7 Zusammenfassung

Die komplizierte Struktur des Konfigurationsraums scheint der Schlüssel zum Verständnis des ungewöhnlichen Relaxations- und Alterungsverhaltens von Spingläsern und anderen komplexen ungeodneten Systemen zu sein. Bis heute ist selbst im einfachen Fall eines Ising-Spinglas-Modells sehr wenig über die Details dieser Struktur bekannt. Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit tragen zum besseren Verständnis der detaillierten Struktur des Konfigurationsraums von $\pm I$ Ising-Systemen und deren Zusammenhang zu den Strukturen im Realraum dieser Systeme bei.

Einen Schwerpunkt der Arbeit bildet die Untersuchung der Veränderung des Zustandsraums zwei- und dreidimensionaler Systeme mit quadratischen Grundgittern bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen. Wesentliche Grundlage dieser Untersuchungen ist die exakte Berechnung aller Zustände der niederenergetischen Anregungen endlicher Systeme mit Hilfe der Methode des rekursiven branch-and-bounds und die Analyse dieser Zustände entsprechend ihrer Nachbarschaftsrelationen im Konfigurationsraum.

Zunächst wurden ausgehend von der exakten Kenntnis des Grundzustandes die mittlere Grundzustandsenergie und -entropie in Abhängigkeit von der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen betrachtet. Diese globalen Größen stimmen sowohl qualitativ und bei Extrapolation auf unendliche Systemgröße auch quantitativ mit den durch Näherungsverfahren gewonnenen Ergebnissen für wesentlich größere Systeme überein. Damit stellen diese relativ kleinen Systeme geeignete Untersuchungsobjekte für eine detaillierte Untersuchung der prinzipiellen Eigenschaften des Konfigurationsraums dar.

Im Bereich geringer Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen läßt sich das Verhalten der Energie und der Entropie des Grundzustandes gut im Rahmen eines einfachen Modells unabhängiger freier Einzelspins im Realraum verstehen. Für höhere Konzentrationen ist die Annahme unabhängiger Einzelspins jedoch nicht mehr zulässig, so daß sich signifikante Korrekturen ergeben.

Die bei Erhöhung der Konzentration negativer Bindungen auftretende nicht triviale Ergodizitätsbrechung des Grundzustandes läßt sich durch die Existenz elementarer nichttrivialer Spincluster im Realraum erklären. Die minimale Größe eines solchen Spinclusters ist von der Geometrie des Grundgitters abhängig. Bei quadratischen Grundgitteren bestehen die minimalen freien Spincluster aus wenigstens vier Spins, so daß die lineare Systemausdehnung zur Untersuchung der mit der Ergodizitätsbrechung verbundenen Effekte wenigsten $L = 4$ betragen sollte.

Dies ist bei den in dieser Arbeit betrachteten maximalen Systemgrößen gewährleistet. Der mit der Systemgröße nicht polynomial wachsende numerische Aufwand steht der exakten Untersuchung größerer Systeme entgegen. Prinzipiell läßt sich dieses Problem nur durch eine weitere Verbesserung der verwendeten Algorithmen lösen. Eine Möglichkeit, das Problem zu umgehen, besteht jedoch in einer geeigneten Kombination von exakten und Näherungsverfahren.

Zur Beschreibung der Strukturen des Konfigurationsraumes ist die Definition einer Zustands- und einer Clusterentropie sinnvoll. Diese Größen sind im Sinne eines informationstheoretischen Entartungsmaßes nur für den Grundzustand definiert. Sie lassen sich jedoch im Fall verschwindender Temperatur als Entropien interpretieren. Eine erste sinnvolle Verallgemeinerung der Entropien als Maß für die Komponentenaufspaltung des Konfigurationsraums bei höheren Anregungen wird in Kapitel 6 angegeben. Unklar ist jedoch, ob auch eine geeignete Verallgemeinerung auf endliche Temperaturen möglich ist.

Eine weitere Möglichkeit zur Quantifizierung der Strukturen des Konfigurationsraums bietet die Untersuchung verschiedener Ordnungsparameter. Der Edwards-Anderson Ordnungsparameter und der magnetische Overlap lassen sich im Grundzustand als Abstandsmaße im Konfigurationsraum geometrisch interpretieren. Dabei erweist sich der neu eingeführte Zentralabstand zur Beschreibung des Abstands zwischen ausgedehnten Grundzustandsclustern im Konfigurationsraum besser geeignet als der mittlere Abstand. Dem Zentralabstand läßt sich ein reduzierter Overlap zuordnen, welcher dementsprechend die Größe der betrachteten Cluster im Konfigurationsraum berücksichtigt. Fraglich ist, inwieweit der Zentralabstand und der reduzierte Overlap auch zur Beschreibung unendlicher Systeme bzw. höherer Anregungen geeignet ist.

