Exakte Berechnung von Grundzuständen verdünnter Antiferromagnete

Diplomarbeit
von
Alexander Hartmann

angefertigt an der
Universität–Gesamthochschule Duisburg
Fachbereich Physik–Technologie
Theoretische Tieftemperaturphysik

Dezember 1993

Herrn Prof. Dr. K.D. Usadel gilt mein besonderer Dank für die interessante Themenstellung, die Möglichkeit, diese Arbeit unter seiner Leitung anzufertigen, seine hilfreichen Ratschläge und seine Diskussionsbereitschaft.
Außerdem danke ich Herrn Dr. U. Nowak und Herrn M. Staats für einige nützliche Hinweise und Diskussionen.
Bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Abteilung Theoretische Tieftemperaturphysik bedanke ich mich für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **6**

2 Grundlagen **8**

2.1 Magnetismus und Thermodynamik 8
2.2 Antiferromagnetismus 11
2.3 Ungeordnete Systeme 12
2.3.1 Spingläser 14
2.3.2 Verdünnte Antiferromagnete 19
2.3.3 Zufallsfeldsysteme 23
2.4 Finite Size Scaling 24
2.5 Einführung in die Graphentheorie 26

3 Darstellung der Algorithmen **29**

3.1 Umwandlung des Gitters in einen Graphen 29
3.1.1 Kapazität eines Schnitts 29
3.1.2 Verdünnte AF–Ising Systeme 31
3.2 Berechnung des minimalen Schnitts 32
3.2.1 Der Algorithmus von Ford–Fulkerson 33
3.2.2 Berechnung eines beliebigen minimalen Schnitts 36
3.3 Geschwindigkeit des Verfahrens 40
3.3.1 Zeitkomplexität des Ford–Fulkerson Algorithmus' 40
3.3.2 Zeitkomplextität des Schnitt Algorithmus' 43
3.3.3 Abhängigkeit von Parametern 44

4 Ergebnisse **47**

4.1 Einfache Ordnungsparameter 48
4.2 Überlapps 55
4.3 Struktur der Domänen 61
4.4 Korrelationen 70
4.5 Entartung 72
4.6 Das Zufallsfeldsystem 75

5 Zusammenfassung **81**

Anhang **83**

A Berechnung der Suszeptibilität **83**

B Umrechnung der Kapazität eines Schnittes **84**

C Transformation der Hamiltonfunktion **85**

D Algorithmus zur Bestimmung von Domänen **86**

Literaturverzeichnis **87**

Liste der wichtigsten Symbole

$[\ldots]_\alpha$	Mittelung über verschiedene Grundzustände und die Unordnung
$[\ldots]_B$	Mittelung über verschiedene Magnetfeld–Konfigurationen
$[\ldots]_G$	Mittelung über verschiedene Grundzustände
$[\ldots]_J$	Mittelung über verschiedene Bond–Konfigurationen
$[\ldots]_p$	Mittelung über verschiedene Loch–Konfigurationen
$\langle\ldots\rangle$	thermisches Mittel
(i,j)	Kante vom Knoten i zum Knoten j
χ_a	Suszeptibilität des AF–Ordnungsparameters
χ_m	Suszeptibilität der Magnetisierung
χ_q	Überlappsuszeptibilität
ϵ_i	$= 0$ falls der Gitterplatz i leer ist, sonst $= 1$
σ_i	Wert des Spins am Gitterplatz i
a	antiferromagnetischer (AF) Ordnungsparameter
B	Wert des homogenen Magnetfeldes
B_c	kritisches Feld für Übergang AF $\to$ SG
B_i	Wert des Magnetfeldes am Gitterplatz i
$c(i,j)$	Kapazität der Kante (i,j)
d	Dimension des Systems
E	Menge von Kanten (edges)
E_D	Wandenergie einer Domäne
$f(i,j)$	Fluß von Knoten i zum Knoten j
F_D	Oberfläche einer Domäne
G	Graph $G = (V, E)$

i_Q	Quelle (Knoten), hat Nummer 0
i_S	Senke (Knoten), hat Nummer $n+1$
J	Wert der Kopplungskonstanten
J_B	Wert der Kopplungskonstanten pro Bond: $J_B = 2J$
L	Kantenlänge des Gitters
m	Magnetisierung
M_D	Magnetisches Moment einer Domäne
n	Anzahl der Gitterplätze
N	Zahl der Spins
N_c	Zahl der Spins im perkolierenden Cluster
$N(i)$	Menge der Nachbarn eines Gitterplatzes i
p	Wahrscheinlichkeit eines Lochs an einem Gitterplatz
$P_J(q)$	Wahrscheinlichkeitsdichte des Auftretens eines Überlapps mit dem Wert q für Spingläser
$P_L(q)$	Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auftreten eines Überlapps mit Wert q im endlichen Gitter der Kantenlänge L
$q^{\alpha\beta}$	Überlapp zwischen zwei Replicas
R_D	Radius einer Domäne
$t(i)$	Liefert für einen Gitterplatz i den Wert ± 1, je nachdem ob i im AF Untergitter A oder B ist
V	Mengen von Knoten (vertices)
V_D	Volumen einer Domäne
x_i	beschreibt in welchem Teil eines Schnitts ein Knoten i ist
Z	Zustandsumme

Kapitel 1

Einleitung

Bei der Untersuchung von verdünnten Ising–Antiferromagneten im Feld (DAFF = **d**iluted **a**nti**f**erromagnet in a **f**ield) mit einfach–kubischen Gitter konnten in der B–T Ebene drei Zustände (Lochkonzentration $0.31 < p < 1$) unterschieden werden. Ein antiferromagnetisch ferngeordneter Zustand (AF) für niedrige Felder und Temperaturen, eine paramagnetischer (PM) bei hohen Feldern oder hohen Temperaturen und dazwischenliegend ein sog. Domänenzustand (SG). In [Nowak92] und [Staats93] wurde der Domänenzustand mittels Monte Carlo–Simulation untersucht. Er zeichnet sich durch eine fraktale Geometrie der Domänen und eine sehr kleine Korrelationslänge aus. Es ergab sich eine Ähnlichkeit zum Verhalten von Spingläsern: Die Grenzlinie zwischen dem AF und dem Domänenzustand hat dieselbe Form wie die sog. *AT–Linie*, welche die Spinglasphase vom paramagnetischen Zustand trennt. Ein wichtiger Ordnungsparameter zur Charakterisierung von ungeordneten Systemen ist die Verteilung der Überlapps. Ihre Berechnung ergab aber keine direkte Übereinstimmung zwischen DAFF und Spingläsern.

In dieser Arbeit werden nun die Grundzustände des DAFF exakt berechnet, um die Ergebnisse aus den genannten Arbeiten zu überprüfen. Außerdem sollen weitere Erkenntnisse über den Domänenzustand gewonnen werden. Insbesondere wird die antiferromagnetische Suszeptibilität und die Magnetisierung am Übergang AF$\rightarrow$SG ($T = 0$) auf Skalenverhalten untersucht und es werden ggf. kritische Exponenten berechnet. Weiterhin wird der DAFF mit einem antiferromagnetischen Zufallsfeldsystem mit binominaler Feldverteilung verglichen.

Zur Berechnung eines einzigen Grundzustandes wird der DAFF in einen äquivalenten Graphen transformiert und dann der Ford–Fulkerson Algorithmus verwendet, welcher den maximalen Fluß durch den Graphen berechnet.

Um die Überlapps zu berechnen, werden mehrere verschiedene Grundzustände benötigt. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Algorithmus entwickelt, der nach einem Zufallsverfahren jeden beliebigen Grundzustand ermitteln kann.

Im folgenden Kapitel werden die wichtigsten Grundlagen zusammengestellt, die für das Verständnis des Arbeit erforderlich sind. Im Abschnitt 3.2 wird der Ford–Fulkerson–Algorithmus und das Verfahren zur Ermittelung mehrerer Grundzustände vorgstellt. Außerdem wird die Zeitkomplexität der Verfahren untersucht. Den Hauptteil der Arbeit bildet Kapitel 4. Dort werden einfache Ordnungsparameter des DAFF entlang der B–Achse ($T = 0$) ermittelt und deren Skalenverhalten betrachtet. Durch Berechnung der Überlapps wird geprüft, inwieweit diese Phase Spinglasverhalten zeigt. Für den Domänenzustand wird die geometrische Struktur der Domänen untersucht. Es wird überprüft, ob eine AF Fernordnung existiert und die Spin–Spin Korrelation wird berechnet. Außerdem wird der DAFF mit einem Zufallsfeldsystem mit binominaler Feldverteilung verglichen.

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für das Verständnis der Arbeit wichtigen Grundlagen kurz dargestellt. Zuerst werden die thermodynamischen Konzepte zur Beschreibung von Magnetismus erläutert. Als Beispiel wird der Antiferromagnetismus vorgestellt. Es folgt eine Einführung in die Behandlung ungeordneter magnetischer Systeme. Die Eigenschaften ihrer wichtigsten Vertreter Spingläser, verdünnte Systeme und Zufallsfeldsysteme werden genannt. Im darauffolgenden Abschnitt wird das finite size scaling beschrieben. Es ermöglicht aus den Ergebnissen für endliche Systeme die Parameter unendlicher Systeme abzuleiten. Das Kapitel schließt mit einer Einführung in die Begriffe der Graphentheorie. Man benötigt diese Begriffe, um die in der Arbeit verwendeten Algorithmen zu verstehen.

2.1 Magnetismus und Thermodynamik

Die Theorie des Magnetismus wird ausführlich in [Noltin86] vorgestellt.
Die Magnetisierung $\vec{m}$ eines Festkörpers in einem äußeren Magnetfeld ist eine Funktion der (hier: homogenen, zeitunabhängigen) Feldstärke $\vec{B}$. Vereinfachend sei im folgenden angenommen, daß sowohl $\vec{B} = B\vec{e}_z$ als auch $\vec{m} = m\vec{e}_z$ entlang einer Raumachse orientiert sind. Es gilt somit:

$$m = m(B) \tag{2.1}$$

Wie die Magnetisierung auf das äußere Magnetfeld reagiert, wird durch die „response"–Funktion *Suszeptibilität* $\chi(B)$ beschrieben:

$$\chi(B) := \frac{\partial m(B)}{\partial B} \tag{2.2}$$

In Abhängigkeit des Verhaltens von χ unterscheidet man verschiedene Arten des Magnetismus:

Bei $\chi^{\mathrm{dia}} = \mathrm{const.} < 0$ spricht man von *Diamagnetismus*. Das äußere Feld induziert magnetische Dipole, die nach der Lenzschen Regel dem Feld entgegen ausgerichtet sind. Dieser Effekt tritt bei allen Stoffen auf. Er ist aber relativ klein, so daß er meistens von den anderen Arten des Magnetismus überdeckt wird.
Die anderen Formen des Magnetismus setzen voraus, daß permanente magnetische Momente (*Spins*) vorhanden sind. Man unterscheidet zwischen *lokalisierten* und *itineranten* Momenten. Letztere stammen von quasifreien Leitungselektronen und werden hier nicht weiter betrachtet. Lokalisierte Momente entstehen durch Atome, die unvollständig gefüllte Elektronenschalen enthalten.
Orientieren sich die magnetischen Momente in Richtung des äußeren Feldes, so spricht man von *Paramagnetismus*. Dieser Effekt wird durch die thermische Bewegung der Momente behindert, d.h. die Suszeptibilität ist temperaturabhängig:

$$\chi^{\mathrm{para}} = \chi^{\mathrm{para}}(B, T) \tag{2.3}$$

Weiterhin ist es möglich, daß die Suszeptibilität nicht nur von Temperatur T und Feld B abhängt, sondern auch von der „Vorgeschichte" des Materials. Solches Verhalten läßt sich durch Wechselwirkungen der magnetischen Momente untereinander erklären. Das gilt beispielsweise für den *Ferro–* (FM) und den *Antiferromagnetisimus* (AF), bei denen sich benachbarte Spins vorzugsweise parallel bzw. antiparallel ausrichten.
Das kollektive Verhalten der Spins wird mittels idealisierter Modell–Hamiltonians beschrieben. Das einfachste Modell ist das sog. *Ising–Modell* [Ising25] mit folgender Hamilton–Funktion (klassisch):

$$H = -\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - B\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{2.4}$$

Es werden so Systeme beschrieben, bei denen sich die Spins aufgrund einer Anisotropie entlang einer Vorzugsrichtung ausrichten: Jedem der N Spins sind nur zwei Orientierungen erlaubt: $\sigma_i = \pm 1$. Die Stärke der Kopplung zwischen den Spins wird durch die Konstanten J_{ij} ausgedrückt. Oft beschränkt man sich auf die Wirkung zwischen nächsten Nachbarn und nimmt an, daß für sie die Wechselwirkung konstant ist: $J_{ij} = J$. Für $J > 0$ erhält man einen Ferromagneten, für $J < 0$ einen Antiferromagneten.
In anderen Modellen werden mehrere Komponenten der Spins betrachtet: zwei im x–y–Modell und drei im Heisenberg–Modell. Im Rahmen dieser Arbeit findet aber nur das Ising–Modell Verwendung.
Bei Systemen mit Spin–Spin Wechselwirkungen ist der Einfluß der Temperatur besonders stark (s.u.). Man muß somit thermodynamische Mittelwerte berechnen. Für eine physikalische Größe $g = g(\{\sigma_i\})$ ist dieser Mittelwert:

$$\langle g\rangle = Z^{-1}\mathrm{Sp}_{\{\sigma_i\}}\, g \exp(-\beta H) \tag{2.5}$$

Die Spurbildung Sp ist hier einfach die Summation über alle möglichen Kombinationen der Spinwerte $\{\sigma_i\}$, da H eine zahlenwertige Funktion und kein Operator ist. Dabei ist $\beta = 1/k_B T$ (k_B: Boltzmann Faktor) und Z die kanonische Zustandssumme mit:

$$Z := \mathrm{Sp}_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H) \tag{2.6}$$

Das thermische Mittel der Spinstellung ergibt z.B. die Magnetisierung:

$$m = \langle \sigma \rangle := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i \rangle \tag{2.7}$$

Damit ergibt sich für die Suszeptibilität (siehe Anh. A):

$$\chi = \frac{\partial}{\partial B} m = N\beta(\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2) \tag{2.8}$$

Obwohl das Ising–Modell von der Form sehr einfach ist, gelingt eine exakte Lösung bis jetzt nur für Nächste–Nachbar–Wechselwirkungen bei Dimensionen $d = 1$ [Ising25] und $d = 2\,(B = 0)$ [Onsage44]. Für höherdimensionale Systeme ist man auf Näherungslösungen, Computersimulationen und Experimente angewiesen.

Das Temperaturverhalten der Systeme leitet sich aus der thermodynamischen Bedingung nach Minimalisierung der Gibbschen freien Energie $G = U - TS - Bm$ ($U := \langle H \rangle$ = innere Energie, S = Entropie) ab. Dabei spielen zwei gegenläufige Tendenzen eine Rolle: Eine Minimierung der inneren Energie führt zu einer (FM/AF) Ordnung ($B = 0$), während eine Maximierung von S Unordnung zur Folge hat. Wie sich das System in Abhängigkeit seiner Parameter Temperatur T und Feld B verhält, wird durch sog. *Ordnungsparameter* beschrieben. Für den Ferromagneten ist das z.B. die Magnetisierung. Je nachdem welchen Wert der Ordnungsparameter annimmt, insbesondere ob er verschwindet oder der nicht, unterscheidet man verschiedene *Phasen*. Diese Phasen stellt man in einem *Phasendiagramm* dar, indem man die verschiedenen Gebiete in Abhängigkeit von B und T[1] markiert. Die Linien (oder Flächen), welche die Phasen trennen, bezeichnet man als *kritische Linien*.

