eher einem informationstheoretischen Maß für die Entartung der Grundzustandscluster. Allerdings läßt sich zumindest die Zustandsentropie für den Grenzfall $T = 0$ als tatsächliche thermodynamische Entropie interpretieren. In Anlehnung an die Grundzustandsentropie und deren Zerlegung entsprechend (5.16) sollen jedoch die Bezeichnungen Zustands- und Clusterentropie weiter beibehalten werden.

5.3.2 Näherungen für kleine Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen

Da jeder in einem System existierende elementare freie Spincluster mit mehr als einem Spin zu einer Verdopplung der Zahl der Grundzustandscluster führt, ergibt sich unter der Annahme, daß alle Grundzustandscluster gleich groß sind, für die Clusterentropie nach (5.16) und (5.13)

$$\begin{aligned} s_{0,\mathrm{Cl}} &\approx \frac{1}{N}\sum_{a=1}^{2^{(n_4+1)}} 2^{-(n_4+1)} \ln 2^{(n_4+1)} \\ &= \frac{1}{N}(n_4+1)\ln 2 \\ &\approx \left[\frac{1}{N} + \binom{d}{2}\binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\mathrm{afm}}^{4(d-1)}\right]\ln 2\,. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Wegen (5.16) und (4.20) gilt dementsprechend

$$\begin{aligned} s_{0,\mathrm{St}} &= s_0 - s_{0,\mathrm{Cl}} \\ &\approx \left(\frac{n_1 - n_4}{N}\right)\ln 2 \quad \text{wegen } n_1 >> n_4 \\ &\approx \binom{2d}{2} p_{\mathrm{afm}}^d \ln 2\,. \end{aligned} \tag{5.18}$$

Diese Näherung entspricht der Näherung (4.20) für die Gesamtentropie ohne den der trivialen Symmetriebrechung entsprechenden Term.

5.3.3 Wahrscheinlichkeit der Systeme mit trivialer Ergodizitätsbrechung bei kleinen Konzentrationen

In einem System mit unendlicher Teilchenzahl treten nach (5.12) selbst bei sehr kleinen, jedoch nicht verschwindenden Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen stets kleine, freie elementare Spincluster auf, die zu einer nicht trivialen Brechung der Ergodizität im Grundzustand führen. In endlichen Systemen ist es jedoch möglich, daß eine Wechselwirkungskonfiguration nur zwei spiegelsymmetrische Grundzustandstäler erzeugt und somit nur eine triviale Brechung der Ergodizität aufweist. Ein wichtiges Maß bei der numerischen Untersuchung der Effekte der nicht trivialen Ergodizitätsbrechung bildet daher die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von 'trivialen' Systemen.

Da in einem derartigen System keine freien elementaren Spincluster existieren dürfen, errechnet sich die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines solchen Systems entsprechend (5.12) zu

$$
\begin{aligned}
w_{\text{trivial}} &\approx \left(1-w_4\right)^{N_P} \\
&\approx \left(1-\binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\text{afm}}^{4(d-1)}\left(1-p_{\text{afm}}\right)^{4d}\right)^{\frac{Nd(d-1)}{2}} \\
&\approx \left(1-\frac{Nd(d-1)}{2}\binom{2d-2}{d-1}^4 p_{\text{afm}}^{4(d-1)}\right).
\end{aligned}
\tag{5.19}
$$

Wie erwartet verschwindet w_{trivial} im Grenzfall unendlicher Teilchenzahl N für $p \neq 0$.

5.3.4 Numerische Ergebnisse

5.3.4.1 Anzahl der Systeme mit trivialer Ergodizitätsbrechung

Abbildung 5.2 zeigt den Anteil der Systeme mit trivialer Brechung der Ergodizität bei $T = 0$. Im Bereich geringer Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen stimmen die Werte für das zweidimensionale System sehr gut mit den ebenfalls eingezeichneten Näherungen entsprechend (5.19) überein. Beim dreidimensionalen System unterschätzt (5.19) jedoch die Wahrscheinlichkeit trivialer Systeme. Dies liegt vermutlich an der Annahme unabhängiger freier Spincluster.

