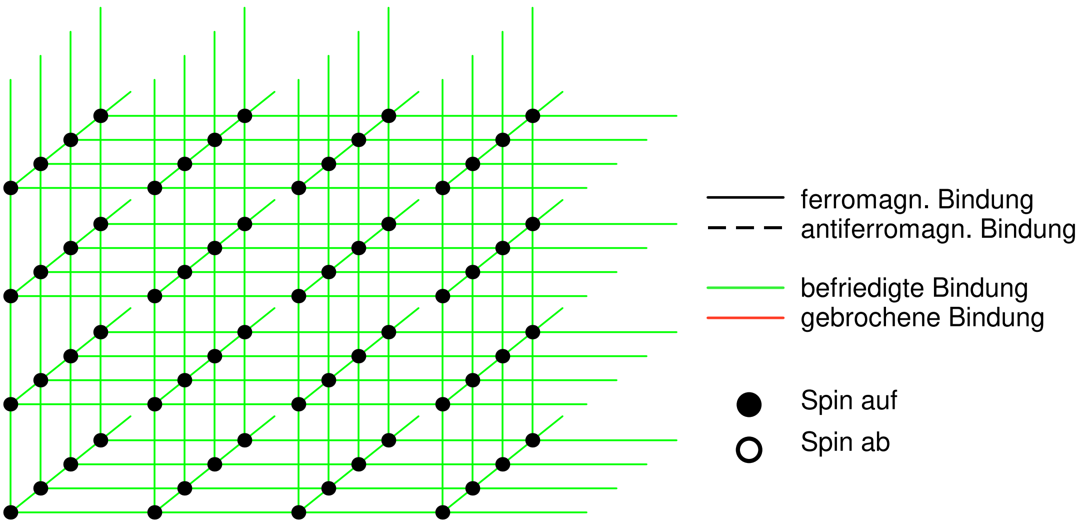


Abbildung 5.33 Realraumstruktur eines ferromagnetischen Systems.

Sehr schwache Dotierung mit antiferromagnetischen Bindungen
($0 < p_{afm} < p_1$ mit $p_1(2d/3d) \approx 3\%/7\%$)

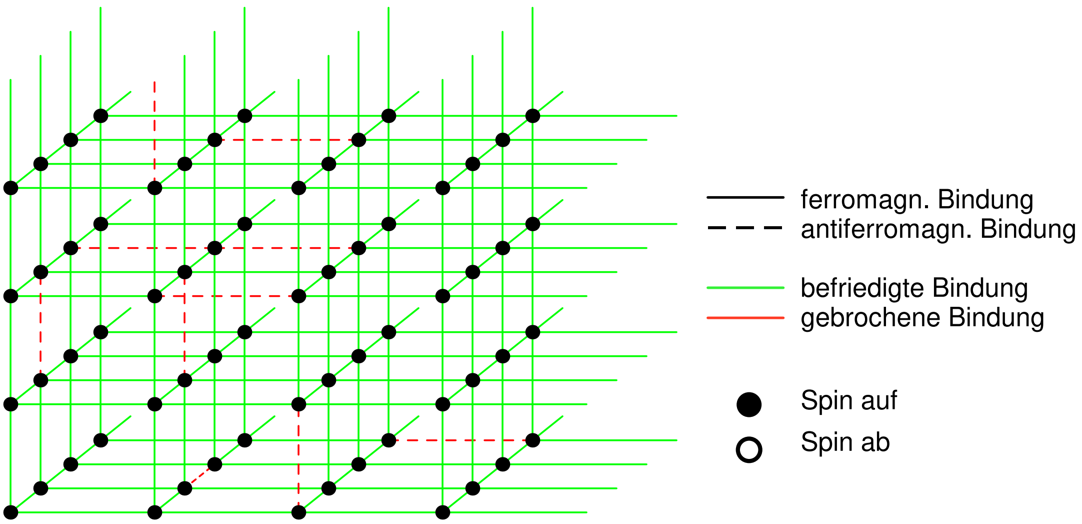


Abbildung 5.34 Realraumstruktur eines Beispielsystems bei $p_{\mathrm{afm}} = 5.2$ %.