Ändert sich der Ordnungsparameter am Übergang zwischen zwei Phasen unstetig, so spricht man von einem Phasenübergang *1. Ordnung*. Ist dagegen der Ordnungsparameter stetig, aber nicht seine erste Ableitung nach seinem konjugierten Parameter, so liegt ein Phasenübergang 2. Ordnung vor. Der konjugierte Parameter z.B. der Magnetisierung ist die Feldstärke B, d.h. die betrachtete Ableitung ist die Suszeptibilität. Die Suszeptibilität divergiert am Phasenübergang (1,2. Ordnung) für sehr große, d.h. mathematisch unendliche Systeme.

[1] Für allgemeine Phasendiagramme kann es natürlich noch andere Parameter wie Konzentrationen, Druck, elektrisiche Felder etc. geben.

In kleinen Systemen, wie sie in Simulationen behandelt werden, divergiert die Suszeptibilität nicht, zeigt aber ein Maximum.

Für den Ferromagneten ergibt sich, daß bei $B = 0$ und unterhalb einer kritischen Temperatur T_c die Spins sich ordnen. Das System ist in der ferromagnetischen Phase. Ansonsten liegt ein paramagnetischer Zustand vor.

Die Hamiltionfunktion des Ferromagneten bei $B = 0$ ist symmetrisch in den Spins, d.h. eine Änderung des Vorzeichens aller Spins ändert die Energie nicht. Trotzdem wird im ferromagnetischen Zustand irgendeine Spinrichtung bevorzugt, man spricht deshalb von einer *Symmetriebrechung*. Wenn man die Magnetisierung nach Gl. 2.7 direkt ausrechnet, ergibt sich aber aufgrund der Symmetrie des Hamiltonians der Wert Null. Man muß deshalb die Symmetrie künstlich brechen. Man kann dazu z.B. ein kleines Feld $B > 0$ annehmen und nach der Spurbildung den Grenzwert $B \to 0$ bilden. Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Spurbildung auf den Teil des Phasenraums zu beschränken, in dem eine positive Magnetisierung vorherrscht.

Bei der Simulation eines endlichen Systems zeigt sich die Symmetrie darin, daß die Magnetisierung von Zeit zu Zeit ihr Vorzeichen wechselt (im unendlichen System ist die Wahrscheinlichkeit dafür Null). Man mittelt deshalb den Betrag der Magnetisierung.

Das in dieser Arbeit dargestellte Verfahren kennt diese Probleme nicht: Bei der Berechnung des Grundzustandes entscheidet es sich per Zufall für einen der möglichen Zustände (siehe Abschnitt 3.2). Die Symmetrie wird automatisch gebrochen.

2.2 Antiferromagnetismus

Ein schematisches Phasendiagramm von Antiferromagneten ist in Abb. 2.1 dargestellt [Domb74]. Unterhalb der *Néel*–Temperatur T_N und der kritischen Feldstärke B_c übertrifft die antiferromagnetische Ordnung die Tendenz zur Unordnung bzw. zur Ausrichtung der Spins nach dem Magnetfeld. Für niedrige Temperaturen, also insbesondere bei $T = 0$, ist der Übergang AF$\to$PM von 1. Ordnung, sonst von 2. Ordnung [Usadel90].

Die sich ausbildende antiferromagnetische Ordnung hängt von der Gitterstruktur ab. Bei einem einfach–kubischen Gitter stehen die Spins auf den Gitterplätzen abwechselnd „hoch“ bzw. „runter“. Alle Nachbarn eines jeden Spins sind gerade andersherum orientiert. Man kann also das Gitter in zwei ineinandergestellte einfach–kubische Untergitter mit doppelt so großer Gitterkonstanten zerlegen, so daß die Spins in einem Untergitter alle gleich orientiert sind.

Der geeignete Ordnungsparameter für den Antiferromagneten ist die folgende Funktion (*staggered magnetization*):

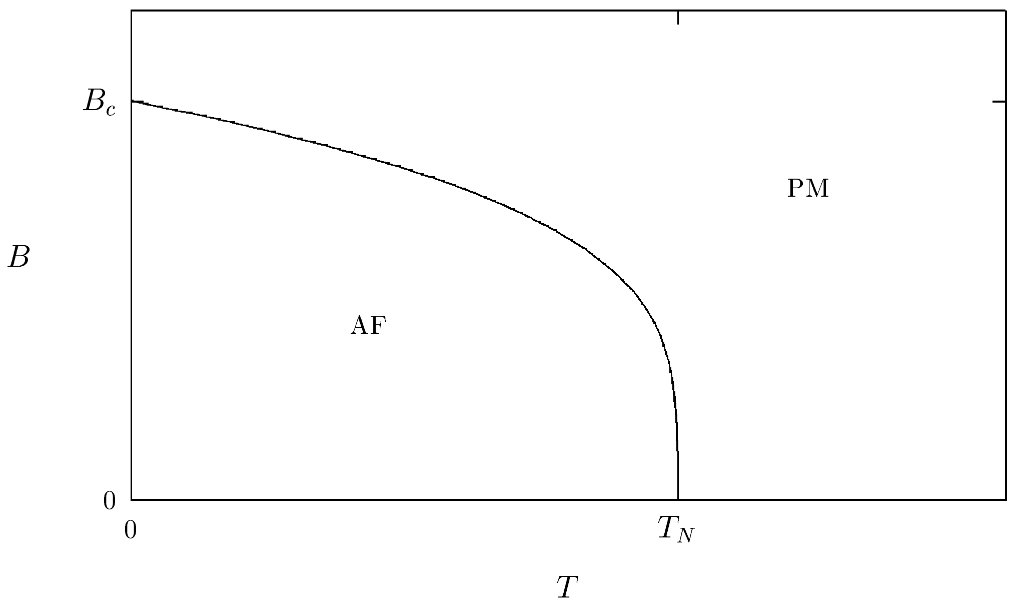

Abbildung 2.1: *schematisches B–T Phasendiagramm eines Antiferromagneten (AF), die paramagnetische Phase ist mit PM bezeichnet* [*Domb74*]

$$a(\vec{Q}) := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_i} \tag{2.9}$$

Dabei ist $\vec{r}_i$ der Ort des Gitterplatzes i. Der Vektor $\vec{Q}$ hängt vom Gittertyp ab. Bei einfach–kubischen Gittern wird $\vec{Q} = \pi(1,1,1)$ (in Einheiten des Kehrwertes der Gitterkonstanten) verwendet. Auf diese Weise ist $a := a(\pi,\pi,\pi)$ einfach die Differenz der Magnetisierungen der beiden Untergitter. Bei vollständiger antiferromagnetischer Ordnung ist somit a maximal. Wenn alle Spins in Richtung des Magnetfeldes orientiert sind, gilt $a = 0$.
Beispiele für AF Substanzen sind die Oxide der meisten 3d–Übergangsmetalle, z.B. MnO, FeO, CoO. Ein geeignetes Meßverfahren zur Untersuchung dieser Stoffe ist die *Neutronenstreuung*. Aus den so ermittelten Streuamplituden lassen sich die Fouriertransformierten der Suszeptibilität berechnen.

2.3 Ungeordnete Systeme

In der Natur sind perfekte Einkristalle äußerst selten. Das vorherrschende Phänomen ist *Unordnung*. Diese Unordnung kann z.B. in Form von Fehlstellen, Versetzungen im Gitter oder durch Legierungen auftreten. Viele Eigenschaften von Festkörpern ergeben sich erst aus der Unordung, wie z.B. mechanische Eigenschaften von Metallen. Auch ungeordnete magnetische Systeme zeigen ein

wesentlich anderes Verhalten als geordnete Systeme.
Um ungeordnete magnetische Systeme zu beschreiben gibt es verschiedene Ansätze:

- Bei *Spingläsern* sind Vorzeichen und ggf. Größe der Kopplung J_{ij} durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt. Es handelt sich also um *random–bond*–Modelle.

- Bei *verdünnten Systemen* wird jeder Gitterplatz mit einer Wahrscheinlichkeit p freigelassen, d.h. auf ihm sitzt kein Spin. Man spricht von *random–site*–Modellen. Das in dieser Arbeit diskuierte Modell des verdünnten Antiferromagneten gehört zu dieser Gruppe.

- Bei *Zufallsfeldsystemen* (random field) liegt kein homogenes Feld vor. Das Feld B_i am Gitterplatz i gehorcht einer Wahrscheinlichkeitsverteilung.

In ungeordneten Systemen treten somit zwei Arten von Mittelwerten auf: Einmal das normale thermodynamische Mittel (mit $\langle \ldots \rangle$ bezeichnet) und dann eine Mittelung über die Verteilung, die die Unordnung beschreibt. Ein System mit bestimmten ausgelosten Zufallsparametern wird im folgenden als *Konfiguration* bezeichnet. Die Mittelung über die Unordnung, d.h. über verschiedene Konfigurationen wird mit $[\ldots]_{\text{Index}}$ bezeichnet. Dabei ist Index $= p$ für verdünnte Systeme, Index $= J$ für Spingläser und Index $= B$ für Zufallsfeldsysteme.
Für eine fest vorgegebene Konfiguration, z.B. von Bindungen $\{J_{ij}\}$ im Fall von Spingläsern, ergibt sich eine bestimmte Zustandssumme

$$Z(\{J_{ij}\}) = \mathrm{Sp}_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H(\{\sigma_i\}, \{J_{ij}\})) \tag{2.10}$$

Annahme: Man mittelt die Zustandssumme über die Unordnung:

$$Z = [Z(\{J_{ij}\})]_J = \mathrm{Sp}_{\{\sigma_i\},\{J_{ij}\}} P(\{J_{ij}\}) \exp(-\beta H(\{\sigma_i\}, \{J_{ij}\})) \tag{2.11}$$

Dabei ist $P(\{J_{ij}\})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auftreten der Bond–Konfiguration $\{J_{ij}\}$. Diesen Ausdruck kann man auch in Form einer normalen Zustandssumme mit der Hamiltonfunktion $H_a := \ln(P) + H$ schreiben:

$$Z = \mathrm{Sp} \exp(-\beta H_a) \tag{2.12}$$

Die Spur ist dabei eine Summation über alle möglichen Werte von $\{\sigma_i\}$ und $\{J_{ij}\}$. Auf diese Weise wird aber ein System mit dem Hamiltonian H_a beschrieben, in dem die Spins mit Kopplungsstärken wechselwirken. Man nennt solch ein System *annealed*.
Bei den hier interessierenden Systemen sind die Bindungen zwar zufällig aber fest (*quenched*). Man darf deshalb nur extensive Variablen über die Konfigurationen mitteln. Da sich diese als Ableitungen der Gibbschen freien Energie G darstellen lassen, wird das Unordnungsmittel über G ausgeführt.

$$G := [G(\{J_{ij}\})]_J := -\beta[\ln(Z(\{J_{ij}\})]_J \tag{2.13}$$

Diese Art der Mittelung wird *quenched average* genannt. Für die meisten Systeme ist diese Summe allerdings nicht mehr analytisch berechenbar. Der sog. *Replika–Trick* hilft in einigen Fällen. Aus der Beziehung

$$\ln(Z) = \lim_{n \to 0} \frac{Z^n - 1}{n} \tag{2.14}$$

liest man ab: Man berechnet einfach die Zustandsumme für ein Gesamtsystem aus n identische Systemen (n natürliche Zahl), ermittelt daraus die gesuchten Größen und läßt dann n gegen 0 gehen. Obwohl dieser Grenzübergang mathematisch fragwürdig ist, scheint das Verfahren in der Praxis zu funktionieren.

2.3.1 Spingläser

Eine ausführliche Darstellung der Theorie der Spingläser findet sich in [Fische91]. In [Mezard87] sind die wichtigsten Artikel zu diesem Thema gesammelt.
Spingläser können durch die Ising–Hamiltonfunktion in Gl. 2.4 beschrieben werden. Die Werte für die Kopplungskonstanten sind zufällig.
Beim *Edwards–Anderson–* (EA–) Modell [Edward75] hängt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die J_{ij} vom Abstand der Spins im Gitter ab. Im einfachsten Fall wird nur die Nächste–Nachbar Wechselwirkung betrachtet. Gebräuchliche Formen von Verteilungen sind dabei die um 0 zentrierte Normalverteilung

$$P(J_{ij}) = (2\pi\Delta)^{-1/2} \exp(-J_{ij}^2/2\Delta) \tag{2.15}$$

und die $\pm J$–Verteilung:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(J_{ij} - J) + \frac{1}{2}\delta(J_{ij} + J) \tag{2.16}$$

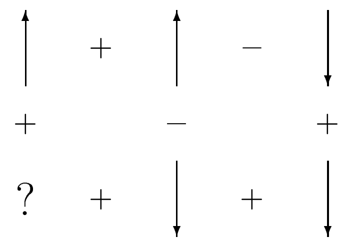

Abbildung 2.2: *Auschnitt aus einem Spinglas. Der Spin links unten ist frustriert.*

Mittels Abb. 2.2 werden nun einige Begriffe definiert. Dargestellt ist ein Ausschnitt aus einem zweidimensionalen Spinglas. Die Kopplungskonstanten haben

die Werte $\pm J$, dargestellt durch + bzw. −. Positive Kopplungskonstanten favorisieren parallele Spinstellung, bei negativer Kopplung ist die antiparallele Ausrichtung energetisch günstiger. Eine Bindung nennt man *gesättigt*, wenn ihre zugehörigen Spins die energetisch günstigere Stellung annehmen, ansonsten sagt man, die Bindung ist *gebrochen*. Ein Spin ist *frustriert*, wenn er bei jeder Ausrichtung Bindungen brechen muß, und zwar so, daß die daraus resultierenden Energieverluste gleich sind. In Abb. 2.2 ist der Spin links unten frustriert. Richtet er sich nach „oben" aus, bricht er die Bindung zu seinem linken Nachbarn, im umgekehrten Fall die Bindung zu seinem oberen Nachbarn.
Mittels Computersimulationen konnte gezeigt werden [Bhatt85], daß unterhalb einer kritischen Temperatur T_c bei fehlendem äußeren Feld eine stabile Spinglasphase existiert. Diese Phase ist dadurch gekennzeichnet, daß die Spins „einfrieren", d.h. jeder Spin hat eine Vorzugsrichtung. Das zeigt sich darin, daß der sog. *Edwards–Anderson–Ordnungsparameter*

$$q_{EA} = [\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle^2]_J \tag{2.17}$$

von 0 verschieden ist. Bei Existenz eines äußeren Feldes B verschwindet q_{EA} allerdings auch für andere Phasen nicht. Deshalb wird als Ordnungsparameter für Spingläser oft eine Funktion verwendet. Diese Funktion wird schrittweise wie folgt definiert (zurückgehend auf [Parisi80]): Sind $\{\sigma_i^\alpha\}$ und $\{\sigma_i^\beta\}$ zwei Systeme mit gleicher Konfiguration der Kopplungskonstanten (sog. *Replikas*), so ist der *Überlapp* $q^{\alpha\beta}$ zwischen ihnen wie folgt definiert:

$$q^{\alpha\beta} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i^\alpha\rangle\langle\sigma_i^\beta\rangle \tag{2.18}$$

Somit haben identische Spinkonfigurationen einen Überlapp von 1, während man für Spinkonfigurationen, die sich in allen Spins unterscheiden $q^{\alpha\beta} = -1$ erhält.
Der Ordnungsparameter ist nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Überlapps gemittelt über die Konfigurationen. Die zugehörige Dichtefunktion wird mit $P_J(q)$ bezeichnet.
Eine exakte Berechnung von $P_J(q)$ ist im Rahmen des *Sherrington–Kirkpatrick–* (SK–) Modells möglich [Sherri75]. Dieses Modell zeichnet sich durch eine normalverteilte Wechselwirkung mit unendlicher Reichweite aus, d.h. die Wahrscheinlichkeitsverteilung (2.15) gilt für alle Paare i, j (mit $\Delta = J^2/N$). Auf diese Weise ist es nicht mehr möglich, dem System eine Dimension zuzuordnen. Die Lösung dieses Modell erfolgt mit Hilfe des Replika–Tricks ($T > T_c$) bzw. mittels der Molekularfeldnäherung.
Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Überlapps wurde für das SK–Modell in [Parisi80] berechnet (im Grenzfall des unendlichen Systems).