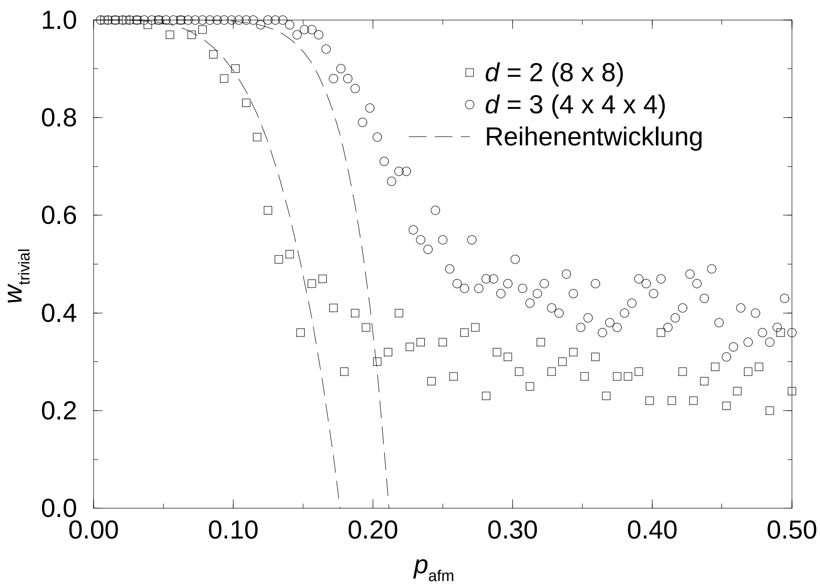

Abbildung 5.2 Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines trivialen Systems der Größe $N = 64$ für $d = 2$ und $d = 3$.
Die Reihenentwicklung entspricht (5.19).

Allgemein zeigt sich ein starker Anstieg des Anteils nicht trivialer Systeme im Bereich zwischen 10 und 20% antiferromagnetischer Bindungen. Ab etwa $p_{\mathrm{afm}} = 0.15$ $(2d)$ bzw. $p_{\mathrm{afm}} = 0.25$ $(3d)$ ist w_{trivial} nur noch schwach abhängig von der Konzentration.

Offenbar können die Effekte der Grundzustandsveränderungen nur an genügend großen Systemen studiert werden. Als Referenz läßt sich die Systemgröße betrachten, bei der nur noch die Hälfte der Systeme trivial sind. Da nach (5.19)

$$w_{\mathrm{trivial}}(N) \sim C^N \tag{5.20}$$

gilt, läßt sich die Systemgröße, bei der $w_{\mathrm{trivial}} = 0.5$ erreicht wird, über

$$N(w_{\mathrm{trivial}} = 0.5) \approx -\frac{64 \ln 2}{\ln[w_{\mathrm{trivial}}(N = 64)]} \tag{5.21}$$

abschätzen. Die in Abbildung 5.3 dargestellten Ergebnisse für $N(w_{\mathrm{trivial}} = 0.5)$ zeigen, daß gerade im Bereich geringer Konzentrationen sehr große Systeme nötig sind, um eine nicht triviale Ergodizitätsbrechung im Grundzustand zu untersuchen. Selbst bei $p_{\mathrm{afm}} = 0.5$ sollten die Systeme wenigstens aus mehr als 50 Einzelspins im Fall $d = 3$ und aus mehr als 30 Einzelspins für $d = 2$ bestehen. Die in dieser Arbeit betrachteten maximalen Systemgrößen von $N = 64$, stellen also in etwa eine untere Grenze dar. Für Untersuchungen im Bereich der vermuteten kritischen Konzentrationen p_c des Phasenübergangs von der ferromagnetischen zur Spinglasphase, sollten nach Möglichkeit größere Systeme verwendet werden.

