6 Die Energielandschaft

6.1 Allgemeine Struktur der Energielandschaft

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln die Veränderungen des Grundzustandes bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen studiert wurde, sollen im folgenden auch die tiefliegenden energetischen Anregungen mit in die Betrachtung einbezogen werden. Dabei wurde speziell der oft als Referenz benutzte Fall dreidimensionaler kubischer $\pm I$ Systeme bei maximaler Frustration ($p_{\mathrm{afm}} = 0.5$) betrachtet. Wie schon in Abbildung 4.1 angedeutet, ist trotz der Einschränkung die Ensemblestreuung für Grundzustandsenergie und -entropie dieser Systemklasse recht groß. Daher werden zunächst das unfrustrierte und das total frustrierte System als Grenzfälle dieses Ensembles betrachtet. Diesen wird dann die detaillierte Energielandschaft eines repräsentativen Systems, welches unter Berücksichtigung der Eigenschaften des Grundzustandes und der ersten Anregung ermittelt wurde, gegenübergestellt (siehe auch [69]).

Grundzustandsenergie und -entartung des unfrustrierten und des völlig frustrierten Systems wurden schon in Kapitel 2.2.5 diskutiert. Abbildung 6.1 zeigt im Ergebnis der Analyse der höheren Anregungen eines unfrustrierten 4×4×4 Systems ein schematisches Bild der Energielandschaft. Die Mittelsenkrechte in der Abbildung deutet dabei die triviale Spiegelsymmetrie des Konfigurationsraumes an. An der linken Seite des Schemas sind die Nummern der Energieniveaus und die dazugehörigen Gesamtenergien aufgetragen. Die Zahlen innerhalb der Talstruktur entsprechen der Gesamtzahl der Spinkonfigurationen des jeweiligen Tals auf diesem Energieniveau.

Die Energielandschaft wird durch die zwei trivialen Grundzustände geprägt, welche in den höheren Anregungen zu zwei Grundzustandstälern führen. Bis hinauf zur vierten Anregung treten außer diesen beiden Tälern keine weiteren auf. Die Energiebarriere zwischen diesen beiden Komponenten des Konfigurationsraumes ist dementsprechend höher als $28I$. Die Entartung der einzelnen Energieniveaus nimmt mit Erhöhung der Anregung nur relativ langsam zu.

Im Gegensatz dazu zeigt die Talstruktur des völlig frustrierten Systems in Abbildung 6.2 eine sehr starke Entartung im Grundzustand. Die verschiedenen Grundzustandstäler bestehen jedoch nur aus einer einzigen Spinkonfiguration. Schon in der ersten Anregung vereinen sich die verschiedenen Grundzustände zu einem einzigen großen Tal, welches somit auch die beiden symmetrischen Komponenten des Konfigurationsraums verbindet. Die Energiebarriere zwischen den verschiedenen Komponenten des Konfigurationsraums beträgt lediglich $4I$.