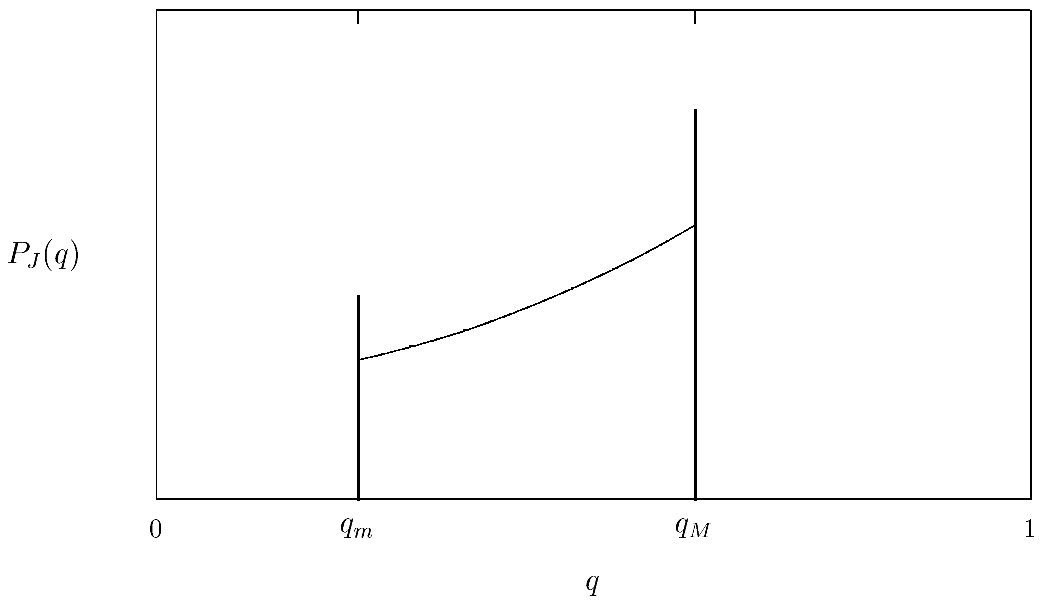

Abbildung 2.3: *Dichtefunktion der Überlappverteilung beim SK–Modell, $T = 0$, $B \neq 0$ (unterhalb der kritischen Feldstärke). Abb. aus* [*Mezard87*]

Das Verhalten der Funktion $P_J(q)$ für $T = 0$ im Magnetfeld unterhalb einer kritischen Feldstärke B_c ist in Abb. 2.3 [Mezard87] wiedergegeben. Die Dichtefunktion hat folgende Form :

$$P_J(q) = x_m \delta(q - q_m) + x_M \delta(q - q_M) + \tilde{P}_J(q) \tag{2.19}$$

Der Überlapp zwischen zwei Zuständen nimmt mit einer Wahrscheinlichkeit x_M den maximalen Wert q_M und mit einer Wahrscheinlichkeit x_m den minimalen Wert q_m an. Mit einer Wahrscheinlichkeit $1 - x_m - x_M$ liegt der Wert für q im Bereich $[q_m, q_M]$. Der Abstand zwischen den δ–Peaks skaliert mit dem Abstand von B zur kritischen Feldstärke. Oberhalb von B_c fallen die Deltafunktionen zu einer zusammen. Für $B \to 0$ gilt $q_m \to 0$ und $x_m \to 0$ (Abb. 2.4). Für nicht zu große $T > 0$ zeigt $P_J(q)$ ein ähnliches Verhalten unterhalb von $B_c = B_c(T)$.
Das sich so ergebende Phasendiagramm des SK–Modells ist in Abb. 2.5 dargestellt. Für niedrige Temperaturen und niedrige Magnetfelder gibt es eine Spinglasphase. Dort existieren mehrere stabile Zustände, die durch sehr hohe Energiebarrieren getrennt sind (im unendlichen System sind die Energiebarrieren unendlich hoch). Für hohe Felder bzw. hohe Temperaturen zerstört die Ausrichtung der Spins nach dem Feld bzw. deren Wärmebewegung den geordneten Zustand. Die Form der Phasengrenze wurden analytisch in [Almeid78] berechnet. Sie wird im allgemeinen als *AT–Linie* bezeichnet. In der Nähe von $T_c = J/k_B$ gilt näherungsweise:

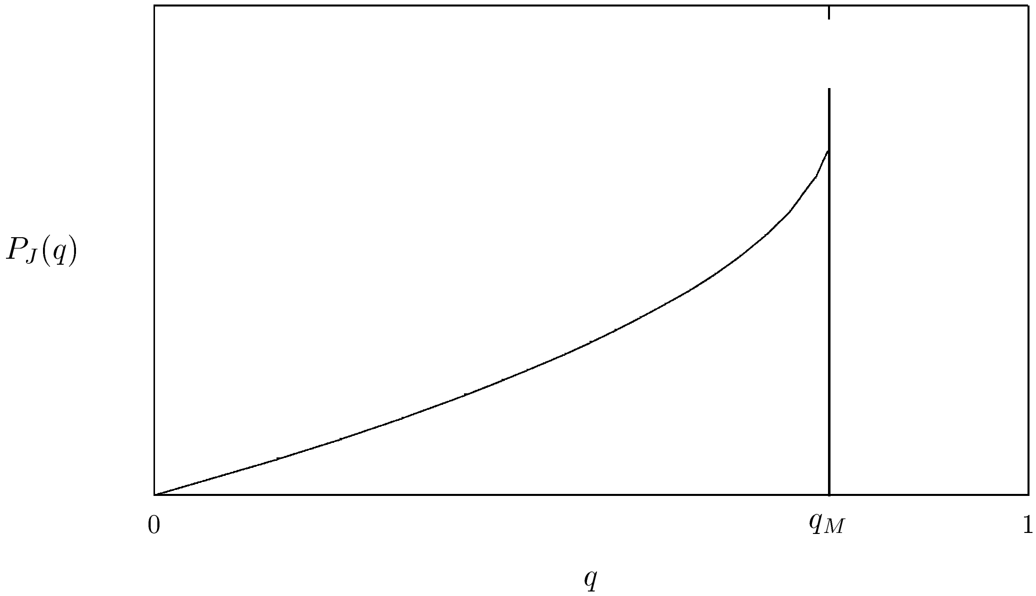

Abbildung 2.4: *Dichtefunktion der Überlappverteilung beim SK–Modell, $T = 0$, $B = 0$, Abb. aus [Mezard87]*

$$B_c \sim (T_c - T)^{3/2} \tag{2.20}$$

Für niedrige Temperaturen gilt

$$B_c \sim \sqrt{-\ln(T/T_c)} \tag{2.21}$$

Beispiele für Systeme, die Spinglas–Verhalten zeigen, sind AuFe (wenige Prozent Fe) [Coles78], oder $Eu_xSr_{1-x}S$ [Malett79], beide Quellen zitiert nach [Fische91].

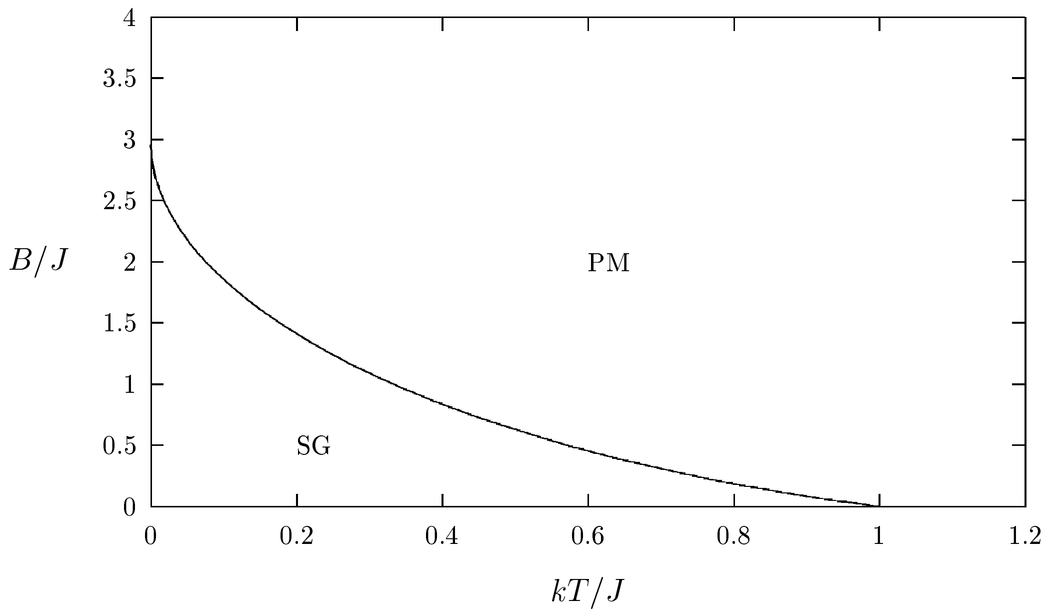

Abbildung 2.5: *schematisches B–T Phasendiagramm des SK–Modells, die paramagnetische Phase ist mit PM bezeichnet, die Spinglasphase mit SG*

2.3.2 Verdünnte Antiferromagnete

Die Hamiltonfunktion der in dieser Arbeit untersuchten verdünnten Antiferromagnete (DAFF = **d**iluted **a**nti**f**erromagnet in a **f**ield) erhält man, wenn man in der Ising–Hamiltonfunktion Gl. 2.4 $J_{ij} := -J_B\epsilon_i\epsilon_j$ wählt:

$$H = J_B \sum_{\langle i,j\rangle} \epsilon_i\epsilon_j\sigma_i\sigma_j - B\sum_i \epsilon_i\sigma_i \tag{2.22}$$

Die Spins befinden sich auf einem einfach–kubischen Gitter und wechselwirken mit ihren nächsten Nachbarn. Die Schreibweise $\langle i,j\rangle$ bedeutet, daß über alle Paare von Nachbarn summiert wird. Die Verdünnung wird dadurch erreicht, daß jeder Gitterplatz mit der Wahrscheinlichkeit p nicht von einem Spin besetzt wird, in diesem Fall ist $\epsilon_i = 0$, sonst gilt $\epsilon_i = 1$. Die Verteilung der Löcher beeinflußt die Spinwechselwirkung entscheidend. Eine AF Fernordnung kann sich z.B. nur ausbilden, wenn ein durchgehender (sog. *perkolierender*) Cluster von Spins existiert. Das ist im unendlichen dreidimensionalen System für $p < (1-p_c) = 0.69$ der Fall.
Auch im DAFF können Frustrationen auftreten. Aufgrund des kubischen Gitters entsteht eine solche Situation aber nur im Zusammenspiel mit dem äußeren Feld.

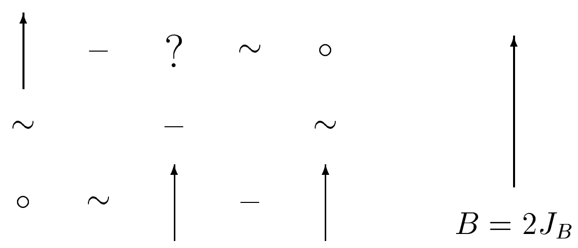

Abbildung 2.6: *Auschnitt aus einem DAFF. Der Spin in der Mitte oben ist frustriert.*

In Abb. 2.6 werden Löcher im Gitter durch $\circ$ und nicht–vorhandene Bindungen durch $\sim$ dargestellt. Wenn der Spin oben Mitte sich in Richtung des B–Feldes aussrichtet (Energiegewinn $-B = -2J_B$), sind die Bindungen zu seinen Nachbarn gebrochen (Energieverlust $2J_B$). Bei antiparaller Stellung zum Feld verhält es sich genau umgekehrt.
Mittels Monte Carlo–Simulation wurde in [Nowak92] (Kurzfassung in [Usadel92]) ein Phasendiagramm des DAFF ermittelt. Dazu wurde für verschiedene Magnetfelder, ausgehend vom antiferromagnetisch geordneten Zustand, das System von tiefen Temperaturen an aufgeheizt und anschließend wieder abgekühlt.
In Abb. 2.7 ist der Verlauf der Magnetisierung über der Temperatur eines $61 \times 61 \times 60$–Systems (helische bzw. zyklische Randbedingungen) mit Verdünnung

Abbildung 2.7: *Magnetisierung des DAFF ($p = 0.5$) als Funktion der Temperatur für Heizen und anschließendes Kühlen in Magnetfeldern $B/J_B = 0.5$, 1.0, 1.5 (von unten). Monte Carlo–Simulation aus* [*Nowak92*]

$p = 0.5$ gezeigt. Die Magnetisierung spaltet bei einer Temperatur $T_{irr}(B)$ auf. Oberhalb von T_{irr} treten somit keine Hystereseeffekte auf. Diese Temperatur ist allerding nicht eindeutig festgelegt, sondern hängt von den verwendeten Kühl– und Heizraten ab. Weiterhin wird mit $T_c(B)$ die Temperatur bezeichnet, an der die Steigung der Magnetisierung während des Heizens maximal wird. Für höhere Magnetfelder als $B/J_B = 1.3$ liegt dieser Punkt bei der kleinsten verwendeten Temperatur.
In Abb. 2.8 ist das aus den Magnetisierungskurven gewonnene B–T Phasendiagramm dargestellt. Dabei wurde der Punkt $B_c(T = 0)$ als das Feld bestimmt, bei dem für die innere Energie kein Unterschied zwischen der Heiz– und der Kühlphase festgestellt wurde. Das Diagramm unterteilt sich in drei Bereiche: Oberhalb von $B_{irr}(T)$, wo keine Hystereseeffekte mehr auftreten, reagiert der DAFF paramagnetisch (PM). Unterhalb von $B_c(T)$ liegt eine antiferromagnetische (AFM) Fernordnung vor. In dem mit SG bezeichneten Zustand exisitieren mehrere antiferromagnetische Domänen. Dieser Zustand wird im folgenden als *Domänenzustand* bezeichnet.
Um die Natur des Domänenzustandes zu ergründen, betrachtete [Nowak92] die funktionale Abängigkeit von $B_{irr}(T)$. Es ergab sich für niedrige Temperaturen ($k_BT/J_B < 1$):

$$B_{irr} = a(T_{eq0} - T)^{\Theta/2} \tag{2.23}$$

mit den Werten $k_BT_{eq0}/J_B = 2.01$ und $\Phi = 3.27 \pm 0.05$. Die Form dieser Linie ähnelt somit der AT–Linie bei Spingläsern in der Nähe der Übergangstemperatur. Der Autor deutete das Auftreten dieser Linie bei niedrigen Temperaturen

Abbildung 2.8: *B–T Phasendiagramm des DAFF($p = 0.5$) aus Monte Carlo–-Simulation (hier $k_B := J_B := 1$) [Nowak92]*

als Anzeichen für Spinglas–artige Eigenschaften des Domänenzustandes.