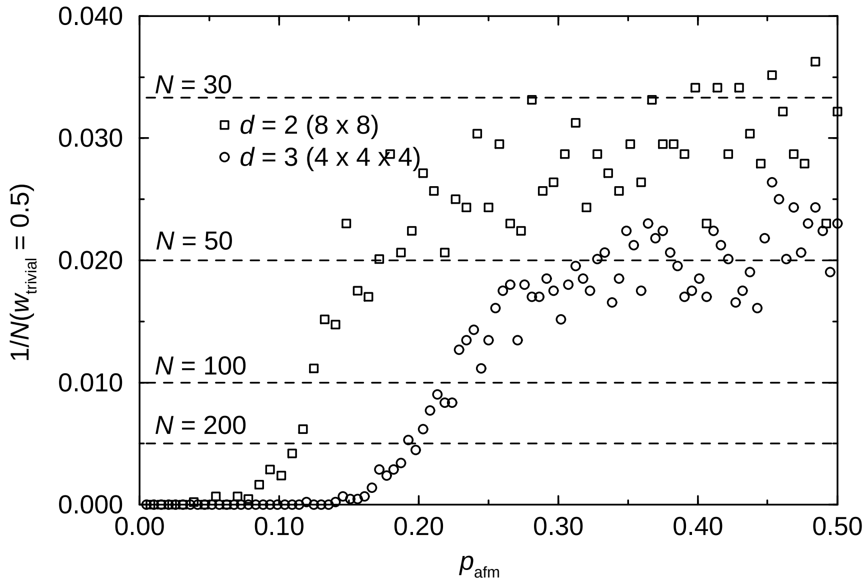

Abbildung 5.3 Systemgröße bei der $w_{\mathrm{trivial}} = 0.5$ in Abhängigkeit von der Konzentration p_{afm} der antiferromagnetischen Wechselwirkungen.

5.3.4.2 Die Clusterentropie

Die mittlere Zahl der Grundzustandscluster läßt sich aus der Clusterentropie $s_{0,\mathrm{Cl}}$ ablesen, die zumindest im Bereich kleiner Konzentrationen eng mit der im vorigen Abschnitt diskutierten Wahrscheinlichkeit w_{trivial} zusammenhängt. Die in Abbildung 5.4 eingezeichnete untere Schranke enspricht der durch die Endlichkeit des Systems bedingten Clusterentropie $\ln 2 / N$ für die triviale Symmetriebrechung, welche für unendliche Systemgröße N verschwindet.

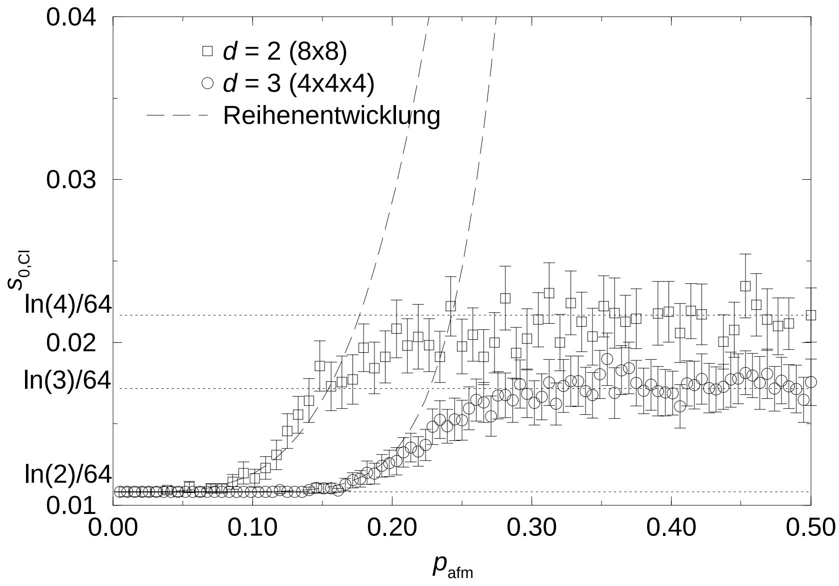

Abbildung 5.4 Clusterentropie $s_{0,\mathrm{Cl}}$ im Grundzustand in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen für $d = 2$ und $d = 3$. Die Reihentwicklung entspricht (5.17).

Da die ebenfalls eingezeichneten Reihenentwicklungen nach (5.17) im Bereich sehr kleiner Konzentrationen recht gut mit den gefundenen Werten übereinstimmen, scheint das dieser Näherung zugrunde liegende Bild von freien elementaren Spinclustern aus vier Spins im Prinzip korrekt zu sein. Bei höheren Konzentrationen treten jedoch vermehrt größere freie Spincluster auf, so daß die Näherung nicht mehr gerechtfertigt ist.