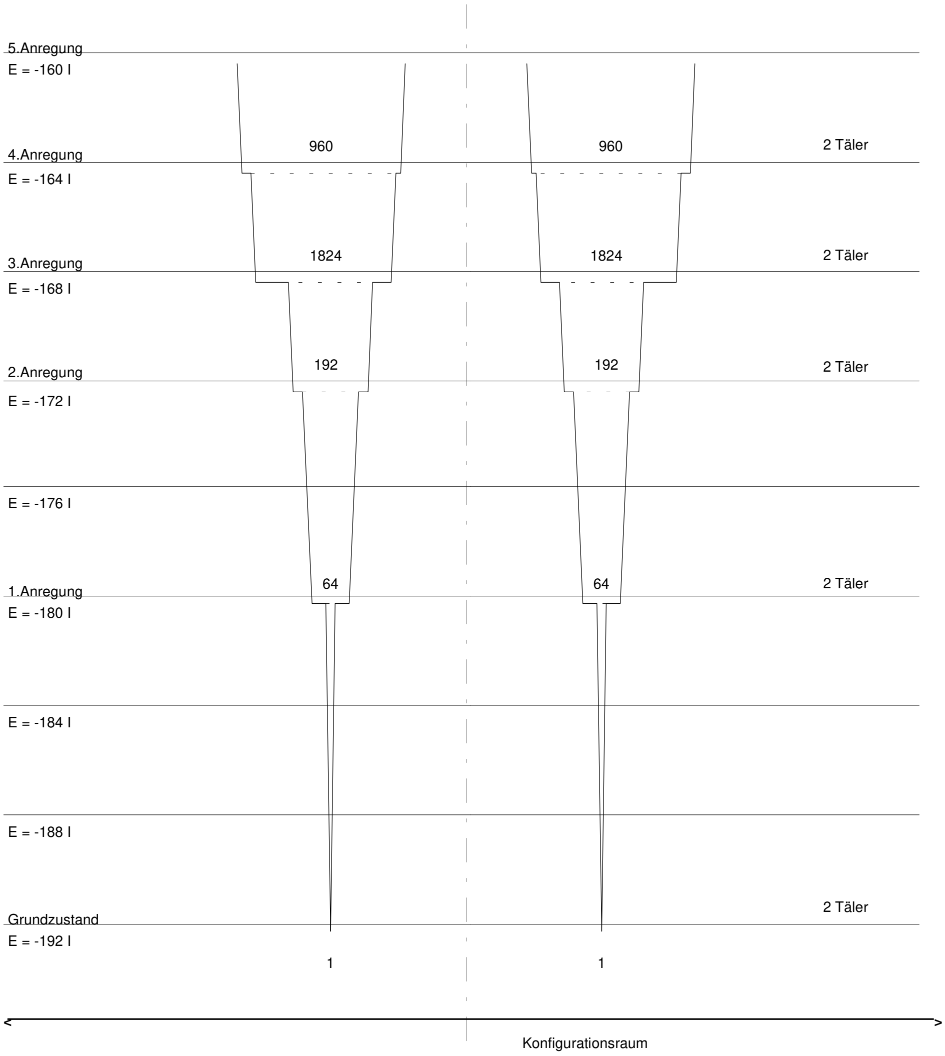

Abbildung 6.1 Schematisches Bild der Energielandschaft eines unfrustrierten 4×4×4 Systems.

Es ist zu erwarten, daß die Energielandschaft eines weniger extremalen Systems Eigenschaften hat, die zwischen denen der beiden Grenzfälle liegt. Für ein repräsentativ anhand der Eigenschaften des Grundzustandes und der ersten Anregung aus dem Ensemble aller Systeme gewähltes System erhält man die in Abbildung gezeigte Talstruktur ([69]).

Tatsächlich existiert im Grundzustand eine nicht triviale Aufspaltung in verschiedene Grundzustandstäler, wobei der Wert der Clusterentropie zwischen denen der beiden Grenzfälle liegt. Die Gesamtentartung des Grundzustandes und der ersten Anregung liegt ebenfalls jeweils zwischen den Werten des unfrustrierten und des völlig frustrierten Systems.