Bei sehr schwacher Dotierung des Systems mit antiferromagnetischen Bindungen führen diese nur zu einer Anhebung der Grundzustandsenergie. Diese Anhebung erfolgt proportional zur Konzentration der antiferromagnetischen Wechselwirkungen. Gleichzeitig werden die Anregungsenergien einiger Spincluster im System durch die verringerte Oberflächenenergie etwas abgesenkt. Der ferromagnetische Grundzustand bleibt jedoch erhalten.

Die frustrierten Plaquetten sind paarweise an die negativen Bindungen gebunden und daher isoliert von anderen frustrierten Plaquetten. Sie wechselwirken dementsprechend im wesentlichen nur mit der jeweils anderen Plaquette des Paares. Die negativen Bindungen im System stellen somit auch die Strings gebrochener Bindungen im System dar.

Schwache Dotierung mit antiferromagnetischen Bindungen
($p_1 < p_{afm} < p_2$ mit $p_2(2d/3d) \approx 10\%/15\%$)

Bei weiterer Erhöhung der Dotierung werden die Oberflächenenergien, der verschiedenen im System möglichen Spincluster weiter abgesenkt. Für einen beliebigen Spincluster mit einer Zahl A von Oberflächenbindungen wächst die Wahrscheinlichkeit für eine Nullenergieoberfläche etwa proportional zu $p^{A/2}$. Damit treten zuerst nur freie Einzelspins auf, da sie die kleinste Oberfläche besitzen. Diese freien Einzelspins sind relativ weit voneinander entfernt im Realraum und führen zu einer schwachen Entartung des Grundzustandes. Die innere Ausdehnung des Grundzustandsclusters nimmt zunächst proportional zur Zustandsentropie zu. Abbildung 5.35 zeigt ein Beispiel für die Realraumstruktur eines solchen Systems.

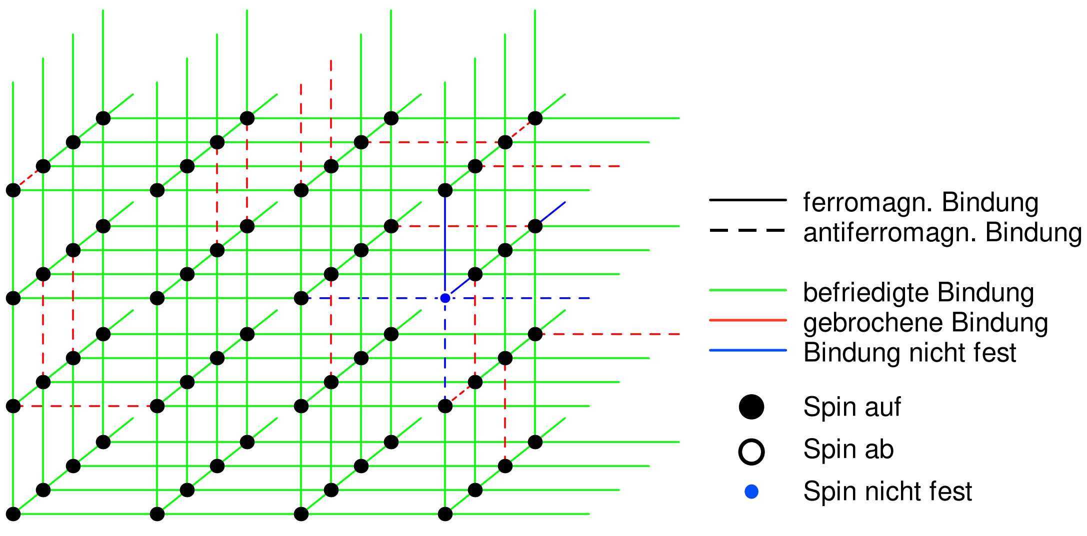


Abbildung 5.35 Realraumstruktur eines Beispielsystems bei $p_{\text{afm}} = 10.4\ \%$.

Mit der Dotierung wächst zum einen die Wahrscheinlichkeit, daß sich aus den freien Einzelspins längere zusammenhängende Spinketten bilden. Zum anderen kann die Oberflächenenergie einzelner Spincluster nun auch negativ werden, was dazu führt, daß diese Spincluster im Grundzustand gegenüber dem ferromagnetischen Grundzustand gedreht sind (Abb. 5.36).