Obwohl dementsprechend für sehr große Systeme stets eine nicht triviale Zahl von Grundzustandsclustern auftritt, ist ein signifikanter Effekt für $d = 2$ erst ab $p_{\mathrm{afm}} \approx 0.08$ und für $d = 3$ ab $p_{\mathrm{afm}} \approx 0.15$ beobachtbar. Allgemein zeigen die zweidimensionalen Systeme eine höhere Zahl von Grundzustandsclustern. Dies ist verständlich, da die Wahrscheinlichkeit eines freien Spinclusters mit der Vergrößerung seiner Oberfläche abnimmt und diese Oberfläche bei gleicher Spinclustergröße für höhere Gitterdimensionen zunimmt. Bei maximaler Frustration erhält man

$$\begin{aligned} s_{0,\mathrm{Cl}} &= 2.17\,(\pm 0.17)\,10^{-2}\,k_B \quad \text{für } d=2 \quad \text{und} \\ s_{0,\mathrm{Cl}} &= 1.75\,(\pm 0.14)\,10^{-2}\,k_B \quad \text{für } d=3. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Dies entspricht etwa vier bzw. drei Grundzustandsclustern bei einer Systemgröße von $N = 64$.

Ähnlich zum vorhergehenden Abschnitt läßt sich auch hier eine Referenz als Systemgröße definieren, bei der im Mittel wenigstens drei Grundzustandscluster auftreten:

$$N(p_{\mathrm{afm}}) = \frac{\ln 3 - \ln 2}{s_{0,\mathrm{Cl}}(p_{\mathrm{afm}}) - s_{0,\mathrm{Cl}}(p_{\mathrm{afm}} = 0)}. \tag{5.23}$$

Die in Abbildung 5.5 dargestellten Werte sind insgesamt etwas höher als die Referenzwerte aus dem vorigen Abschnitt. Die in dieser Arbeit im Fall $d = 3$ verwendeten maximalen Systemgrößen von $N = 64$ entsprechen etwa der Referenzgröße bei maximaler Frustration.

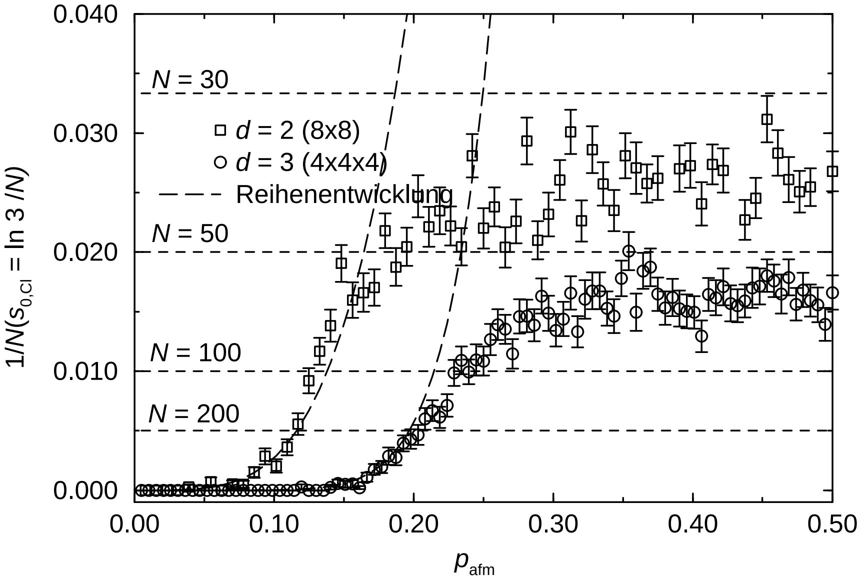

Abbildung 5.5 Systemgröße, bei der im Mittel drei Grundzustandscluster auftreten, in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen für $d = 2$ und $d = 3$.
Die Reihenentwicklung entspricht (5.17) und (5.23).

5.3.4.3 Die Zustandsentropie

Da bei kleinen Konzentrationen im wesentlichen noch keine zusätzliche Ergodizitätsbrechung auftritt, stimmt die Zunahme der Zustandsentropie (Abb. 5.6) in diesem Bereich etwa mit der Zunahme der Gesamtentropie überein (vgl. Abb. 4.9). Für den Fall maximaler Frustration ergibt sich

$$\begin{aligned} s_{0,\mathrm{St}} &= 7.42\,(\pm 0.60)\,10^{-2}\,k_B \quad \text{für } d=2 \quad \text{und} \\ s_{0,\mathrm{St}} &= 5.53\,(\pm 0.51)\,10^{-2}\,k_B \quad \text{für } d=3. \end{aligned} \tag{5.24}$$

Bei Annahme freier Einzelspins ergibt sich, daß im Grundzustand etwa 10% aller Spins freie Einzelspins sind.