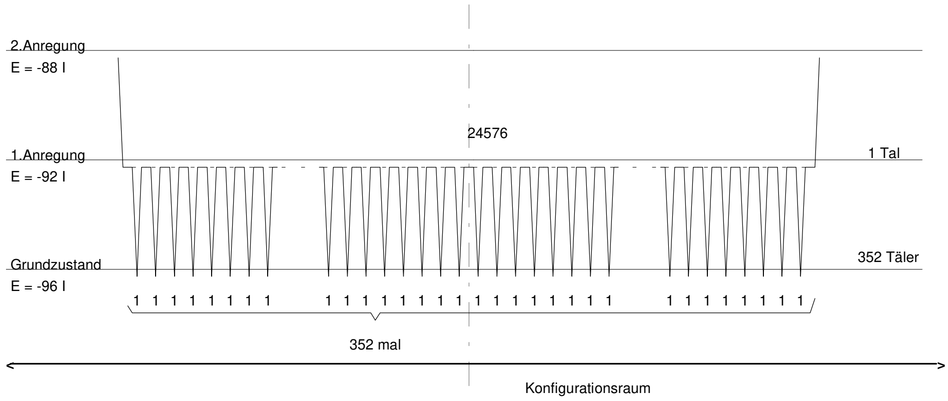

Abbildung 6.2 Schematisches Bild der Energielandschaft eines völlig frustrierten 4×4×4 Systems.

Auf der anderen Seite zeigt die Energielandschaft für das representative System eine wesentlich reichhaltigere Strukturierung als für die beiden Grenzfälle. So ist die Zustandsentropie der Grundzustandscluster von Null verschieden und unterschiedlich für die verschiedenen Cluster. Desweiteren treten neben den Grundzustandstälern mit Erhöhung der Anregung metastabile Täler auf. Diese Täler wachsen in den höheren Anregungen zusammen, wobei sich unterschiedlich hohe Energiebarrieren im System bilden.

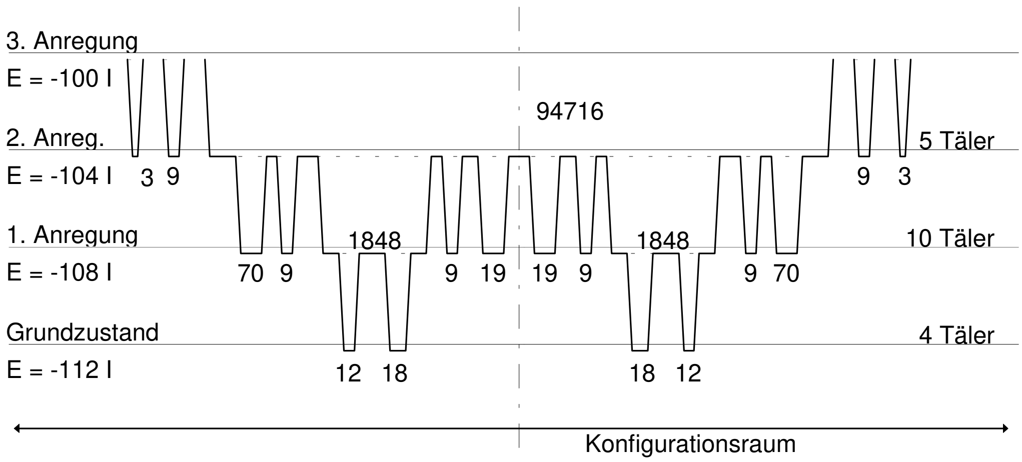

Abbildung 6.3 Schematisches Bild der Energielandschaft eines repräsentativen 4×4×4 Systems.

Die gesamte Talstruktur wird jedoch von zwei spiegelsymmetrischen großen Tälern, welche aus den Grundzuständen hervorgehen, dominiert. Die Trennung dieser beiden dominanten Komponenten des Konfigurationsraums verschwindet schon in der zweiten Anregung Dies führt zu einer Energiebarriere von $12I$. Da die beiden Täler zu entgegengesetzten Komponenten des Konfigurationsraums gehören, führt ihre Fusion zu einer interessanten Struktur des resultierenden Gesamttals.