Damit nimmt die Energie des Grundzustandes nicht mehr proportional zur Konzentration p_{afm} zu.

Als längere Spinketten treten zunächst Ketten aus zwei und drei Spins auf, welche jedoch noch nicht zu nicht-trivialen freien Spinclustern führen und somit auch keine Energiebarrieren bezüglich Einzelspinflips erzeugen. Diese längeren Spinketten bewirken, daß die Zustandsentropie eines Clusters im Konfigurationsraumes schwächer als die innere Ausdehnung zunimmt und erste kleinere Korrekturen zur Näherung freier Einzelspins auftreten. Da die Zunahme der Gesamtentropie wegen der trivialen Clusterentartung identisch mit der Zunahme der Zustandsentropie ist, wächst sie ebenfalls nicht mehr proportional zur Wahrscheinlichkeit der freien Einzelspins.

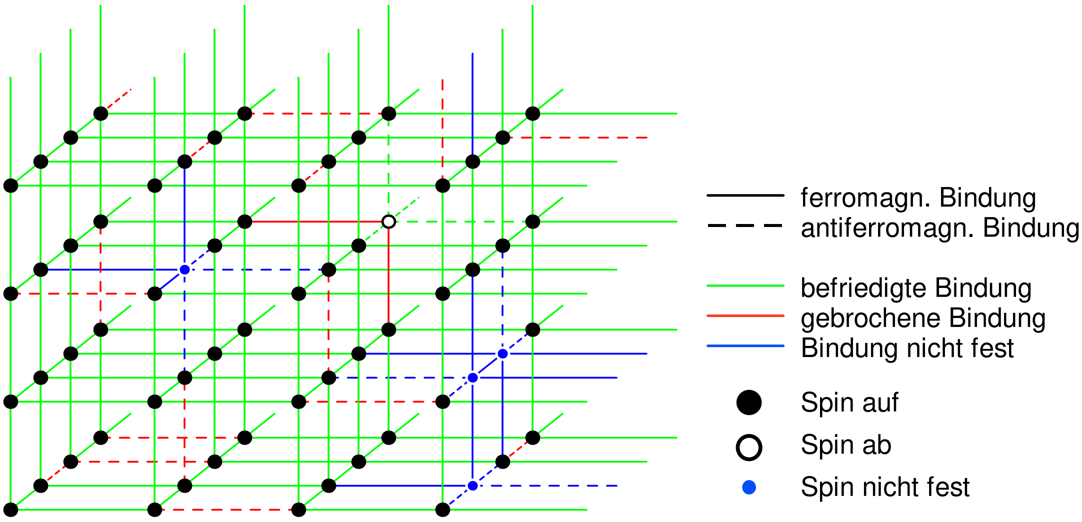


Abbildung 5.36 Realraumstruktur eines Beispielsystems bei $p_{\text{afm}} = 15.6$ %.
Die beweglichen Spins formen einen freien Einzelspin und eine Spinkette der Länge drei.

Durch die innere Ausdehnung der Grundzustandscluster wird der ursprüngliche Delta-Peak in der Verteilungsfunktion $P''(q)$ verbreitert. Der Anteil verschiedener Cluster im Konfigurationsraum $P'(q)$ trägt jedoch noch nicht zur Gesamtverteilung der Overlaps bei.
Das Grundgitter der festen Spins bleibt noch zusammenhängend und im wesentlichen ferromagnetisch orientiert. Damit weicht die Richtung des Magnetisierungsvektors im Konfigurationsraum schon leicht von der ferromagnetischen Grundrichtung ab, wird jedoch noch von der ferromagnetischen Richtung dominiert. Der Betrag der Magnetisierung des Gesamtsystems nimmt ab.

Die Frustrationsstruktur ist gekennzeichnet durch eine nur noch schwache Bindung der frustrierten Plaquetten an die sie erzeugenden antiferromagnetischen Wechselwirkungen. Damit wächst die Wahrscheinlichkeit für eine Wechselwirkung zwischen verschiedenen lokalen Frustrationen.

