Thesen zur Dissertation

„Zur Phasenraumstruktur in ungeordneten $\pm I$ Ising-Spinsystemen“

vorgelegt von
Thomas Klotz

1. Ziel der vorliegenden Arbeit ist das bessere Verständnis der detaillierten Struktur des Konfigurationsraums von zwei- und dreidimensionalen $\pm I$ Ising-Systemen sowie deren Zusammenhang zu den Strukturen im Realraum dieser Systeme. Speziell die Veränderung dieser Strukturen bei Variation der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen wurde untersucht.

2. Grundlage der 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.

3. Energie und Entropie des Grundzustands dieser numerisch noch exakt behandelbaren kleinen Systeme stimmen qualitativ und bei Extrapolation auf unendliche Systemgröße auch quantitativ mit den durch Näherungsverfahren für wesentlich größere Systeme gewonnenen Werten überein. Damit stellen diese kleinen Systeme geeignete Untersuchungsobjekte für eine detaillierte Untersuchung der prinzipiellen Eigenschaften des Konfigurationsraums dar.

4. Die Frustration endlicher Systeme und somit auch die Grundzustandseigenschaften hängen sehr sensibel von der Realisierung der Wechselwirkungen und vom Charakter der Randbedingungen ab.

5. Ausgehend von der Frustrationsstruktur werden zwei verschiedene kritische Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen bestimmt. Eine weitere kritische Konzentration ergibt sich aus der Untersuchung der Konzentrationsabhängigkeit der Magnetisierung. Der Zusammenhang dieser Konzentrationen zur Struktur des Real- und des Konfigurationsraums wird diskutiert.

6. Die makroskopischen Eigenschaften Energie und Entropie lassen sich im Bereich geringer Konzentrationen negativer Wechselwirkungen mit dem einfachen Modell freier Einzelspins verstehen.

7. Die bei Zunahme der Konzentration antiferromagnetischen Bindungen auftretende nicht triviale Ergodizitätsbrechung des Grundzustandes läßt sich durch das Auftreten elementarer nicht trivialer Spincluster im Realraum erklären. Die minimale Größe eines solchen Spinclusters ist von der Geometrie des Grundgitters abhängig.

8. Zur Beschreibung der Entartung in verschiedene Grundzustandscluster kann eine Zustands- und eine Clusterentropie definiert und numerisch bestimmt werden. Ausgehend davon wird die zur Untersuchung relevanter Grundzustandseigenschaften notwendige Mindestgröße endlicher Systeme abgeschätzt.

9. Der Edwards-Anderson Ordnungsparameter und der magnetische Overlap lassen sich im Grundzustand als Abstandsmaße im Konfigurationsraum geometrisch interpretieren. Zur Beschreibung des Abstandes zwischen ausgedehnten Grundzustandsclustern im Konfigurationsraum ist der neu eingeführte Zentralabstand und der zugehörige reduzierte Overlap besser geeignet als der üblicherweise benutzte Overlap.

10. Ein Vergleich der verschiedenen Abstandsmaße zeigt, daß der mittlere innere Abstand der Grundzustandscluster und der Zentralabstand zwischen verschiedenen Clustern bei hohen Konzentrationen antiferromagnetischer Bindungen demselben Sättigungswert zustreben. Dieser Effekt kann jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht erklärt werden.

11. Die Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Overlaps liefert eine Abschwächung der Korrelationen zwischen den verschiedenen Grundzustandsclustern mit Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen. Ob die Restkorrelationen bei einer Konzentration von 50% durch eine ultrametrische Strukturierung des Konfigurationsraums verursacht werden, ist unklar.

12. Durch einen gezielten Vergleich von Entropie- und Abstandsmaßen für die Grundzustandscluster im Konfigurationsraum lassen sich Informationen über die geometrischen Strukturen im Realraum, wie z.B. die Größe freier Spincluster, gewinnen. Das angenommene Modell freier Einzelspins erweist sich schon bei kleinsten Konzentrationen als inkorrekt. Es kann jedoch durch die Annahme zusammenhängender Ketten sukzessiv klappender Spins im Realraum erweitert werden.

13. Das Gesamtverhalten der untersuchten Systeme beim Übergang vom Ferromagneten zum Spinglas durch schrittweise Erhöhung der Konzentration antiferromagnetischer Bindungen läßt sich im Modell der Einzelspins, Spinketten und freien Spincluster des Realraums verstehen. Die gewonnenen Einsichten stützen die vermutete Existenz einer sogenannten „random antiphase-state“ Phase in einem mittleren Konzentrationsbereich.

14. Die Detailstruktur der Energielandschaft niederenergetischer Anregungen im System ist durch mikrokanonische Cluster und dominante Energietäler im Konfigurationsraum geprägt. Zur Beschreibung dieser Strukturen lassen sich die Zustands- und Clusterentropie des Grundzustandes auf eine Tal- und Komponentenentartung bei höheren Anregungen verallgemeinern. Man findet bei endlichen Systemen der Größe $4\times4\times4$, daß die mittlere Komponentenentartung schon etwa in der zweiten Anregung verschwindet.

15. Durch einfache Clustermodelle ist, ausgehend von den im Konfigurationsraum gefundenen Detailstrukturen, eine gezielte Vergröberung der komplexen Energielandschaft möglich. Dies eröffnet neue Möglichkeiten zur Untersuchung des Langzeitrelaxationsverhaltens komplexer ungeordneter Systeme.