Dieses erstreckt sich offenbar über den gesamten Konfigurationsraum, da mit jeder Spinkonfiguration automatisch auch die dazu spiegelsymmetrische Spinkonfiguration, welche ja im Konfigurationsraum den maximalen Hamming-Abstand besitzt, zu diesem Tal gehört. Andererseits beträgt die Gesamtentartung des Gesamttals mit etwa 10^6 Zuständen nur ca. $10^{-13}\%$ der Zahl aller Zustände. Zum Vergleich müßte die Konzentration zufällig im Konfigurationsraum verteilter Spinkonfigurationen bei dieser Systemgröße etwa $1/N \approx 1.5\%$ betragen, damit sich ein durch den gesamten Hyperwürfel perkolierender Cluster zusammenhängender Spinkonfigurationen ergibt [37]. Vermutlich besitzt dieses Gesamttal eine extrem dünne und netzartige Struktur, wie sie auch in [36] vorgeschlagen wurde.

Eine Beschreibungsmöglichkeit der gefundenen Talstruktur besteht in der Annahme einer einfachen Baumstruktur, wie sie in Abbildung 6.4a angedeutet ist. Eine detaillierte Analyse der Talstruktur ergibt jedoch eine wesentlich komplexere Gesamtstruktur (Abb. 6.4b).

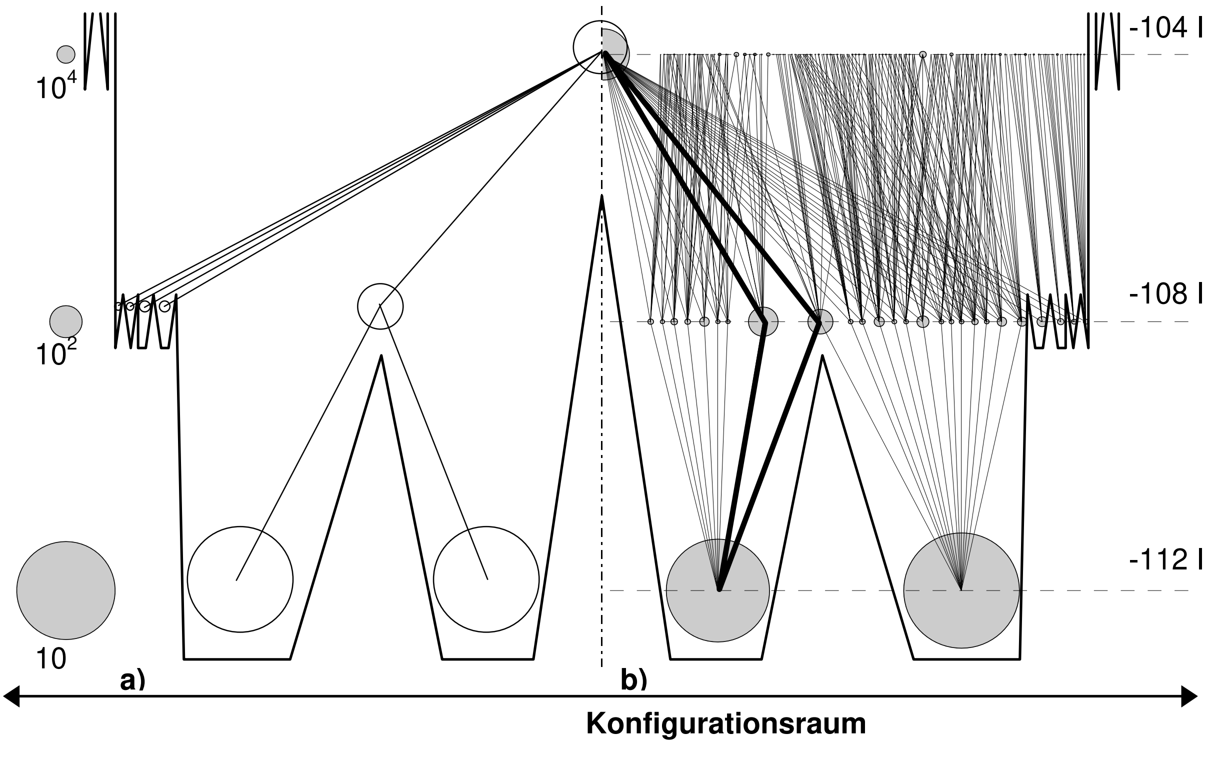

Abbildung 6.4 Detaillierte Struktur des Konfigurationsraumes des repräsentativen Systems. a) Schematisches Bild einer hierarchischen Baumstruktur. b) Ergebnis einer exakten Analyse der Struktur.