Starke Dotierung mit antiferromagnetischen Bindungen
($p_2 < p_{afm} < p_3$ mit $p_3(2d/3d) \approx 15-20\%/20-25\%$)

Mit einer weiteren Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen wächst die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten immer längerer Spinketten. Damit wächst auch die Ausdehnung und die Entartung der Grundzustandscluster weiterhin, jedoch nicht mehr so stark.

Gleichzeitig erhöht sich die Wahrscheinlichkeit für freie Spincluster im System. Die kleinsten und auch wahrscheinlichsten freien Spincluster sollten die Vierspincluster sein. Diese treten zuerst auf und bilden somit zunächst nur relativ kleine Energiebarrieren für Einzelspinflips. Der Grundzustand zerbricht in verschiedene Grundzustandstäler, die jedoch im Vergleich zur Ausdehnung der Täler einen noch relativ kleinen Abstand haben. Der mittlere Abstand im Konfigurationsraum wird im wesentlichen durch die Abstände innerhalb der verschiedenen Grundzustandstäler dominiert. Makroskopisch sollte ein Aufbrechen des Konfigurationsraumes vermutlich erst meßbar werden, wenn der Effekt der freien Vierspincluster in etwa so groß ist, wie der der freien Spinketten.

Abbildung 5.37 zeigt die Spinkonfigurationen für die zwei Grundzustandstäler eines Beispielsystems. Die mit einem gelben Kreis markierten Spins bilden einen freien Spincluster der Größe vier, welcher die beiden Täler trennt.

Das Netzwerk der festen Spins im System wird ausgedünnt, bleibt jedoch zunächst noch zusammenhängend und ferromagnetisch. Die freien Spincluster, die Spinketten und auch die vermehrt auftretenden geklappten Spins verringern die Gesamtmagnetisierung jedoch sehr stark. Die Vorzugsrichtung der Grundzustandstäler im Konfigurationsraum bleibt somit noch erhalten, wird aber weiter ‘aufgeweicht’.

In der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Overlaps treten die ersten Anteile für die Verteilung $P'(q)$ der Abstände zwischen verschiedenen Grundzustandsclustern bei $q \approx 1$ auf. Mit zunehmender Dotierung treten dann auch kleinere Overlaps auf. Der Anteil $P''(q)$ wird weiterhin breiter und das Maximum verschiebt sich zu Werten kleiner als Eins.