Um diesen Zustand genauer zu charakterisieren wurden in [Staats93] die Verteilung der Überlapps mittels Computersimulation für verschiedene Temperaturen bei $B/J_B = 1.9$ ermittelt ($41 \times 41 \times 40$-System, $p = 0.5$). Dabei wurden aber nicht wie in Gl. 2.18 die Überlapps mittels Magnetisierungswerten $\langle \sigma_i \rangle$, sondern direkt mit Spinstellungen σ_i berechnet. In Abb. 2.9 sind die Verteilungen für $k_B T/J_B = 2.25$, 1.5, 1.0 und 0.01 dargestellt. . Im Domänenzustand bei $T \approx 0$ zeigt die Verteilung zwar eine gewisse Breite (Höhe der Verteilung: 25) ähnelt aber keineswegs den Verteilungen, wie man sie bei Spingläsern unterhalb der AT–Linie erhält. Die Lage der Verteilung auf der q–Achse ist insbesondere für höhere Temperaturen nicht charakteristisch für den Zustand des Systems. Sie spiegelt den Einfluß der thermischen Fluktuationen wieder, da der Überlapp nicht mittels der Magnetisierungswerte ermittelt wurde.

Weiterhin von Interesse ist, ob im Domänenzustand eine langreichweitige AF Ordnung existiert. Mit Hilfes des sog. *Imry–Ma–Argumentes* [Imry75] kann man qualitativ dimensionsabhängige Aussagen über die Stabilität von Domänen im Grundzustand machen. Man geht dabei von der Annahme aus, daß eine Domäne einen typischen mittleren Radius R hat, d.h. daß die Geometrie der Domäne euklidisch ist. Aufgrund der statistischen Verteilung der Löcher kommt es auf einem der AF Untergitter zu einem Überschuß von Spins. Dieser Überschuß skaliert mit der Wurzel des Volumens. Somit ergibt sich ein magnetisches Moment M_D, das wie folgt mit R skaliert: $M_D \sim R^{d/2}$ (d: Dimension). Dieses Moment wechselwirkt mit dem äußeren Feld B und führt zu einer entsprechenden Energieabsenkung. Die gebrochenen Bindungen in der Oberfläche der Domäne führen aber zu einer Energieerhöhung E_D, die wie die Fläche der Domänenwand, al-

Abbildung 2.9: *Verteilung der Überlapps des DAFF($p = 0.5$) aus Monte Carlo–Simulation (hier $k_B := J_B := 1$, $B/J_B = 1.9$) [Staats93]*

so mit $E_D \sim R^{d-1}$ skaliert. Insgesamt ergibt die Existenz der Domäne eine Energieänderung um:

$$\Delta E \approx J_B R^{d-1} - B R^{d/2} \tag{2.24}$$

Demnach müßte für $d = 3$ die AF Fernordnung stabil sein (für nicht zu große Felder). In [Nowak92] konnte aber gezeigt werden, daß die Struktur der Cluster fraktal ist, und zwar in der Weise, daß die Exponenten für das magnetische Moment und die Oberfächenenergie gleich sind. Somit kann man über die Existenz der Fernordnung im unendlichen System keine Aussage machen.

In Experimenten wird die Verdünnung dadurch erreicht, daß in antiferromagnetischen Kristallen ein Teil der magnetischen Ionen statistisch durch unmagnetische Stoffe ersetzt wird. In [Monten91] wurden z.B. für $Fe_xZn_{1-x}F_2$ mit $x = 0.31$ entsprechende Untersuchungen wie bei den oben geschilderten Simulationen durchgeführt: Das System wurde erst ohne Magnetfeld abgekühlt, um in den AF geordneten Zustand zu gelangen. Dann wurde der Kristall bei eingeschaltetem Feld erwärmt und anschließend wieder abgekühlt. Die Magnetisierung wurde mittels Faraday–Rotation gemessen. Es ergaben sich Kurven wie in Abb. 2.7 und somit ein Phasendiagramm wie in Abb. 2.8. Auch hier ergab sich an der SG–PM Grenze ein der AT–Linie ähnliches Verhalten (mit $\Phi = 3.4$)

2.3.3 Zufallsfeldsysteme

Die Eigenschaften von Zufallsfeldsystemen werden in [Natter89] dargestellt. Solche Systeme werden durch folgende Hamilton–Funktion beschrieben (**r***andom* **f***ield* **i***sing* **m***odell* = RFIM):

$$H = -\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i=1}^{N}(B + B_i)\sigma_i \tag{2.25}$$

Auch hier beschränkt man sich im allgemeinen auf kurzreichweitige Wechselwirkungen mit gitterplatzunabhängiger Kopplungsstärke. Das Magnetfeld an einem Gitterplatz i setzt sich aus dem homogenen äußeren Magnetfeld B und dem lokalen Zufallsfeld B_i zusammen. Gebräuchliche Zufallsfeldverteilungen sind die Normalverteilung

$$P(B_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta}\exp(-B_i^2/2\Delta^2) \tag{2.26}$$

und die $\pm\Delta$–Verteilung

$$P(B_i) = \frac{1}{2}\delta(B_i - \Delta) + \frac{1}{2}\delta(B_i + \Delta) \tag{2.27}$$

Abbildung 2.10: *Δ–T Phasendiagramme von RFIM, links: normalverteiltes Feld, rechts: diskrete $\pm\Delta$–Verteilung (hier $J_{ij} := 1$, $k_B = 1$)* [*Grest86*]

In [Grest86] wurden ferromagnetische Zufallsfeldsysteme mit den beiden angegebenen Verteilungstypen mittels Monte Carlo–Simulation und mit Molekularfeldnäherung untersucht. In Abb. 2.10 sind die Phasendiagramme in der Δ–T Ebene ($B = 0$) abgebildet. Es ergeben sich Ähnlichkeiten zu dem in Abb. 2.8

wiedergegebenen B–T Phasendiagramm des DAFF. In [Ogiels86] wird dagegen mittels exakter Berechnung von Grundzuständen keine Anzeichen für einen Domänenzustand (bei normalverteilten Feld) gefunden.
Mittels analytischer Berechnungen wurden DAFF und RFIM in [Fishma79] und [Cardy84] untersucht. Dort ergab sich, daß beide System hinsichtlich des kritischen Verhaltens in niedrigen äußeren Felder übereinstimmen. Auch dort entsprach das äußere Feld des DAFF der Breite der Feldverteilung beim RFIM.

2.4 Finite Size Scaling

Im folgenden sei F der führende nicht–analytische Anteil des zur Beschreibung des Systems geeigneten thermodynamischen Potentials (z.B. der Gibbschen freien Energie), welcher für die Divergenz der Suszeptibilität des Ordnungsparameters am Phasenübergang verantwortlich ist.
In dieser Arbeit wird der Phasenübergang $T = 0$, $B = B_c$ betrachtet. Dazu wird definiert:

$$b := \frac{B - B_c}{B_c} \tag{2.28}$$

Es wird angenommen [Amit78], daß in der Nähe eines Phasenübergangs die Funktion F *homogen* ist, d.h. daß es Exponenten x_1, x_2 gibt, so daß gilt:

$$aF(b,T) = F(a^{x_1}b, a^{x_2}T) \quad \forall a > 0 \tag{2.29}$$

Insbesondere gilt für $a = |b|^{-1/x_1}$ bei $T = 0$ mit $f^{\pm}(0) := F(\pm 1, 0)$:

$$F(b, T = 0) = |b|^{1/x_1} f^{\pm}(0) \tag{2.30}$$

Die Magnetisierung erhält man durch Differenzieren nach B. Für geeignet gewähltes $g^{\pm}(0)$ ergibt sich:

$$m(b) := -\frac{\partial F(b,0)}{\partial B} = |b|^{1/x_1 - 1} g^{\pm}(0) \tag{2.31}$$

Der *kritische Exponent* $\bar{\beta}$ sei definiert durch:

$$\bar{\beta} := 1/x_1 - 1 \tag{2.32}$$

Somit gilt $m \sim |b|^{\bar{\beta}}$ in der Nähe des Phasenübergangs.
Für die Suszeptibilität ergibt sich somit bei geeignet gewähltem $h^{\pm}(0)$:

$$\chi(b) = |b|^{1/x_1 - 2} h^{\pm}(0) \tag{2.33}$$

Der Exponent $\bar{\gamma}$ wird definiert als:

$$\bar{\gamma} := 2 - 1/x_1 \tag{2.34}$$

Ein wichtige Größe ist die charakteristische Länge l_c. Sie beschreibt die Ausdehnung im Gitter, über die die wesentlichen Informationen der (Un–) Ordnung erhalten bleiben. Das kritische Verhalten dieser Länge wird durch den Exponenten $\bar{\nu}$ bestimmt:

$$l_c \sim |b|^{-\bar{\nu}} \tag{2.35}$$

Man kann zeigen, daß $\bar{\nu} = 1/x_1$ gilt. Somit ergibt sich mit Gl. 2.34:

$$\bar{\gamma} + \bar{\nu} = 2 \tag{2.36}$$

Bei den in dieser Arbeit betrachteten Systemen handelt es sich um endliche Systeme, d.h. die Suszeptibilität divergiert nicht, sondern zeigt ein Maximum beim Phasenübergang. Die sog. *Skalenhypothese* besagt: Die thermodynamischen Größen des endlichen Systems werden durch das Verhältnis Systemgröße L zur charakteristischen Länge l_c bestimmt, d.h. vom Verhältnis $L/l_c \sim L|b|^{\bar{\nu}} = (L^{1/\bar{\nu}}|b|)^{\bar{\nu}}$. Somit gilt mit einer geeigneten Funktion g:

$$\chi(b, L) = |b|^{-\bar{\gamma}} g(L^{1/\bar{\nu}} b) \tag{2.37}$$

Da die Suszeptibilität des endlichen System nicht divergiert, muß sich das singuläre Verhalten von $\chi(b, L)$ herauskürzen, d.h. es muß $g(y) \sim y^{\bar{\gamma}}$ gelten. Somit ist

$$\chi(b = 0, L) = |b|^{-\bar{\gamma}} (L^{1/\bar{\nu}} b)^{\bar{\gamma}} \sim L^{\bar{\gamma}/\bar{\nu}} \tag{2.38}$$

Man erhält also die richtigen Skalenformeln, wenn man das $|b|$ durch $L^{-1/\bar{\nu}}$ ersetzt und eine andere Funktion f verwendet [Usadel91]. Es ergibt sich die *finite size scaling*–Relation:

$$\chi(b, L) = L^{\bar{\gamma}/\bar{\nu}} f(L^{1/\bar{\nu}} b) \tag{2.39}$$

Das kritische Feld $B_c(L)$ für das endliche System ist dadurch bestimmt, daß $\chi(b, L)$ an der Stelle $b = B_c(L) - B_c$ sein Maximum annimmt. Aus Gl. 2.39 folgt dann, daß die Funkion f unabhängig von L bei $L^{1/\bar{\nu}}(B_c(L) - B_c)$ maximal wird. Damit ergibt sich:

$$B_c(L) - B_c \sim L^{-1/\bar{\nu}} \tag{2.40}$$

Mittels der Beziehungen Gl. 2.39 und 2.40 kann man die kritischen Parameter des unendlichen Systems bestimmen, indem man die Suszeptibilitäten $\chi(B, L)$ für mehrere Systemgrößen L ermittelt. Der Exponent $\bar{\nu}$ muß so gewählt werden, daß sich in der Auftragung $B_c(L)$ gegen $L^{-1/\bar{\nu}}$ eine Gerade ergibt. Das kritische Feld B_c des unendlichen Systems ist der y–Achsenabschitt dieser Geraden. Der Exponent $\bar{\gamma}$ ergibt sich schließlich aus der Forderung, daß die Werte $\chi L^{-\bar{\gamma}/\bar{\nu}}$ aufgetragen gegen $L^{1/\bar{\nu}}(B - B_c)$ auf einer Kurve liegen sollen.

2.5 Einführung in die Graphentheorie

Ein *gerichteter Graph* $G = (V, E)$ besteht aus einer Menge V von *Knoten* und einer Menge $E \subset V \times V$ von *Kanten*. Bildlich läßt sich ein Graph wie folgt darstellen: Für jeden Knoten wird ein Kreis gezeichnet. Eine Kante $e = (i, j)$ wird in Form eines Pfeils vom Knoten i zum Knoten j repräsentiert.
Für eine Kante $e = (i, j)$ heißt i *Vorgänger* von j und j *Nachfolger* von i. Knoten, die durch Kanten verbunden sind, heißen benachbart.
Ein *Pfad* ist eine Folge $i_1, \dots, i_n$ von Knoten, so daß $(i_k, i_{k+1}) \in E$ für $k = 1, \dots, n-1$ gilt. Falls von Knoten i zu Knoten j ein Pfad existiert, so sagt man, j ist von i aus *erreichbar*. Manchmal nennt man auch die Folge der Kanten (i_k, i_{k+1}) $(k = 1, \dots, n-1)$ einen Pfad. Ein *Zyklus* ist ein Pfad, für den $i_1 = i_n$ gilt. Die Folge $i_1, \dots, i_n$ heißt *Knotenfolge*, wenn für $k = 1, \dots, n-1$ $(i_k, i_{k+1}) \in E$ oder $(i_{k+1}, i_k) \in E$ gilt. Eine Knotenfolge ist somit eine Art Pfad, bei dem die Kanten irgendwie orientiert sein können. Die Kantenmenge, welche die Knotenfolge verbinden, heißt *Kantenfolge*.
Ein *Schnitt* des Graphen zwischen zwei Knoten i_Q und i_S ist eine Aufteilung der Knotenmenge V in zwei Mengen S, $\overline{S}$ $(V = S \cup \overline{S})$, welche disjunkt sind $(S \cap \overline{S} = \emptyset)$ und für die gilt: $i_Q \in S$ und $i_S \in \overline{S}$. Entfernt man die Kanten (i, j) mit $i \in S$ und $j \in \overline{S}$ aus G, so ist i_S nicht mehr von i_Q aus erreichbar, der Graph ist in zwei Teile „zerschnitten".
Man kann den Kanten $e = (i, j)$ eines Graphen *Bewertungen*, d.h. reele Zahlen $c(i, j)$ zuweisen. Falls man mittels einer Kante den Transport einer Größe von einem Knoten zum nächsten ausdrückt, so ist die *Kapazität* der Kante eine Bewertung.[2] Anschaulich kann man z.B. einen Graphen als System von Bewässerungskanälen betrachten. Die Zahlen $c(i, j) \geq 0$ geben dann an, wieviel Liter pro Sekunde maximal durch einen Kanal fließen kann.
Die Kapazität eines Pfades ist das Minimum der Kapazitäten der Kanten des Pfades.
Als *Kapazität eines Schnittes* $c(S, \overline{S})$ bezeichnet man die Summe der Kapazitäten der Kanten, welche von S nach $\overline{S}$ führen:

$$c(S, \overline{S}) = \sum_{i \in S, j \in \overline{S}} c(i, j) \tag{2.41}$$

Wieviel tatsächlich durch eine Kante $e = (i, j)$ fließt, gibt der *Fluß* $f(i, j) \geq 0$ an. Ein System von Flüssen von einem als *Quelle* bezeichnetem Knoten i_Q zu einer Senke i_S, welches den Gesamtfluß v von i_Q nach i_S transportiert, erfüllt definitionsgemäß folgende Bedingungen:

- Der Fluß „entspringt" der Quelle:
  $\sum_j f(i_Q, j) - \sum_j f(j, i_Q) = v$.