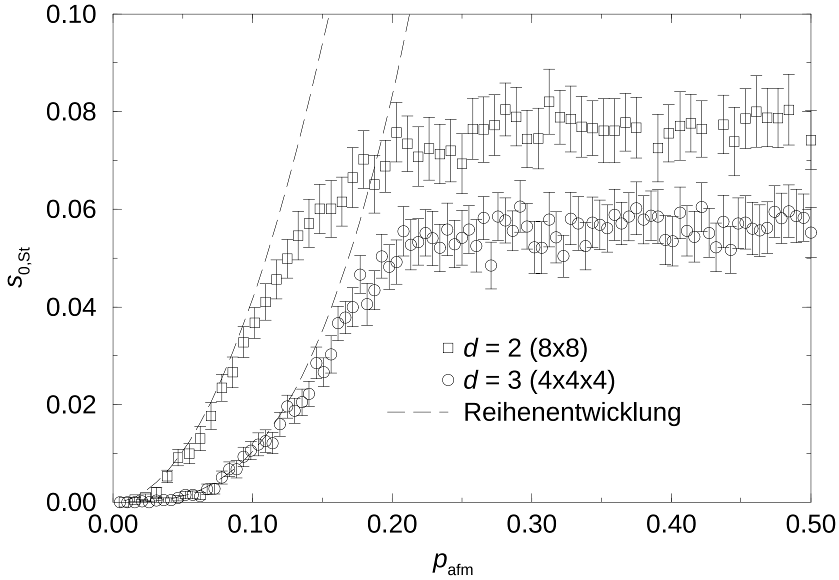

Abbildung 5.6 Zustandsentropie $s_{0,\mathrm{St}}$ in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen p_{afm} für $d = 2$ und $d = 3$.
Die Reihenentwicklung entspricht (5.18).

5.4 Die Magnetisierung

5.4.1 Einleitung

Zur Charakterisierung eines ferromagnetischen Systems erweist sich die mittlere Magnetisierung m des Gesamtsystems als sinnvoll. Führt man analog den Spinvektoren **s** (vgl. Abschn. 3.1.1)einen Vektor **m** der lokalen mittleren Magnetisierungen über

$$\overline{\mathbf{m}} = \begin{pmatrix} m_1 \\ \vdots \\ m_N \end{pmatrix} \tag{5.27}$$

ein, so läßt sich die Magnetisierung des Gesamtsystems als

$$m = \frac{\overline{\mathbf{m}}\,\mathbf{m}_{\mathrm{GZ,FM}}}{N} \tag{5.26}$$

schreiben. Dabei ergeben sich die einzelnen Komponenten des Vektors $\overline{\mathbf{m}}$ als thermodynamischer Erwartungswert der entsprechenden Spins zu

$$m_i = \langle s_i \rangle . \tag{5.27}$$

Die Magnetisierung m entspricht demnach der Projektion des lokalen Magnetisierungsvektors $\overline{\mathbf{m}}$ auf den Magnetisierungsvektor $\mathbf{m}_{\mathrm{GZ,FM}}$ des ferromagnetischen Grundzustandes. Für Mattis-artige Systeme (vgl. Abschn. 2.2.3) läßt sich analog eine Magnetisierung als Projektion auf den Magnetisierungsvektor des jeweiligen Grundzustandes definieren (siehe z.B. [86]).

Bei verschiedenen Phasenraumkomponenten muß entsprechend der thermodynamischen Wahrscheinlichkeit der jeweiligen Komponente gemittelt werden

$$m = \sum_{\alpha} P_\alpha m_\alpha \ , \tag{5.28}$$

wobei die Summe über alle Komponenten α läuft und m_α die Magnetisierung der Komponente α bezeichnet, welche analog zu (5.26) über den Vektor der lokalen mittleren Magnetisierungen dieser Komponente als

$$m_\alpha = \frac{\overline{\mathbf{m}}_\alpha\,\mathbf{m}_{\mathrm{GZ,FM}}}{N} \tag{5.29}$$

definiert werden kann.