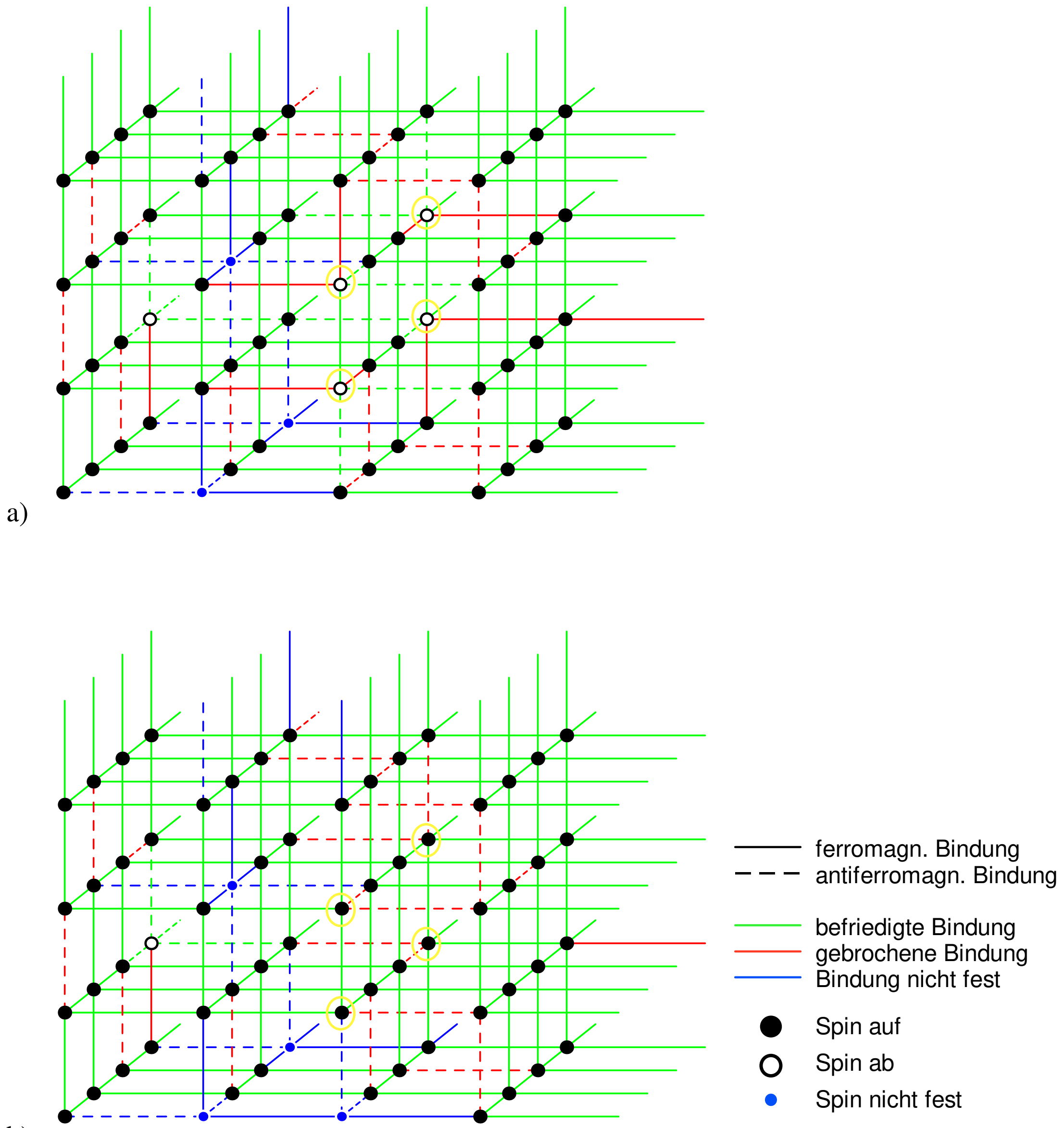
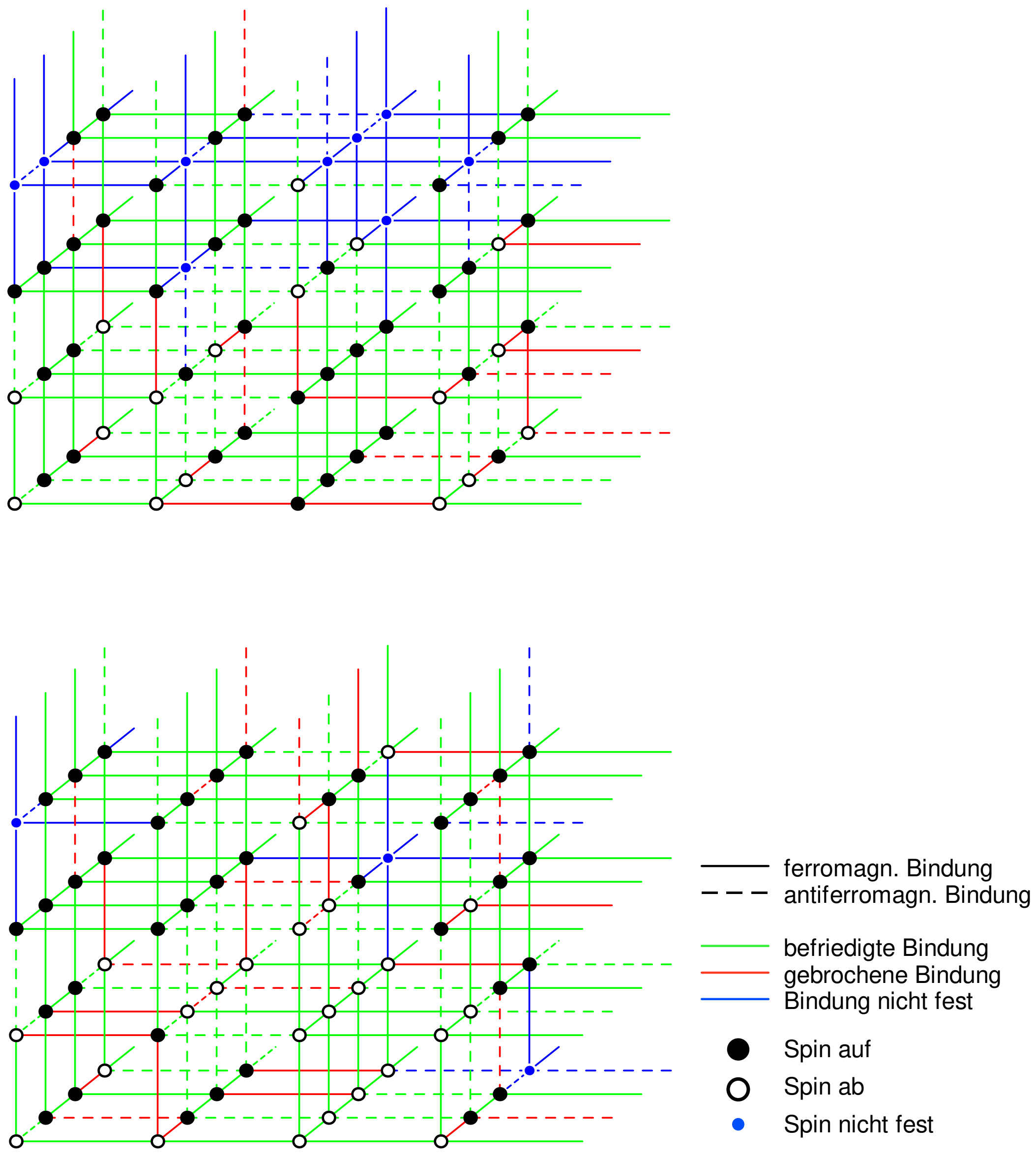