Ein wesentlicher Unterschied zur Struktur in Abbildung 6.4a besteht in der Existenz mehrerer verschiedener, voneinander getrennter mikrokanonischer Cluster auf demselben Energieniveau. Diese Cluster sind sowohl über höhere als auch über tiefere Energieniveaus miteinander verbunden, wobei sich auch geschlossene Ringwege ergeben können, die in einer hierarchischen Struktur nicht auftreten können. Ein Beispiel für einen derartigen Weg ist in Abbildung 6.4b extra eingezeichnet worden.

Dabei entsprechen die Kreise jeweils mikrokanonischen Clustern. Die Fläche der Kreise ist für jede Anregung proportional zur Zahl der Spinkonfigurationen des jeweiligen Clusters, wobei die Skalierung für jede Anregung unterschiedlich ist. Zur Orientierung wurde an der linken Seite für jedes Energieniveau ein Cluster mit einer entsprechenden Größenangabe eingezeichnet. Zwei Cluster, die durch eine Linie verbunden sind, sind bezüglich Ein-Spin-Flips benachbart. Dies bedeutet, daß mindestens eine Verbindung zwischen diesen beiden Clustern über nächste Nachbarn im Konfigurationsraum existiert.

6.2 Entartung der Täler im Konfigurationsraum

Zur Quantifizierung der Talstrukturen läßt sich die für den Grundzustand über Gleichung (5.15) definierte Zustandsentropie für höhere Anregungen über

$$s_{\varepsilon,\mathrm{St}} = \frac{\sum\limits_{\alpha} M_{\alpha,\varepsilon} \ln M_{\alpha,\varepsilon}}{M_{\varepsilon}} \tag{6.1}$$

verallgemeinern. Dabei bezeichnet M_ε bzw. $M_{\alpha,\varepsilon}$ die Anzahl aller Spinkonfigurationen im Gesamtsystem bzw. im Konfigurationsraumtal α mit einer Energie unterhalb oder gleich der Anregungsenergie ε (vgl. Kapitel 2.3). Die Summe läuft über alle bezüglich dieser Anregungsenergie existierenden Täler. Für $\varepsilon = 0$ ergibt sich wieder die Zustandsentropie für den Grundzustand. Da bei $\pm I$ Wechselwirkungen im System nur diskrete Anregungsenergien auftreten können, wird die Anregungsenergie ε zur Vereinfachung im weiteren durch die Nummer des Energieniveaus ausgehend von der Grundzustandsenergie (mit $\varepsilon = 0$) identifiziert werden. Der ersten Anregung entspricht dann $\varepsilon = 1$.

Die Wahrscheinlichkeit der verschiedenen Spinkonfigurationen hängt im allgemeinen von deren Energie und der Temperatur des Systems ab, so daß die Größe $s_{\varepsilon,\mathrm{St}}$ keine Entropie im thermodynamischen Sinne bezeichnet. Sie läßt sich jedoch als mittlere Zustandsentropie im Grenzfall unendlicher Temperatur interpretieren, falls keine Zustände oberhalb der Anregung ε berücksichtigt werden. Da $s_{\varepsilon,\mathrm{St}}$ jedoch gut geeignet ist, die mittlere Entartung der Spinkonfigurationen eines Tals im Konfigurationsraum zu quantifizieren, wird sie der Einfachheit halber im weiteren als mittlere Zustandsentartung zur Anregung ε bezeichnet.