Die thermodynamische Wahrscheinlichkeit P_α einer Phasenraumkomponente α ergibt sich aus der freien Energie F_α dieser Komponente und der Temperatur T zu

$$P_\alpha = \frac{e^{-F_\alpha/(k_B T)}}{\sum_\alpha e^{-F_\alpha/(k_B T)}} , \tag{5.30}$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante bezeichnet. Für den Fall verschwindender Temperatur tragen nur noch die verschiedenen Grundzustände zu (5.30) bei und man erhält

$$P_\alpha = \frac{M_\alpha}{\sum_\alpha M_\alpha} . \tag{5.31}$$

Außerdem läßt sich der Vektor der lokalen mittleren Magnetisierungen dann leicht aus den Grundzustandskonfigurationen über

$$\mathbf{m}_\alpha = \frac{1}{M_\alpha} \sum_{j \in C_\alpha} \mathbf{s}^{(j)} \tag{5.32}$$

bestimmen.

Aufgrund der Symmetrie des Hamiltonians verschwindet die Gesamtmagnetisierung nach (5.28) bei Mittelung der Magnetisierung über alle verschiedenen Phasenraumkomponenten. Um dies zu verhindern, kann man zum einen ein kleines äußeres, symmetriebrechendes Feld annehmen oder aber – numerisch einfacher – nur die Beträge der Magnetisierung mitteln.

Beim Ferromagneten existiert bei hohen Temperaturen nur eine Phasenraumkomponente, so daß die mittlere Magnetisierung aufgrund der Symmetrie des Hamiltonians verschwindet. Bei tiefen Temperaturen unterhalb einer Übergangstemperatur zerbricht der Phasenraum jedoch in zwei symmetrische, ergodische Komponenten. Dies führt zu einer spontanen Symmetriebrechung und einem von Null verschiedenen Wert der lokalen Magnetisierung. Bei verschwindender Temperatur nimmt die Gesamtmagnetiserung ihren Maximalwert an.

Bei Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen ausgehend von einem ferromagnetischen System verringert sich dieser Maximalwert der Magnetisierung, da zunehmend auch nicht ideal ferromagnetische Zustände als Grundzustände auftreten. Der mittlere Magnetisierungsvektor sollte jedoch noch in Richtung des ferromagnetischen Grundzustandes zeigen, da dies die einzige ausgezeichnete Richtung im Konfigurationsraum des Anfangssystems war. Das System ‘kennt’ noch das ursprüngliche ferromagnetische Anfangssystem.

Im Extremfall maximaler Frustration sollte jedoch keine Richtung des Konfigurationsraumes ausgezeichnet sein, da dieser Grenzfall nicht nur ausgehend vom ferromagnetischen System, sondern mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch von allen anderen Mattis-artigen Systemen ausgehend nach obiger Vorgehensweise erzeugt werden können. Daher sollte eine kritische Konzentration existieren, bei der das System sein ursprüngliches Anfangssystem ‘vergessen’ hat. Bei dieser Konzentration muß dementsprechend der mittlere Magnetiserungsvektor des Gesamtsystems verschwinden.

5.4.2 Näherungen

Ausgehend vom Grundzustand eines ferromagnetischen Systems verändert sich die Magnetisierung bei Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen im wesentlichen durch auftretende isolierte freie Einzelspins. Dabei führt jeder freie Einzelspin aus Symmetriegründen zum Verschwinden einer Komponente des Vektors der lokalen mittleren Magnetisierungen. Mit der mittleren Zahl freier Einzelspins entsprechend (4.19) ergibt sich für die Gesamtmagnetisierung

$$\begin{aligned} m &= \frac{N-n_1}{N} \\ &\approx 1-\binom{2d}{d} p_{\text{afm}}^{d} \,. \end{aligned} \tag{5.33}$$

Für den Fall maximaler Frustration ist jede Richtung des Konfigurationsraumes gleichberechtigt. Damit läßt sich die mittlere Magnetisierung in diesem Falle über

$$\begin{aligned} m &= \frac{\sum_{k=0}^{N} \binom{N}{k} \left| \frac{N-2k}{N} \right|}{\sum_{k=0}^{N} \binom{N}{k}} \\ &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi(N-1)}} \end{aligned} \tag{5.34}$$

abschätzen. Eine detaillierte Ableitung dieser Abschätzung ist in Anhang A angegeben.

5.4.3 Numerische Ergebnisse

Abbildung 5.7 zeigt die mittlere Magnetisierung in Abhängigkeit von der Konzentration der antiferromagnetischen Bindungen und der Dimension für verschiedene Systemgrößen. Die Näherungen nach (5.33) stimmen nur bis etwa $p_{\text{afm}} = 0.1$ mit den numerischen Ergebnissen überein. Speziell im dreidimensionalen Fall wird die Magnetisierung schon bei relativ kleinen Konzentrationen unterschätzt. Vermutlich wird dies durch die Existenz von freien Spinketten verursacht, deren Entmagnetisierungseffekte sich gegenseitig aufheben (vgl. Abschn. 5.5).