[2] In diesem Fall kann man der Einfachheit halber $c(i, j) = 0$ für $(i, j) \in V \times V \setminus E$ annehmen.

- Der Fluß „verschwindet“ in der Senke:
  $\sum_j f(i_S, j) - \sum_j f(j, i_S) = -v$.

- In allen anderen Knoten bleibt der Fluß erhalten:
  $\sum_j f(j, i) - \sum_j f(i, j) = 0$ für alle $i \neq i_Q, i_S$.

- Kein Fluß kann die Kapazität überschreiten:
  $0 \leq f(i, j) \leq c(i, j)$ für alle $i, j \in V$.

- Allen nicht vorhandenen Kanten sowie Kanten, die von einem Knoten zu ihm selbst führen, wird der Fluß 0 zugeordnet:
  $f(i, j) = 0$ für $i = j$ oder $(i, j) \notin E$.

Eine Kante (i, j), für die $f(i, j) = c(i, j)$ gilt, nennt man *gesättigt*, sonst *ungesättigt*. Ein Pfad ist gesättigt, falls eine Kante des Pfades gesättigt ist.
Es gilt nun: Der maximale Fluß zwischen i_Q und i_S ist gleich der minimalen Kapazität aller Schnitte zwischen i_Q und i_S (Beweis siehe [Knödel69]). Ein Schnitt mit der minimalen Kapazität wird als *minimaler Schnitt* bezeichnet.
Im weiteren werden nur noch Graphen G betrachtet, die folgende Eigenschaften haben:

- G enthält keine Zyklen.

- Es existiert genau eine Quelle i_Q und genau eine Senke i_S.

- i_Q hat keine Vorgänger und i_S keine Nachfolger.

- Jeder Knoten $i \neq i_Q$ ist von i_Q aus erreichbar.

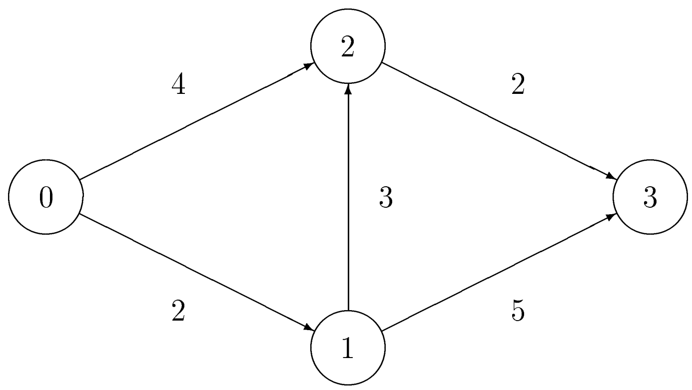

Abbildung 2.11: Ein Beispielgraph

Als Beispiel für die in diesem Abschnitt eingeführten Begriffe ist in Abbildung 2.11 ein Graph $G = (V, E)$ abgebildet. Es gilt

$$\begin{aligned} V &= \{0, 1, 2, 3\} \\ E &= \{(0, 1), (0, 2), (1, 2), (1, 3), (2, 3)\}. \end{aligned} \tag{2.42}$$

Knoten 3 ist Nachfolger von Knoten 2, Knoten 0 ist Vorgänger von Knoten 2. Knoten 3 ist von Knoten 0 aus erreichbar, z.B. über den Pfad 0,2,3. Der Graph enthält keine Zyklen.
Als Quelle wird $i_Q = 0$ und als Senke $i_S = 3$ ausgezeichnet. Die Kapazitäten der Kanten sind $c(0, 1) = 2$, $c(0, 2) = 4$, $c(1, 2) = 3$, $c(1, 3) = 5$, $c(2, 3) = 2$. Der maximale Fluß durch G hat den Wert 4. Der zugehörige Schnitt minimaler Kapazität ist $S = \{0, 2\}$ und $\overline{S} = \{1, 3\}$.

Kapitel 3

Darstellung der Algorithmen

Im folgenden werden die Verfahren erläutert, die benötigt werden, um die Grundzustände des DAFF zur ermitteln.

3.1 Äquivalenz der Grundzustandsenergie eines kubischen verdünnten AF zum maximalen Fluß durch einen Graphen

In diesem Kapitel wird gezeigt, wie man die Grundzustandsenergie eines kubischen Antiferromagneten (AF) gewinnen kann, indem man ihn in einen Graphen transformiert und dessen maximalen Fluß ausrechnet.
Dazu wird zuerst die Formel umgeschrieben, die die Kapazität eines Schnitts angibt [Picard75] und dann speziell für einen verdünnten AF angewendet.

3.1.1 Kapazität eines Schnitts

Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $n + 2$ Knoten und den Kapazitäten $c(i, j)$ $(i, j \in V)$. Im folgenden werden für die Knoten natürliche Zahlen verwendet: $V = \{0, 1, \ldots, n + 1\}$. Die Quelle des Graphen sei $k_Q = 0$ und die Senke $k_S = n + 1$. Im folgenden werden alle Kanten, die von k_Q ausgehen oder in k_S enden als *äußere* Kanten bezeichnet. Alle anderen Kanten heißen *innere* Kanten.
Die Kapazität eines Schnittes $(S, \overline{S})$ zwischen Knoten 0 und Knoten $n + 1$ ist nach Gl. 2.41:

$$c(S, \overline{S}) = \sum_{i \in S, j \in \overline{S}} c(i, j) \tag{3.1}$$

Jeder Schnitt zwischen 0 und $n+1$ kann gemäß [Hammer65] durch einen Vektor $(1, x_1, \ldots, x_n, 0)$ dargestellt werden, wobei gilt:

$$x_i = \begin{cases} 1 & \text{falls} \quad i \in S \\ 0 & \text{falls} \quad i \in \overline{S} \end{cases} \qquad (i = 1, \dots, n) \tag{3.2}$$

Wegen $x_i(1 - x_j) = 1$ gdw. $x_i = 1 \wedge x_j = 0$ gdw. $i \in S \wedge j \in \overline{S}$ gilt ($X = (x_1, \dots, x_n)$):

$$c(S, \overline{S}) = c(X) := \sum_{i,j=0}^{n+1} c(i,j) x_i (1 - x_j) \tag{3.3}$$

Durch Einsetzten von $x_0 = 1$ und $x_1 = 0$ ergibt sich (siehe Anhang B):

$$\begin{aligned} c(X) \quad = \quad & -\sum_{i,j=1}^{n} c(i,j) x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} [c(i, n+1) - c(0, i) + \sum_{j=1}^{n} c(i,j)] x_i + \\ & c(0, n+1) + \sum_{j=1}^{n} c(0, j) \end{aligned} \tag{3.4}$$

Wenn man nun eine beliebige Funktion der Form

$$F(X) = -\sum_{i,j=1}^{n} q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} p_i x_i + K \tag{3.5}$$

betrachtet ($x_i \in \{0, 1\}$ für $i \in \{1, \dots, n\}$), so gilt $c(X) = F(X) \; \forall X \in \{0, 1\}^n$ genau dann, wenn gilt:

$$c(i,j) + c(j,i) = q_{ij} + q_{ji} \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \tag{3.6}$$

$$c(i, n+1) - c(0, i) = p_i - \sum_{j=1}^{n} c(i,j) \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \tag{3.7}$$

$$c(0, n+1) = K - \sum_{j=1}^{n} c(0, j) \tag{3.8}$$

Somit ist die Berechnung des Minimums von $F(X)$ äquivalent zur Ermittlung des minimalen Schnitts von G, wenn die Kapazitäten den Bedingungen 3.6 bis 3.8 genügen.
Um den minimalen Schnitt auszurechnen, müssen aber alle Kapazitäten bis auf $c(0, n+1)$ nicht–negative Werte haben.[1]
Wenn man für Werte $q_{ij} \geq 0 \; i, j = 1, \dots, n$ die Kantenkapazitäten gemäß folgenden Regeln wählt, sind alle Kapazitäten bis auf $c(0, n+1)$ nicht negativ:

[1] Die Kante $(0, n+1)$ muß in jedem Schnitt, der die Knoten 0 und $n+1$ trennt, enthalten sein. Folglich kann man ihn vor Berechnung des minimalen Schnitts aus dem Graphen entfernen und später wieder hinzufügen. Wenn man die Kapazität des Schnitts berechnet, wird $c(0, n+1)$ einfach hinzuaddiert, auch wenn der Wert negativ ist.

- Setze $c(i,0)$, $c(n+1,i)$ und $c(i,i)$ auf 0 für alle $i = 0, 1, \ldots, n+1$.
- Für jedes Paar (i,j) mit $i < j$ $(i,j = 1, \ldots, n)$ setze einen der beiden Werte $c(i,j)$, $c(j,i)$ auf 0.
- Wähle die übrigbleibenden Kapazitäten so, daß sie nicht–negativ sind und die Bedingungen 3.6 bis 3.8 erfüllen.

3.1.2 Verdünnte AF–Ising Systeme

Die Hamiltonfunktion eines verdünnten Ising–Antiferromagneten mit lokalem Feld lautet

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_B \epsilon_i \epsilon_j \sigma_i \sigma_j - \sum_i B_i \epsilon_i \sigma_i. \tag{3.9}$$

Dabei ist $J_B > 0$ die Kopplungskonstante (nur Nächste–Nachbar–Wechselwirkung, hier nicht ortsabhänging) und B_i das Magnetfeld am Gitterplatz i. Die Magnetfelder B_i können beliebig sein. Ein Gitterplatz ist mit der Wahrscheinlichkeit $p \in [0,1]$ nicht besetzt ($\epsilon_i = 0$, sonst $\epsilon_i = 1$). Jeder Spin hat zwei Orientierungen zur Auswahl ($\sigma_i = \pm 1$).
Im folgenden werden 3–dimensionale einfach–kubische Gitter der Größe $l_x \times l_y \times l_z$ betrachtet. Die Gitterplätze werden von 1 bis n durchnummeriert. Der Gitterplatz an der Position (x,y,z) $(k \in [0, l_k - 1], k \in \{x,y,z\})$ hat dann die Nummer

$$i = 1 + x + y l_x + z l_x l_y. \tag{3.10}$$

Die Randbedingungen können periodisch oder fest sein.
Um die Hamiltonfunktion auf die Form der Gl. 3.5 zu bringen, welche den Bedingungen 3.6 bis 3.8 genügt, wird folgende Transformation durchgeführt:

$$\sigma_i = (2x_i - 1)t(i) \tag{3.11}$$

Dabei ist für den Gitterplatz $i \Leftrightarrow (x,y,z)$ definiert: $t(i) := (-1)^{x+y+z}$. Dieser Faktor sorgt dafür, daß die Kopplungen zwischen benachbarten Gitterplätzen negativ werden, da ($N(i)$ sei die Menge der nächsten Nachbarn von Gitterplatz i):

$$j \in N(i) \Rightarrow t(i)t(j) = -1 \quad \forall\, i,j \in \{1, \ldots, n\} \tag{3.12}$$

gilt. Der Faktor $2x_i - 1$ transformiert $\sigma_i = -1, 1$ nach $x_i = 0, 1$. Durch Einsetzen in die Hamiltonfunktion ergibt sich (siehe Anhang C, $J := J_B/2$, es gilt $\delta_{j \in N(i)} = 1$, falls $j \in N(i)$ und $= 0$ sonst):

$$
\begin{aligned}
H \;=\; & -\sum_{i,j=1}^{n} \underbrace{\left[4J\epsilon_i\epsilon_j\delta_{j\in N(i)}\right]}_{q_{ij}} x_i x_j \\
& + \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\epsilon_i[4J \sum_{j\in N(i)} \epsilon_j - 2B_i t(i)]}_{p_i} x_i \\
& \underbrace{-J\sum_{i,j=1}^{n} \epsilon_i\epsilon_j\delta_{j\in N(i)} + \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i B_i t(i)}_{K}
\end{aligned}
\tag{3.13}
$$

Um Zyklen im zum Gitter äquivalenten Graphen zu verhindern, werden nur dann Kapazitäten größer als 0 zugelassen, wenn für die Kante (i, j) die Bedingung $i < j$ erfüllt ist. Insgesamt ergibt sich:

- Setze $c(i, 0)$, $c(n + 1, i)$ und $c(i, i)$ auf 0 für alle $i = 0, 1, \ldots, n + 1$.
- Setze
$$
c(i,j) := \begin{cases} 8J\epsilon_i\epsilon_j & \text{falls} \quad j \in N(i) \wedge i < j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.14}
$$
für alle $i, j = 1, \ldots, n$.
- Für alle $i = 1, \ldots, n$:
setze $w(i) := \epsilon_i[4J \sum_{j\in N(i)} \epsilon_j - 2B_i t(i)] - \sum_{j\in N(i)} c(i, j)$. Falls $w(i) \geq 0$ setze $c(i, n + 1) := w(i)$ und $c(0, i) := 0$, sonst setze $c(i, n + 1) := 0$ und $c(0, i) := -w(i)$.
- Setze $c(0, n + 1) := -J \sum_{i,j=1}^{n} \epsilon_i\epsilon_j\delta_{j\in N(i)} + \sum_{i=1}^{n} B_i\epsilon_i t(i) - \sum_{j=1}^{n} c(0, j)$.

Die Berechnung eines minimalen Schnitts zwischen den Knoten 0 und $n + 1$ liefert den Vektor $X = (x_1, \ldots, x_n)$. Durch Einsetzen in H ergibt sich die Grundzustandsenergie, mittels der Transformation in Gl. 3.11 die zugehörige Spinkonfiguration.
Im Abschnitt 3.2 werden die Algorithmen geschildert, die benötigt werden, um einen minimalen Schnitt zu berechnen.

3.2 Berechnung des minimalen Schnitts

Zur Berechnung des minimalen Schnitts werden zwei Algorithmen benötigt: Der Algorithmus von Ford–Fulkerson [Ford56] ermittelt zu einem Graphen den Wert des maximalen Flusses zwischen zwei Knoten, d.h. die Kapazität eines minimalen Schnitts und ein System von dazugehörigen Flußwerten. Der zweite Algorithmus, welcher im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, berechnet per Zufall aus einem solchen System von Flußwerten einen *beliebigen* minimalen Schnitt. (Dabei wird der Ford–Fulkerson Algorithmus verwendet.)