Abbildung 5.37 Realraumstrukturen eines Beispielsystems bei $p_{\mathrm{afm}} = 18.2$ %.
a) und b) stellen zwei verschiedene Grundzustandscluster im Konfigurationsraum dar. Die gelb umrandete Spingruppe bildet einen minimalen nicht trivialen elementaren freien Spincluster aus vier Spins, welcher die beiden Grundzustandstäler trennt.

Sehr starke Dotierung mit antiferromagnetischen Bindungen
$(p_3 < p_{afm} < 0.5)$

Mit der weiteren Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen wachsen sowohl die freien Spincluster als auch die Spinketten. Aufgrund der Endlichkeit des Systems sind sowohl die Spincluster als auch die Spinketten in ihrer Größe begrenzt. Die eingeführten Geometriefaktoren g_α und n_G zeigen für beide Spinstrukturen ein Sättigungsverhalten.



a)

b)

Abbildung 5.38 Realraumstruktur eines Beispielsystems bei $p_{\text{afm}} = 31.2\ \%$

Dieses Sättigungsverhalten wirkt sich auch auf alle anderen Grundzustandseigenschaften aus und führt dazu, daß diese sich oberhalb von p_3 nicht mehr qualitativ und nur unwesentlich quantitativ ändern. So erreichen speziell auch die Ausdehnung und die Abstände der Cluster im Konfigurationsraum einen Sättigungswert. Oberhalb von p_3 ist dann die Vorzugsrichtung des Magnetisierungsvektors verschwunden und die Gesamtmagnetisierung bricht schnell zusammen.

5.7.2 Diskussion der Effekte im Modell der Spinketten und -cluster

Die wesentlichen Effekte bei Veränderung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen lassen sich recht anschaulich im Rahmen des einfachen Modells freier Spins, successiv klappender Spinketten und freier Spincluster erklären.

Mit der Erhöhung der Dotierung des Systems mit negativen Wechselwirkungen treten zunächst freie Einzelspins auf. Deren Anzahl nimmt schnell zu und einzelne der freien Spins bilden mit ihren Nachbarspins die ersten kurzen Spinketten sukzessiv klappender Spins. Die zuerst auftretenden Spinketten aus zwei und drei Spins sind dabei tatsächlich linear. Mit weiterer Erhöhung der Konzentration treten dann auch zunehmend andere, zum Beispiel netzartige Geometrien sukzessiv klappender Spingruppen auf, die im weiteren jedoch ebenfalls der Einfachheit halber als Spinketten bezeichnet werden.