Unabhängig von der Dimension laufen alle Kurven bei maximaler Frustration gegen die nach (5.34) ermittelten Grenzwerte für endliche, völlig unkorrelierte Systeme. Die mittlere Magnetisierung ist in diesem Fall nur noch von der Größe und nicht von der Dimension des betrachteten Systems abhängig.

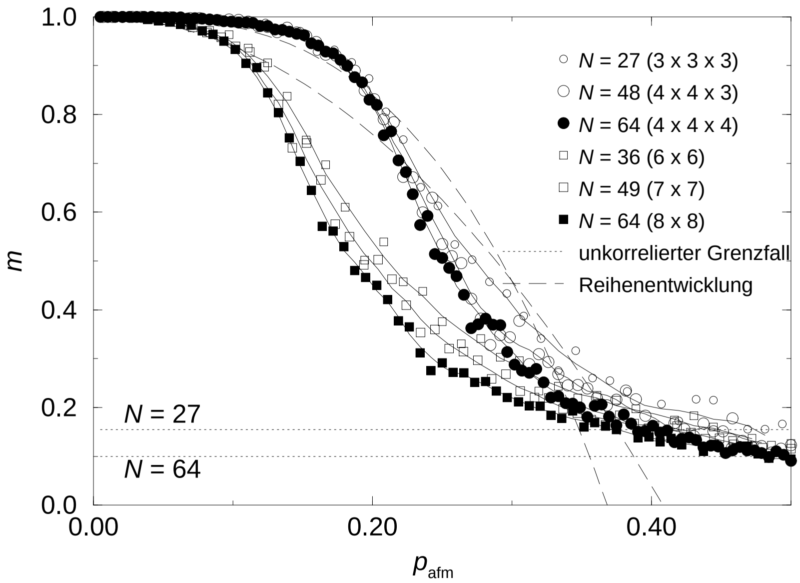

Abbildung 5.7 Mittlere Gesamtmagnetisierung m in Abhängigkeit von der Konzentration p_{afm} der antiferromagnetischen Bindungen und der Dimension d für verschiedene Systemgrößen.
Die durchgezogenen Linien dienen nur zur Orientierung für das Auge. Der Grenzwert für den unkorrelierten Grenzfall wurde nach (5.34) für $N = 27$ bzw. $N = 64$ bestimmt.

Zur Bestimmung der kritischen Konzentration wurden analog zur Vorgehensweise für $d = 2$ in [64] die Wendepunkte der Magnetisierungskurven verwendet. Die lineare Extrapolation auf unendliche Systemgröße (Abb. 5.8) liefert

$$\begin{aligned} p_c(2d) &= 0.142\ (\pm\ 0.005) \\ p_c(3d) &= 0.226\ (\pm\ 0.005). \end{aligned} \tag{5.35}$$

Der Wert für $d = 2$ weicht deutlich von der in [64] ermittelten Konzentration von etwa 0.10 ab. Allerdings zeigen die in dieser Arbeit für wesentlich größere Systeme gewonnenen kritischen Konzentrationen eine offenbar nichtlineare Größenabhängigkeit, so daß die lineare Extrapolation in Abbildung 5.8 vermutlich nicht gerechtfertigt ist.