3.2.1 Der Algorithmus von Ford–Fulkerson

Die folgende Darstellung des Algorithmus' von Ford und Fulkerson orientiert sich an [Claibo90]. Er ist aber speziell auf die in Abschnitt 3.1 dargestellten Graphen zugeschnitten. Gegeben sei ein Graph $G = (V, E)$ mit $V = \{0, \ldots, n+1\}$ und Kapazitätswerten $c(i,j) \geq 0$ $(i, j \in V)$. Gesucht ist der maximale Fluß vom Quellknoten 0 zur Senke $n+1$.
Idee des Verfahrens ist: Suche Pfade, auf denen der Fluß noch nicht die Kapazität erreicht hat und erhöhe den Fluß so weit wie möglich. Eventuell muß der Fluß von einem Teilpfad in einen anderen umgelenkt werden. Deshalb werden allgemeine Kantenfolgen betrachtet. Falls es keine weiteren Kantenfolgen dieser Art gibt, ist der Fluß maximal.
Es folgt nun der eigentliche Algorithmus. Daran schließt sich eine Erläuterung der einzelnen Schritte und ein Beispiel an.
Als Eingabewerte des Algorithmus' dienen die Knotenzahl n, die Kapazitäten $\{c(i,j)\}$ und ein System von Flüssen $\{f(i,j)\}$ (z.B. $f(i,j) = 0 \; \forall \, i, j \in E$). Im einzelnen sieht das Verfahren wie folgt aus:

Algorithmus ford–fulkerson$(n, \{c(i,j)\}, \{f(i,j)\})$

1. Versehe Knoten 0 mit der Marke $(-, -, \infty)$. Alle anderen Knoten haben keine Markierung.

2. Initialisiere die Kandidatenmenge:

$$K := \{(0,j) | f(0,j) < c(0,j) \wedge j \in \{1, \ldots, n\}\}$$

3. Falls $K = \emptyset$ gilt, gehe nach 11, sonst entnehme der Menge K eine Kante (i, j).

4. Falls (i, j) (a) oder (b) erfüllt, gehe nach 5, sonst nach 3.

   (a) Knoten i ist markiert mit (r_i, v_i, p_i), Knoten j nicht und $f(i,j) < c(i,j)$ (eine sog. *Vorwärtskante*).

   (b) Knoten j ist markiert mit (r_j, v_j, p_j), Knoten i nicht und $f(i,j) > 0$ (eine sog. *Rückwärtskante*).

5. Falls bei Schritt 4 eine Vorwärtskante gefunden wurde, markiere Knoten j mit der Marke (r_j, v_j, p_j), wobei $r_j = +$, $v_j = i$ und $p_j = \min(p_i, c(i,j) - f(i,j))$, andernfalls markiere Knoten i mit der Marke (r_i, v_i, p_i), wobei $r_i = -$, $v_i = j$ und $p_i = \min(p_j, f(i,j))$.

6. Im Falle der Vorwärtskante füge für alle nächsten Nachbarn $l \in N(i)$ die Kanten (l, i) und (i, l) zu K sowie die Kante $(i, n+1)$ hinzu, andernfalls die Kanten $(j, l), (l, j)$ für $l \in N(j)$ sowie $(j, n+1)$.

7. Falls nun Knoten $n+1$ noch nicht markiert ist, gehe zurück nach 3.

8. Setze $k := n+1$

9. Falls Knoten k mit $(+, v_k, p_k)$ markiert ist, erhöhe den Fluß in Kante (v_k, k) um den Wert p_{n+1}, andernfalls (Marke $(-, v_k, p_k)$) erniedrige den Fluß in Kante (k, v_k) um p_{n+1}.

10. Setze $k := v_k$. Falls $k \neq 0$ gehe nach 9, sonst nach 1.

11. Gebe maximalen Fluß $F := \sum_{i=1}^{n} f(0,i)$ als Ergebnis an.

Die Suche nach einer Kantenfolge startet immer bei der Quelle Knoten 0 (Schritt 1). Die Marken (r_i, v_i, p_i) haben folgende Bedeutung: v_i ist der Vorgänger in der Knotenfolge, r_i zeigt an, ob eine Kante von v_i nach i (Vorwärtskante) oder von i nach v_i (Rückwärtskante) geht. Der Wert p_i gibt an, um wieviel der Fluß durch den Graphen bis zum Knoten i (bei der betrachteten Knotenfolge) maximal erhöht werden kann.
In den Schritten 3 bis 7 wird durch immer neues Anlegen von Kanten versucht, vom Quellknoten 0 zum Senkenknoten $n+1$ zu gelangen. Dabei dürfen nur Kanten verwendet werden, deren Kapazitäten noch nicht erschöpft sind (bei Vorwärtskanten). Bei Rückwärtskanten genügt es, wenn überhaupt ein Fluß durch sie fließt, da sie rückwärts durchlaufen werden. Für diese Kanten wird später der Fluß reduziert, was einer „Umleitung“ des Flusses entspricht (siehe Beispiel).
Die Menge K enthält die Kanten, welche als Start– oder Zielknoten solche Knoten enthalten, die bereits markiert wurden. Auf diese Weise erspart man sich, bei der Suche nach einer weiteren geeigneten Kante (i,j) den gesamten Graphen zu durchsuchen, wie es in allgemeinen Graphen nötig ist, wo Verbindungen zwischen allen Knoten existieren können. Man beachte, daß in Schritt 6 alle theoretisch in Frage kommenden Kanten zu K hinzugefügt werden, auch solche, deren Kapazitäten 0 sind, deren Anfangs– und Endknoten bereits markiert sind oder die bereits betrachtet wurden. Das hat aber keine Auswirkungen, da im Schritt 4 diese Überprüfungen ohnehin vorgenommen werden.
In den Schritten 8 bis 10 wird schließlich der Fluß durch den Graphen erhöht, indem eine Knotenfolge vom Senkenknoten $n+1$ her rückwärts bis zur Quelle 0 durchlaufen wird.
Die Arbeitsweise des Algorithmus wird nun an dem Beispielgraph erläutert, welcher schon im Abschnitt 2.5 vorgestellt wurde.[2] An den Kanten des Graphen stehen die Zahlenpaare $(c(i,j), f(i,j))$. Anfänglich seien alle Flußwerte gleich 0. Es wird angenommen, daß im ersten Durchgang die Kanten $(0,1)$, $(1,2)$, $(2,3)$ betrachtet werden, welche alle drei Vorwärtskanten sind. Dabei treten die Markierungen $(-,-,\infty)$, $(+,0,2)$, $(+,1,2)$ und $(+,2,2)$ an den 4 Knoten

[2] Dieser Graph wurde der Einfachheit halber nicht aus einem Gitter gewonnen.

$0, 1, 2, 3$ auf. Somit wird der Fluß durch den Graphen um den Wert 2 erhöht. Es ergibt sich das in Abbildung 3.1 dargestellte Flußsystem. Die betrachtete Kantenfolge ist hervorgehoben.

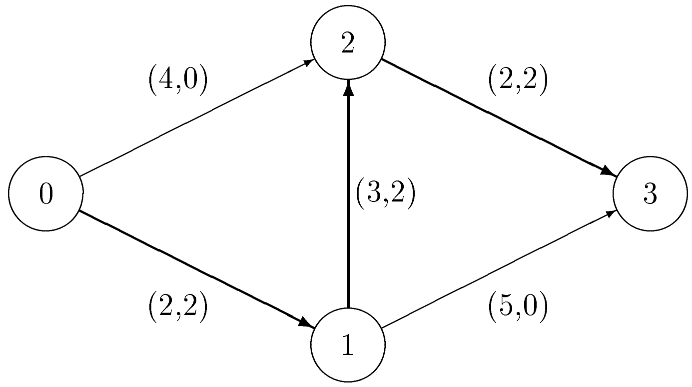

Abbildung 3.1: Situation nach einem Durchgang

Die einzige Kantenfolge, die nun noch betrachtet werden kann ist $(0, 2)$, $(1, 2)$ und $(1, 3)$. Dabei tritt die Rückwärtskante $(1, 2)$ auf. Die Knotenmarkierungen sind $(-, -, \infty)$, $(+, 0, 4)$, $(-, 2, 2)$ und $(+, 1, 2)$. Nach Erhöhung des Flusses ergibt sich die in Abbildung 3.2 dargestellte Situation.

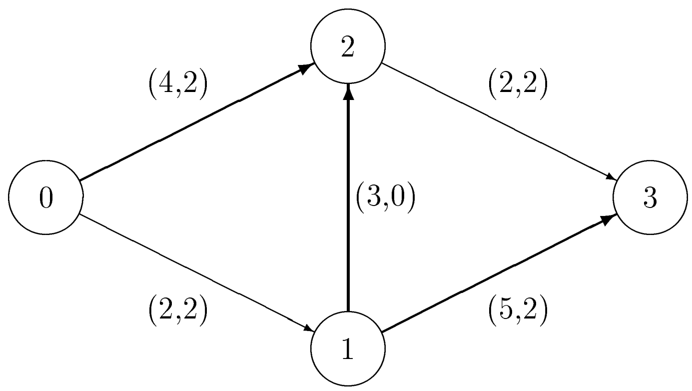

Abbildung 3.2: Situation nach dem zweiten Durchgang

Nun läßt sich keine Kantenfolge von 0 nach 3 finden, mittels derer sich der Gesamtfluß erhöhen läßt, der Algorithmus stoppt. Man hätte die gleiche Situtaion erhalten, wenn man zuerst die Kantenfolge $(0, 2)$,$(2, 3)$ und im zweiten Schritt die Kantenfolge $(0, 1)$, $(1, 3)$ betrachtet hätte. Man kann also sagen: Durch die Verminderung des Flusses in Rückwärtskanten werden früher ungeschickt gewählte Kantenfolgen neutralisiert.

Anmerkung zur Auswahl der Kanten aus K (Schritt 3): Für die Berechnung des maximalen Flusses ist es nicht relevant, welche Kanten zu welchem Zeitpunkt gewählt werden.[3] Im folgenden Abschnitt wird der Algorithmus aber dazu verwendet die zugehörigen minimalen Schnitte auszurechnen. Da bei den Grundzuständen der AF Systeme Entartungen, d.h. mehrere äquivalente Schnitte auftreten können, werden die Kanten ausgelost, wobei jede Kante aus K die gleiche Wahrscheinlichkeit $(= 1/|K|)$ hat. Auf diese Weise kann man bei der Berechnung eines Grundzustandes jede mögliche Spinkonfiguration erhalten.

3.2.2 Berechnung eines beliebigen minimalen Schnitts

Ausgangspunkt für die Berechnung eines beliebigen minimalen Schnitts ist das Ergebnis des Ford–Fulkerson Algorithmus, also ein Graph mit Kapazitäten und ein Flußsystem mit maximalem Fluß.
Falls man nur einen minimalen Schnitt erhalten möchte, so ist das sehr einfach: Setze $S := \{i \in V | i$ ist erreichbar von 0 durch einen Pfad, dessen Kanten alle ungesättigt sind $\}$ und $\overline{S} := V \setminus S$. Gemäß [Knödel69] ist $(S, \overline{S})$ ein minimaler Schnitt.
Falls man aber theoretisch alle minimalen Schnitte, welche sich aus einem Flußsystem ergeben können, oder jeden von ihnen mit einer nicht–verschwindenden Wahrscheinlichkeit erhalten möchte, so funktioniert das Verfahren nicht, wie ein einfaches Beispiel zeigt (siehe Abb. 3.3).

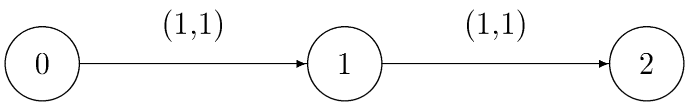

Abbildung 3.3: Graph mit 2 minimalen Schnitten

Offenbar sind hier die minimalen Schnitte $(\{0\}, \{1, 2\})$ und $(\{0, 1\}, \{2\})$ möglich. Das angegeben Verfahren liefert aber nur den ersten Schnitt.
Wenn man zu einem allgemeinen Schnitt gelangen will, muß man beachten: Nur gesättigte Kanten (i, j) dürfen aus dem Graphen entfernt werden, um ihn zu zerschneiden (d.h. $i \in S, j \in \overline{S}$), da der maximale Fluß gleich der Kapazität des minimalen Schnitts ist.
Daß nicht alle gesättigten Kanten herausgeschnitten werden müssen, zeigt schon das Beispiel in Abb. 3.3. Als weiteres Problem ergibt sich, daß es auch gesättigte Kanten geben kann, die in keinem minimalen Schnitt von S nach $\overline{S}$ führen können. Die Kante $(1, 4)$ in Abbildung 3.4 ist zwar gesättigt, aber sie trennt

[3] Außer für die Geschwindigkeit des Verfahrens.

nicht S und $\overline{S}$: Falls man sie entfernt, kann der Fluß über die Knoten 2 und 3 „umgeleitet“ werden.

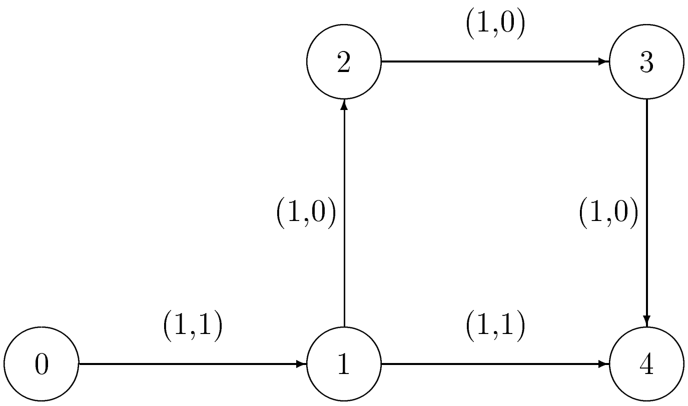

Abbildung 3.4: Graph mit „Umleitung“

Es kommen somit nur solche gesättigten Kanten in Frage, für die eine Neuberechnung des maximalen Flusses — nach ihrer Entfernung aus dem Graphen — einen um die Kapazität der Kante verringerten Flußwert ergibt. Diese Überlegungen führen zu folgendem einfachen Verfahren, welches bei gegebener Größe des Graphen und den zugehörigen Kapazitäten einen zufällig ausgelosten minimalen Schnitt liefert.

Algorithmus schnitt1$(n, \{c(i,j)\})$

1. Setze $f(i,j) = 0$ für alle $i, j = 1, \dots, n$.
2. F_{alt} := ford–fulkerson$(n, \{c(i,j)\}, \{f(i,j)\})$.
3. Initialisiere $K := \{(i,j) | f(i,j) = c(i,j) > 0, i, j \in \{1, \dots, n\}\}$.
4. Falls $F_{alt} = 0$ gehe nach 12, sonst:
5. Entferne eine zufällig gewählte Kante $(k,l) \in K$. Falls $f(k,l) < c(k,l)$ wiederhole Schritt 5.
6. Rette die Flußparameter: $f'(i,j) := f(i,j)$ für alle $i, j = 1, \dots, n$.
7. Setze $f(i,j)$=0 für alle $i, j = 1, \dots, n$.
8. Rette die Kantenkapazität ($c' := c(k,l)$) und entferne die Kante ($c(k,l) :=$ 0)
9. F_{neu} := ford–fulkerson$(n, \{c(i,j)\}, \{f(i,j)\})$.

10. Falls $F_{neu}+c' > F_{alt}$, restauriere den alten Zustand: $F_{neu} := F_{alt}$, $c(k,l) := c'$ und $f(i,j) := f'(i,j)$ für alle $i,j = 1,\ldots,n$.

11. Setze $F_{alt} := F_{neu}$ und gehe nach 4.

12. Setze $S := \{i|i \text{ erreichbar von Knoten } 0\}$ und $\overline{S} := V \setminus S$. Der minimale Schnitt ist $(S,\overline{S})$.