Ein Vergleich der verschiedenen Abstandsmaße zeigt einen Effekt, der nicht im Rahmen dieser Arbeit erklärt werden kann. Der mittlere innere Abstand der Grundzustandscluster und der Zentralabstand zwischen verschiedenen Clustern im Konfigurationsraum streben bei hohen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen demselben Sättigungswert zu.

In diesem Konzentrationsbereich liefert die Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Overlaps eine deutliche Abschwächung der Korrelationen zwischen den verschiedenen Grundzustandsclustern. Die Annahme unkorrelierter Grundzustandscluster ist jedoch selbst im Fall maximaler Frustration nicht gerechtfertigt. Ob die Restkorrelationen durch eine ultrametrische Strukturierung des Konfigurationsraums verursacht werden bzw. mit dem oben erwähnten Effekt zusammenhängen, ist unklar. Eine Möglichkeit zur Klärung dieser Frage liegt in der Untersuchung umfangreicherer Ensemble mit größeren Systemen und einer direkten Prüfung der Dreiecksungleichung im Konfigurationsraum.

Die meisten Veränderungen des Konfigurationsraums im Bereich geringer Konzentrationen antiferromagnetischer Wechselwirkungen können unter Annahme freier Einzelspins und freier elementarer Spincluster im Realraum quantitativ verstanden werden. Ein gezielter Vergleich von Entropie- und Abstandsmaßen der Grundzustandscluster im Konfigurationsraum liefert indirekt auch Informationen über die geometrischen Strukturen im Realraum. Dabei erweist sich das angenommene Modell freier Einzelspins schon bei kleinsten Konzentrationen als inkorrekt. Es kann jedoch durch die Annahme zusammenhängender Ketten sukzessiv klappender Spins im Realraum erweitert werden. Der Vergleich mit den direkt im Realraum gefundenen Strukturen steht noch aus.

Die Veränderungen des Realraums und des Konfigurationsraums der untersuchten Systeme beim schrittweisen Übergang von einem ferromagnetischen System zu einem Spinglas lassen sich gut im Modell freier Einzelspins, Spinketten und freier Spincluster im Realraum verstehen. Die gewonnenen Einsichten stützen die Existenz der von anderen Autoren postulierten „random antiphase-state“ Phase in einem mittleren Konzentrationsbereich. In der Konsequenz sollten zwei kritische Konzentrationen existieren – eine für den Übergang von der ferromagnetischen zur RAS-Phase und eine für den Übergang von der RAS-Phase zur Spinglasphase.

Die Zuordnung der im Rahmen dieser Arbeit bestimmten kritischen Konzentration zu diesen Übergängen ist jedoch schwierig. Vermutlich beschreiben die aus der Frustrationsstruktur abgeleitete Konzentration $p_{c\lambda}$ und die dem Verschwinden der Gesamtmagnetisierung entsprechende Konzentration p_c den Übergang von der RAS-Phase zur Spinglasphase. Dieser Übergang erfolgt demnach in zwei Dimensionen bei $13-15\%$ antiferromagnetischer Bindungen und in drei Dimensionen etwa bei $22-26\%$. Eine weitere kritische Konzentration ergibt sich aus der Untersuchung der Energiezunahme bei Variation der Konzentration frustrierter Plaquetten im System zu 10.9% (2d) bzw. 17.5% (3d). Zur Klärung der Frage, ob diese Konzentration mit dem Übergang von der ferromagnetischen zur RAS-Phase zusammenhängt, sind weitere Untersuchungen nötig.

Die im letzten Kapitel untersuchte Detailstruktur der Energielandschaft niederenergetischer Anregungen im System ist durch mikrokanonische Cluster und dominante Energietäler im Konfigurationsraum geprägt. Man findet bei endlichen Systemen der Größe $4\times4\times4$, daß die mittlere Komponentenentartung schon etwa in der zweiten Anregung verschwindet. Somit werden allein durch die drei tiefliegendsten Anregungen des Systems vermutlich die wesentlichen Systemeigenschaften im Tieftemperaturbereich bestimmt.

Durch einfache Clustermodelle läßt sich ausgehend von den gefundenen Detailstrukturen im Konfigurationsraum eine gezielte Vergröberung der komplexen Energielandschaft erreichen. Dies eröffnet neue Möglichkeiten für die Untersuchung des Langzeitrelaxationsverhaltens derartiger komplexer Systeme. Eine konkrete Anwendung der vorgeschlagenen Clustermodelle auf größere Systeme oder Systeme mit kontinuierlichen Wechselwirkungen bleibt zukünftigen Arbeiten vorbehalten.