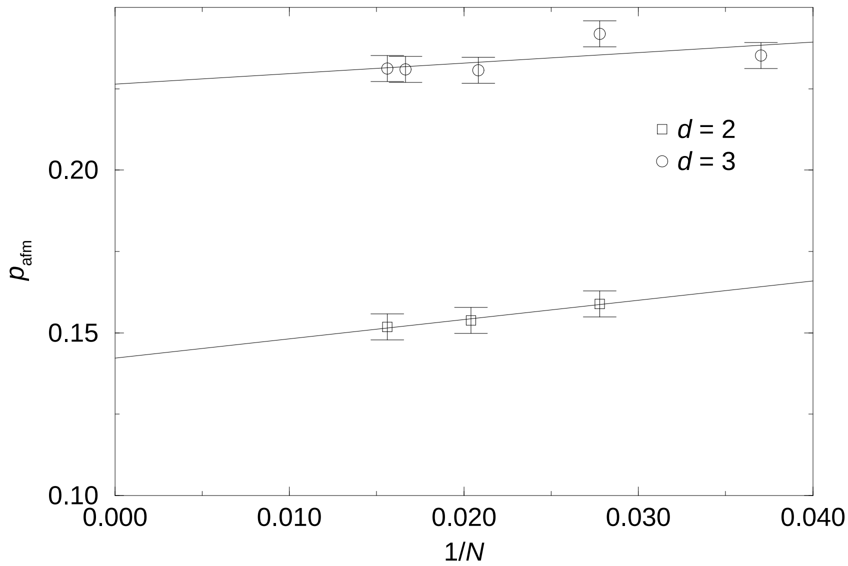

Abbildung 5.8 Kritische Konzentration p_c in Abhängigkeit von der Systemgröße und für $d = 2$ und $d = 3$.

Der einzige auf einer analogen Vorgehensweise beruhende Vergleichswert für $d = 3$ wurde in [11] mit etwa 0.27 angegeben. Unklar ist jedoch, wie groß der statistische Fehler dieses Werts ist. Die mit anderen Methoden ermittelten kritischen Konzentrationen liegen in einem relativ großen Bereich von 0.13 bis 0.25 weit verstreut. Der vermutlich genaueste von der Analyse der Frustrationsstruktur ausgehend bestimmte Wert für $d = 3$ wurde in [67] mit 0.154 angegeben und liegt deutlich unter dem in (5.35) angegebenen. Ursachen für diese starke Streuung können natürlich methodischer Art sein. Auf der anderen Seite ist jedoch unklar, welche der beiden kritischen Konzentrationen bei Existenz einer „random anti-phase state“ Phase von den verschiedenen benutzten Methoden tatsächlich bestimmt wurde.

5.5 Ordnungsparameter und Abstände im Konfigurationsraum

5.5.1 Einleitung

Zur Beschreibung von Spingläsern können die verschiedensten Ordnungsparameter definiert werden (siehe z.B [42, 86, 87]). Es zeigt sich, daß der Edwards-Anderson Ordnungsparameter [88] und der sogenannte magnetische Overlap im Fall verschwindender Temperatur in direktem Zusammenhang zur inneren Ausdehnung und zum Abstand der verschiedenen Grundzustandscluster im Konfigurationsraum stehen.

Im folgenden werden zunächst die wesentlichsten Eigenschaften der beiden oben genannten Ordnungsparameter rekapituliert. Dabei wird die üblicherweise benutzte Overlap-Verteilungsfunktion in zwei für die spätere Diskussion besser geeignete Teilfunktionen aufgeteilt.

Zur Beschreibung der Strukturen im Konfigurationsraum erweisen sich jedoch direkte Abstandsmaße auf Grundlage des Hamming-Abstandes als geeigneter. Diese können direkt auf die schon eingeführten Ordnungsparameter zurückgeführt werden. Zusätzlich lassen sich auch ausgehend von den Abstandsmaßen neue für die Beschreibung ausgedehnter Grundzustandscluster vermutlich besser geeignete Parameter definieren. Abschließend wird dann versucht, die Ordnungsparameter und die Abstandsmaße in sinnvoller Weise geometrisch zu veranschaulichen.

Da Ordnungsparameter und Abstandsmaße äquivalent sind, werden die numerischen Ergebnisse und Näherungen für letztere diskutiert. Anstelle der Verteilungsfunktion der Abstände wird jedoch direkt die üblicherweise benutzte Overlap-Verteilung untersucht. Die verwendeten Näherungen basieren im wesentlichen auf dem schon eingeführten Modell freier Einzelspins und freier Spincluster.

5.5.2 Ordnungsparameter

Zur Charakterisierung eines ferromagnetischen Systems erwies sich die mittlere Magnetisierung m als sinnvoll. Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, kann sie über den Mittelwert der lokalen mittleren Magnetisierungen m_i definiert werden. In einem ungeordneten System, wie z.B. einem Spinglas, sind die m_i jedoch abhängig von der Verteilung der Wechselwirkungen. Obwohl die Spins ähnlich dem Ferromagneten bei tiefen Temperaturen ‘einfrieren’ sollten, verschwindet die mittlere lokale Magnetisierung bei Mittelung über verschiedene Orte und Realisierungen der Wechselwirkungen.