Mit dem Wachstum einer Spinkette wächst jedoch auch die Wahrscheinlichkeit dafür, daß Teile dieser Kette einen freien Spincluster kleinerer Größe bilden. Damit trägt dieser Teil der Spinkette nicht mehr zur Entartung der Grundzustandscluster, sondern zur Bildung neuer Cluster im Konfigurationsraum und zur Erhöhung des Abstandes zwischen diesen bei. Die ursprüngliche Spinkette sollte demnach entweder an der Position des freien Teilspinclusters in verschiedene kürzere Ketten auseinanderbrechen oder zumindest um die Größe des Teilclusters verkürzt werden. In jedem Fall wird durch das Auftreten der freien Spincluster das Wachstum der Spinketten eingeschränkt und die Zahl der kürzeren Spinketten erhöht. Dieser Effekt ist um so stärker, je größer die freien Spincluster werden.

Dies könnte erklären, warum die Näherung freier Einzelspins noch in Konzentrationsbereichen funktioniert, in denen die mittlere Spinkettenlänge schon deutlich von Eins verschieden ist. Der geringere Beitrag der längeren Spinketten zur Entartung und Ausdehnung der Grundzustandscluster im Konfigurationsraum wird vermutlich durch eine Erhöhung der Anzahl der kürzeren Ketten ausgeglichen.

Das Wachstum der freien Spincluster selbst und deren Anzahl wird anscheinend nur von der Systemgröße begrenzt. Bei hohen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen sind die freien Spincluster allerdings nicht mehr unabhängig voneinander, so daß sie auch überlappen können. Damit würde die aufgrund der geringen Oberfläche bevorzugte kompakte Form der

Spincluster entsprechend stärker strukturiert und wahrscheinlich perkolationsähnlich. In den Lücken dieser Struktur und um die freien Spincluster herum befinden sich dann die Spinketten.

Das skizzierte Bild sollte prinzipiell dimensionsunabhängig sein. Für die konkreten Konzentrationen ergeben sich jedoch deutliche Unterschiede zwischen den zwei- und dreidimensionalen Systemen. Alle Effekte treten für das zweidimensionale System bei geringeren Konzentrationen auf als beim dreidimensionalen System. Dies ist jedoch verständlich, da die Koordinationszahl bzw. die Dimension des Gitters für die Wahrscheinlichkeit freier Einzelspins bzw. Spinketten von großer Bedeutung ist.

Das Verständnis der kritischen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen im Bild der Spinketten und -cluster ist nur schwer möglich. Entsprechend der Effekte im Konfigurationsraum ergeben sich jedoch prinzipiell zwei verschiedene kritische Konzentrationen. Der erste kritische Punkt ist geprägt durch das Auftreten freier Spincluster im Realraum und der damit verbundenen Entstehung verschiedenen Grundzustandscluster im Konfigurationsraum. Der zweite kritische Punkt entsteht dadurch, daß das Ausfüllen des Realraums mit einer wachsenden Zahl freier Spincluster zunehmender Größe zum Zusammenbrechen des ferromagnetischen Grundgitters der festen Spins führt. Im Konfigurationsraum entspricht dies dem Verschwinden der Korrelation der mittleren Richtung aller Grundzustandscluster mit der einzigen ausgezeichneten Richtung des Vektors des ferromagnetischen Grundzustandes.

Beim Zusammenbrechen des ferromagnetischen Gitters erfolgt auch der Übergang von der postulierten random anti-state Phase zur Spinglasphase. Der Übergang von der ferromagnetischen zur „random antiphase-state“ Phase hängt jedoch entsprechend [7] und [61] vermutlich nicht mit der Entstehung der Grundzustandscluster zusammen. Stattdessen sollte er von einer Art Perkolationseffekt der Spinketten des Realraums verursacht werden.

Ein Vergleich der gefundenen kritischen Konzentrationen mit den Kurven für die Größe der freien Spincluster in Abbildung 5.32 läßt vermuten, daß sowohl $p_{c\lambda}$ als auch p_c den RAS-Spinglas Übergang beschreiben. Ob die dritte kritische Konzentration mit dem Übergang von der ferromagnetischen zur RAS-Phase zusammenhängt, ist jedoch unklar.