In diesem Sinne läßt sich auch eine Gesamtentartung s_ε aller Spinkonfigurationen mit einer Energie unterhalb oder gleich der Anregungsenergie ε

$$s_\varepsilon = \ln M_\varepsilon \tag{6.2}$$

definieren. Diese Gesamtentartung läßt sich dann analog zur Zerlegung der Grundzustandsentropie in Gleichung (5.16) ebenfalls in die Zustandsentartung $s_{\varepsilon,St}$ und eine Entartung $s_{\varepsilon,\mathrm{Comp}}$ entsprechend

$$\begin{aligned} s_\varepsilon &= \sum_\alpha \frac{M_{\alpha,\varepsilon}}{M_\varepsilon} \ln \frac{M_\varepsilon}{M_{\alpha,\varepsilon}} + \sum_\alpha \frac{M_{\alpha,\varepsilon}}{M_\varepsilon} \ln M_{\alpha,\varepsilon} \\ &= s_{\varepsilon,\mathrm{Comp}} + \bar{s}_{\varepsilon,\mathrm{St}} \end{aligned} \tag{6.3}$$

zerlegen. $s_{\varepsilon,\mathrm{Comp}}$ beschreibt die Aufspaltung des Konfigurationsraums in verschiedene Komponenten bzw. Täler, wobei die Größe der unterschiedlichen Komponenten bei der Mittelung berücksichtigt wird. Für $\varepsilon = 0$ gilt offenbar $s_{0,\mathrm{Comp}} = s_{0,\mathrm{Cl}}$.

Abbildung 6.5 zeigt die Gesamtentartung, die Zustandsentartung und die Komponentenentartung für kubische 4×4×4 Systeme mit $\pm I$ Wechselwirkungen in Abhängigkeit von der Anregung ε. Dabei wurde über 100 verschiedene Systeme gemittelt. Die Zustandsentartung wächst mit Erhöhung der Anregung deutlich schneller als die Gesamtentartung. Da die Differenz zwischen beiden Entartungen der Komponentenentartung $s_{\varepsilon,\mathrm{Comp}}$ entspricht, nimmt die Zahl der verschiedenen Täler im Konfigurationsraum kontinuierlich ab. In Übereinstimmung mit der Energielandschaft des repräsentativen Systems verschwindet die Komponentenentartung etwas oberhalb der zweiten Anregung, da im wesentlichen nur noch eine einziges Tal im Konfigurationsraum existiert.

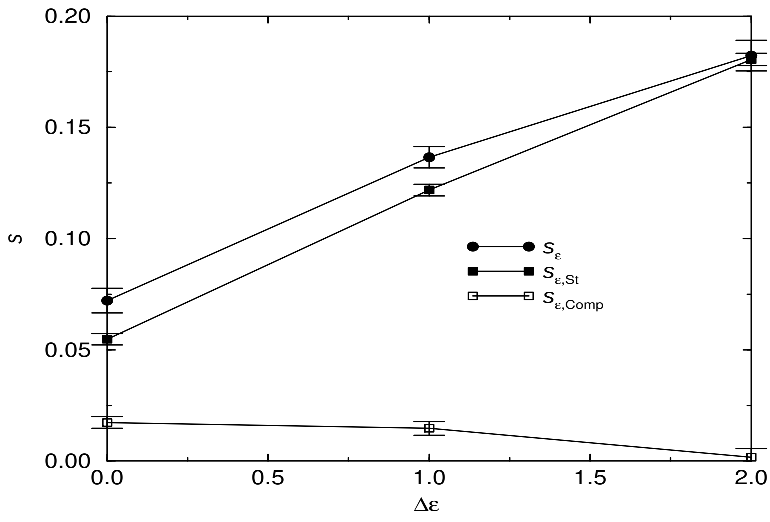

Abbildung 6.5 Gesamtentartung s_ε, Zustandsentropie $s_{\varepsilon,\mathrm{St}}$ und Komponentenentartung $s_{\varepsilon,\mathrm{Comp}}$ in Abhängigkeit von der maximalen Anregung ε.