Dieser Algorithmus hat den Nachteil, daß in Schritt 6 bis 9 nach dem Entfernen einer Kante der maximale Fluß immer völlig neu berechnet werden muß.
Der Algorithmus wird schneller, wenn man statt dessen den Fluß, der durch die Kante (k,l) führt, aus dem Flußsystem „entfernt" und den Ford–Fulkerson Algorithmus auf das so gewonnene System von Flüssen anwendet. Da auf jedem Pfad von der Quelle 0 zur Senke $n+1$ genau eine Kante liegt, die entfernt werden muß, um den Graphen zu zerschneiden, können alle anderen gesättigten Kanten, die zusammen mit (k,l) auf Pfaden von 0 nach $n+1$ liegen, nicht mehr zum minimalen Schnitt beitragen (d.h. von S nach $\overline{S}$ führen). Man „fächert" deshalb den zu „entfernenden" Fluß möglichst weit auf. Auf diese Weise sind alle Vorgänger– und Nachfolgerkanten in Pfaden von 0 nach $n+1$, die (k,l) enthalten, nicht mehr gesättigt und werden später bei Schritt 5 aussortiert.
Da die betrachteten Graphen nur Kanten (i,j) mit $i < j$ enthalten, läßt sich das „Entfernen" des Flusses durch (k,l) in einem linearen Durchlauf durch den Graphen erzielen. Der lineare Durchlauf gliedert sich in zwei Teile: Vorgänger von k und Nachfolger von l. Im folgenden bezeichne $rv(i)$ den Fluß, der „vor" Knoten i, und $rn(i)$ der Fluß, der „nach" Knoten i entfernt werden muß.
Der Algorithmus "schnitt2" ergibt sich aus "schnitt1", indem Schritt 7 durch einen Aufruf des folgenden Algorithmus' ersetzt wird.

Algorithmus entferne$(n, \{f(i,j)\}, (k,l))$

1. Setze $rv(i) := 0$ und $rn(i) := 0$ für $i = 0,\ldots,n+1$.

2. Setze $rv(k) := f(k,l)$ und $rn(l) := f(k,l)$ sowie $f(k,l) := 0$.

3. Für $i = k,\ldots,1$ führe Schritt 4 bis 6 durch:

4. Verteile den Betrag $rv(i)$ gleichmäßig auf alle Vorgänger j von i, so daß die Anteile $a(j)$ unter $f(j,i)$ liegen: $a(j) := rv(i)f(j,i)/\sum_j f(j,i)$ für alle $j \in V$ mit $(j,i) \in E$.

5. Vermindere $f(j,i)$ um diese Anteile: $f(j,i) := f(j,i) - a(j)$ für alle $j \in V$ mit $(j,i) \in E$.

6. Erhöhe $rv(j)$ um diese Anteile: $rv(j) := rv(j) + a(j)$ für alle $j \in V$ mit $(j,i) \in E$.

7. Für $i = l, \ldots, n$ führe Schritt 8 bis 10 durch:

8. Verteile den Betrag $rn(i)$ gleichmäßig auf alle Nachfolger j von i, so daß die Anteile $a(j)$ unter $f(i,j)$ liegen: $a(j) := rn(i)f(i,j)/\sum_m f(i,m)$ für alle $j \in V$ mit $(i,j) \in E$.

9. Vermindere $f(i,j)$ um diese Anteile: $f(i,j) := f(i,j) - a(j)$ für alle $j \in V$ mit $(i,j) \in E$.

10. Erhöhe $rn(j)$ um diese Anteile: $rn(j) := rn(j) + a(j)$ für alle $j \in V$ mit $(i,j) \in E$.

Als Beispiel für die Funktionsweise des Algorithmus' „entferne“ ist in Abbildung 3.5 ein Ausschnitt eines Graphen dargestellt, aus dem der Fluß durch die Kante $(9,10)$ entfernt werden soll. [4]

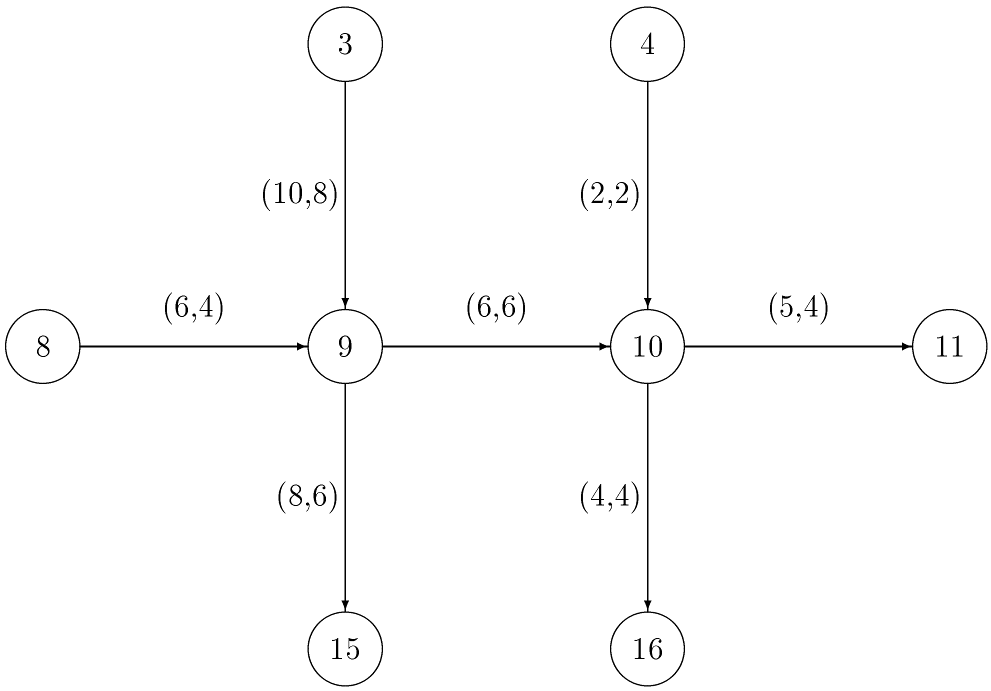

Abbildung 3.5: Graph vor der Herausnahme von $f(9,10)$

Es muß nun ein Fluß der Größe 6, welcher in den Knoten 9 hinein fließt und ein Fluß gleicher Größe, der aus Knoten 10 herausfließt, aus dem Graphen entfernt werden. Dieser zu subtrahierende Fluß wird anteilsmäßig den Vorgängern 3,8

[4] Auch dieser Graph kann nicht aus einem AF Ising–System entstehen, er dient lediglich der Anschauung.

bzw. von den Nachfolgern 11,16 weggenommen. Die Vorgänger von 3,8 und die Nachfolger von 11,16 werden genauso behandelt (hier nicht dargestellt). Nach der Herausnahme ergibt sich die in Abbildung 3.6 dargestellte Situation.

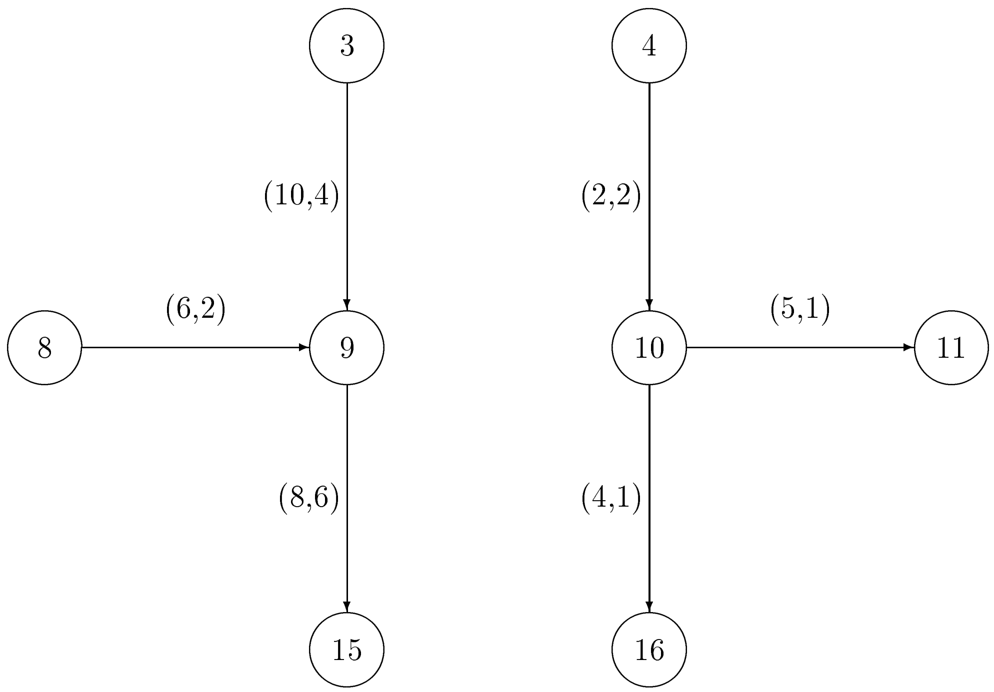

Abbildung 3.6: Graph nach der Herausnahme von $f(9,10)$

3.3 Geschwindigkeit des Verfahrens

Im folgenden werden die Zeitkomplextitäten des Ford–Fulkerson Algorithmus' und des Verfahrens zur Berechnung eines beliebigen minimalen Schnitts dargestellt. Dabei werden die Algorithmen auf verdünnte Ising–Systeme verschiedener Dimensionen angewendet. Weitherin wird die Geschwindigkeit der Verfahren in Abhängigkeit der Parameter Magnetfeld und Lochwahrscheinlichkeit untersucht.

3.3.1 Zeitkomplexität des Ford–Fulkerson Algorithmus'

Die *Zeitkomplexität* beschreibt, wie sich die Ausführungszeit t eines Algorithmus' *asymptotisch* in Abhängigkeit eines typischen Größenparameters g verhält. Man sagt „die Ausführungszeit ist von der Ordnung $f(g)$" (geschrieben $t \in O(f(g))$), wenn gilt:

$$\exists c > 0 : \quad t(g) < cf(g) + c \quad \forall g \tag{3.15}$$

Für alle hier betrachteten Algorithmen wird als Größenparameter g die Anzahl der Gitterplätze n verwendet.
Die Ausführungszeit des Ford–Fulkerson Verfahrens läßt sich nur schwer abschätzen. Das verdeutlicht folgendes Beispiel. Betrachtet wird der in Abb. 3.7 dargestellte Graph. Die Kapazitäten der „äußeren“ Kanten sind jeweils 10^6, die Kapazität der Kante $(1, 2)$ ist 1. Der Fluß durch alle Kanten ist zu Beginn gleich Null.

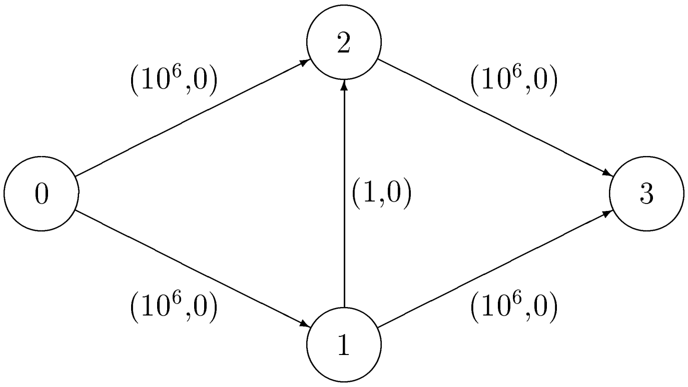

Abbildung 3.7: Beispielgraph mit leerem Fluß

Nach dem ersten Durchgang des FF–Algorithmus' könnte sich die Situation ergeben, die in Abb. 3.8 dargestellt ist. Der Fluß wurde entlang der Kanten $(0, 1)$, $(1, 2)$ und $(2, 3)$ erhöht.

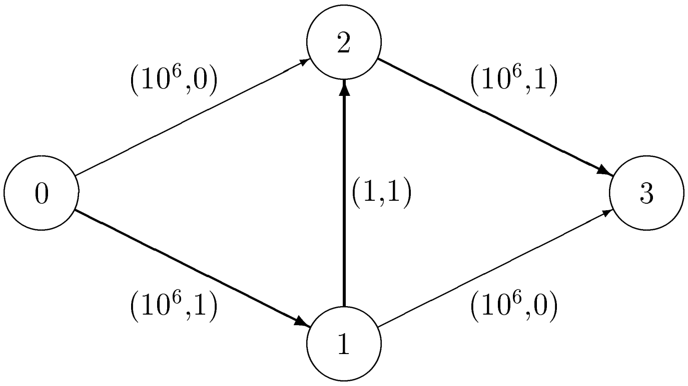

Abbildung 3.8: Beispielgraph nach einem Durchgang

Nach dem nächsten Durchgang entsteht die Situation in Abb. 3.9. Der Gesamtfluß durch den Graphen beträgt nun 2.

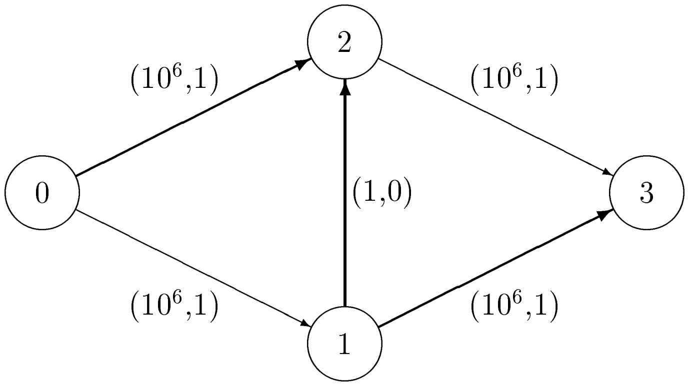

Abbildung 3.9: Beispielgraph nach zwei Durchgängen

Wenn nun der Algorithmus weiterhin die ungeschickte Wahl der Kantenfolgen verwendet, werden ingesamt $2 * 10^6$ Durchgänge benötigt, um den maximalen Fluß durch den Graphen zu ermitteln.
Bei der hier verwendeten Variante des Ford–Fulkerson–Algorithmus' erfolgt die Wahl der Kantenfolgen per Zufall. Es ist somit sehr unwahrscheinlich, daß in dem Beispiel immerfort eine ungünstige Kantenfolge gewählt wird. Sobald einmal der Fluß entlang der Pfade $0, 1, 3$ und $0, 2, 3$ erhöht wird, terminiert das Verfahren.
Um doch Aussagen über die Komplextität des Verfahrens zu erhalten, wurde der Zeitbedarf für die Berechnung von Grundzustandsenergien der DAFFs experimentell ermittelt.
In Abbildung 3.10 ist der mittlere Zeitbedarf für zwei–, drei– und vierdimensionale Systeme in Abhängigkeit der Systemgröße doppellogarithmisch aufgetragen. Die Zeitmittelwerte wurden jeweils aus 200 Werten gewonnen, für die die Löcherverteilung immer neu ausgelost wurde. Um die Ergebnisse für die verschiedenen Gitterdimensionen vergleichen zu können, wurde in allen drei Fällen eine Verdünnung von $p = 0.3$ bei einem Magnetfeld von $B/J_B = 2.05$ verwendet. Alle Berechnungen wurden auf einer IBM–Workstation RS/4000 Modell 580 durchgeführt. Die Algorithmen wurden in der Sprache C unter dem Betriebssystem AIX implementiert. Beim Übersetzen der Programme wurde die Compileroption $-O$ zur Optimierung verwendet. Die ermittelten Zeiten geben die reale CPU–Rechenzeit an, die nur für den Prozeß verwendet wurde. Die (hier sehr kleinen) Balken stellen jeweils die 95%–Vertrauensintervalle dar.
Alle Werte liegen für größere Systeme in etwa auf Geraden, wobei der Rechenzeitbedarf mit der Dimension, d.h. mit der Zahl der Nachbarn steigt. Es ergibt sich eine mittlere Zeitkomplexität von:

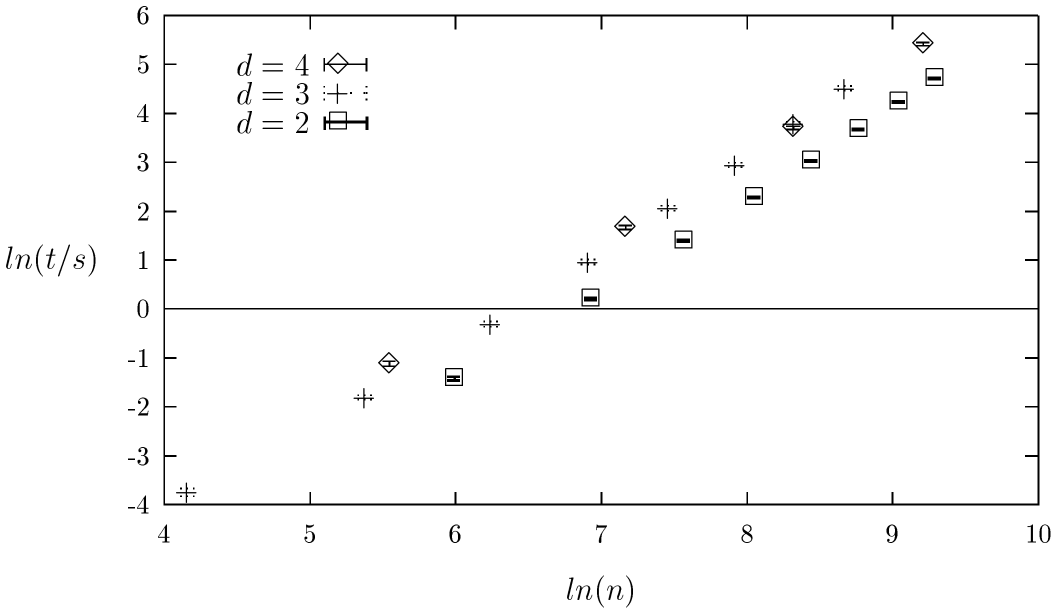

Abbildung 3.10: *Zeitbedarf des FF Algorithmus' für DAFF (p=0.3), $T = 0$, $B/J_B = 2.05$, $d = 2, 3, 4$, Gittergrößen $n = 4^3$ bis $n = 18^3$ (für $d = 2, 4$ entsprechend)*

$$\text{2–dim:} \quad t(n) \in O(n^{1.99\pm 0.01}) \tag{3.16}$$

$$\text{3–dim:} \quad t(n) \in O(n^{2.01\pm 0.04}) \tag{3.17}$$

$$\text{4–dim:} \quad t(n) \in O(n^{1.83\pm 0.1}) \tag{3.18}$$

Im wesentlichen hat das Verfahren also eine quadratische Zeitkomplexität, unabhängig von der Systemdimension. Abhängigkeiten von Magnetfeld und Lochkonzentration werden im Abschnitt 3.3.3 diskutiert.

3.3.2 Zeitkomplextität des Schnitt Algorithmus'

Da das Verfahren zur Berechnung von beliebigen Schnitten auf dem Ford–Fulkerson Algorithmus aufbaut, läßt sich sein Zeitbedarf ebenfalls nicht auf einfache Weise abschätzen. Deshalb wurde die Zeitkomplexität ebenfalls experimentell ermittelt. Die Ergebnisse für $2, 3$–dimensionale Systeme[5] sind in Abb. 3.11 doppellogarithmisch dargestellt. Es ergibt sich:

$$\text{2–dim:} \quad t(n) \in O(n^{2.08\pm 0.04}) \tag{3.19}$$

[5]Die Messungen für 4–dimensionale Systeme konnten wegen einiger Rechnerabstürze nicht mehr durchgeführt werden.

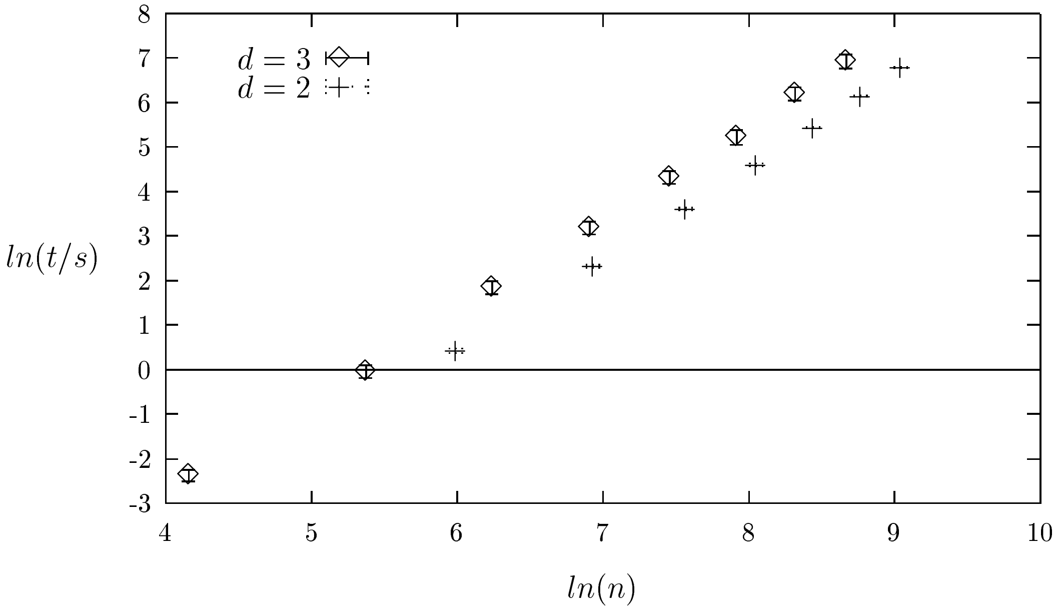

Abbildung 3.11: *Zeitbedarf des Algorithmus zur Berechnung von Grundzuständen, für DAFF (p=0.3), $T = 0$, $d = 2, 3$, $B/J_B = 2.05$, Gittergrößen $n = 4^3$ bis $n = 18^3$ (für $d = 2$ entsprechend)*

$$\text{3–dim:} \qquad t(n) \in O(n^{2.07\pm0.04}) \tag{3.20}$$

Der Zeitbedarf zur Berechnung eines beliebigen Grundzustandes wächst somit ebenfalls grob quadratisch mit der Systemgröße. Dabei wird etwa eine um den Faktor zehn größere Rechenzeit benötigt, als bei der Berechnung der Grundzustandsenergie.

3.3.3 Abhängigkeit von Parametern

Im folgenden soll untersucht werden, wie stark der Zeitbedarf der Berechnung der Grundzustandsenergie von den Parametern Lochkonzentration p und Magnetfeld B abhängt.
In Abb. 3.12 ist der Zeitbedarf des FF Algorithmus in Abhängigkeit der Lochkonzentration für DAFF–Systeme ($n = 6^3$) gemittelt aus je 50 Berechnungen dargestellt. Erwartungsgemäß sinkt die Ausführungszeit mit der Lochkonzentration, da die Anzahl der Spins und somit die Anzahl der Kanten im Graphen abnimmt. Die Abbnahme ist dabei zunächst stärker als linear, da für jede innere Kante zwei benachbarte besetzte Gitterplätze benötigt werden. Pro Loch fehlen dann bis zu 7 Kanten im Graphen. Für größere Lochkonzentrationen sind die besetzten Gitterplätz zumeist voneinander isoliert, so daß zu jedem dieser Gitterplätze i nur noch eine Kante $((0, i)$ oder $(i, n + 1))$ gehört.
Die Abhängigkeit des Zeitbedarfs von der Stärke des Magnetfeldes ist in Abb.

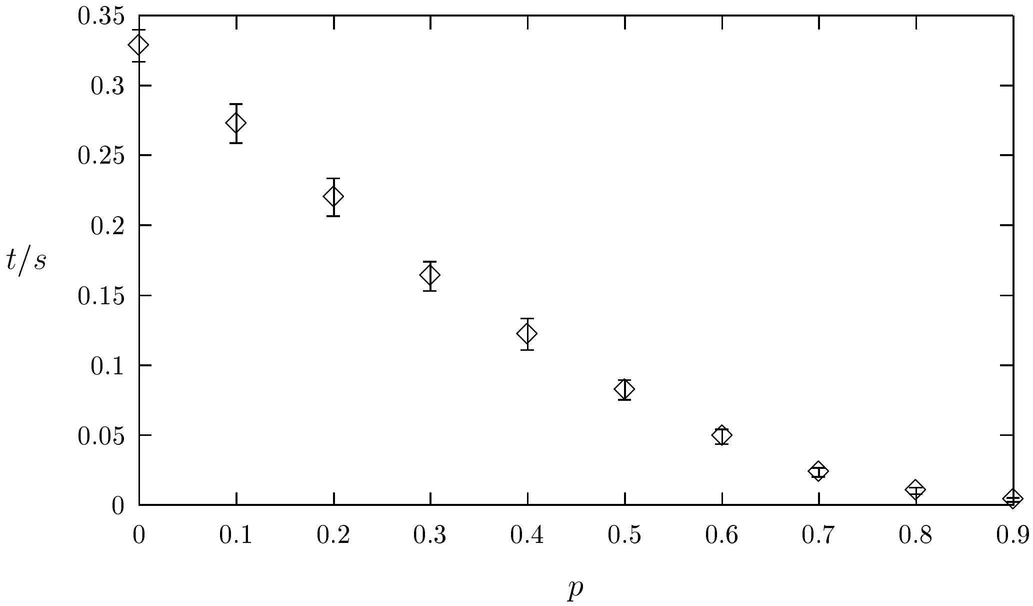

Abbildung 3.12: *Zeitbedarf des FF Algorithmus' für verschiedene Lochkonzentrationen p, DAFF, $T = 0$, $B/J_B = 2.05$, $n = 6^3$*

3.13 dargestellt. Über den gesamten Bereich $B/J_B \in [0, 6]$ gesehen ändert sich der Zeitbedarf nur wenig.
Nur die Kapazität der äußeren Kanten $(0, i)$ bzw. $(i, n + 1)$ hängt vom Magnetfeld ab. Man könnte somit vermuten, daß die Laufzeit des Algorithmus auch davon abhängt, ob das Verhältnis von Kapazität der inneren zu äußeren Kanten ganzzahlig ist. Es wurden deshalb auch Magnetfelder wie z.B. $B/J_B = 2.05, 2.005$ und 2.0005 betrachtet. Der Zeitbedarf lag aber in allen Fällen im Rahmen der Werte von Abb. 3.13.

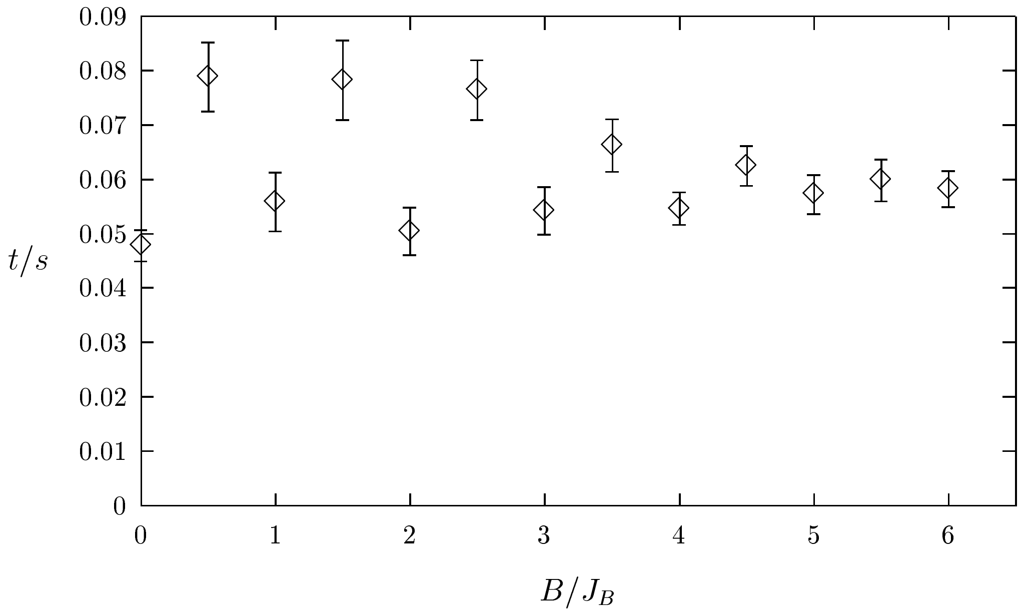

Abbildung 3.13: *Zeitbedarf des FF Algorithmus' für verschiedene Magnetfelder, DAFF(p=0.5),* $T = 0$, $n = 6^3$

Kapitel 4

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse vorgestellt, die mit dem Algorithmus zur Berechnung von Grundzuständen erzielt wurden.

Zum größten Teil wurden Grundzustände von verdünnten Antiferromagneten mit der Lochwahrscheinlichkeit $p = 0.5$ berechnet. Die Systeme waren einfach–kubisch mit zyklischen Randbedingungen in allen drei Raumrichtungen. Ihre Größe betrug 20^3, für Skalenberechnungen wurden auch Systeme der Größe 8^3, 12^3, 14^3 und 16^3 verwendet.

Die Mittelwerte wurden aus 50 bis 100 verschiedenen Konfigurationen gebildet, wobei für jede Konfiguration zwei Grundzustände berechnet wurden.[1] Diese Grundzustände wurden auf Festplatte abgespeichert und dann zur Berechnung aller Ergebnisse verwendet.

Um festzustellen, ob der Domänenzustand AF ferngeordnet ist, wurden L^3–Systeme mit Kantenlängen $L = 6, 8, \ldots, 14$ zusätzlich mit zwei Randschichten von Spins versehen. Über die Vorgabe der Stellungen dieser Randspins wurde in den Systemen eine Domänenwand erzwungen und die Oberfächenenergie dieser Wand berechnet. Dies wurde für Magnetfelder $B/J_B = 0.55, 1.05, \ldots, 5.05$ bei je dreihundert Konfigurationen durchgeführt.

Um den Entartungsgrad der Grundzustände zu untersuchen, wurden von 8^3–Systemen für verschiedene Magnetfelder jeweils 1000 Grundzustände zur selben Loch–Konfiguration berechnet.

Zum Vergleich des DAFF mit einem Zufallsfeldsystem wurden Grundzustände eines Antiferromagneten (16^3–Gitter) mit binominalverteiltem lokalen Feld für verschiedene äußere Magnetfelder jeweils 50 mal zwei Grundzustände ermittelt.

Falls Fehlerbalken angegeben sind, so geben sie das 95%–Vertrauensintervall an, d.h. den Bereich, in dem der tatsächliche Mittelwert mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.95 liegt.[2]

[1] Für diese Mittelung wird das Zeichen $[\ldots]_\alpha$ verwendet.

[2] Dabei wird gemäß des zentralen Grenzwertsatzes angenommen, daß eine große Summe von Werten, die der gleichen Verteilung gehorchen, normalverteilt ist.

4.1 Einfache Ordnungsparameter

In diesem Abschnitt werden der AF Ordnungsparameter (staggered magnetization) sowie dessen Suszeptibilität χ_a betrachtet. Es folgt eine Untersuchung des Skalenverhaltens von χ_a. Zum Abschluß werden die Magnetisierung und dessen Suszeptibilität χ_m dargestellt.

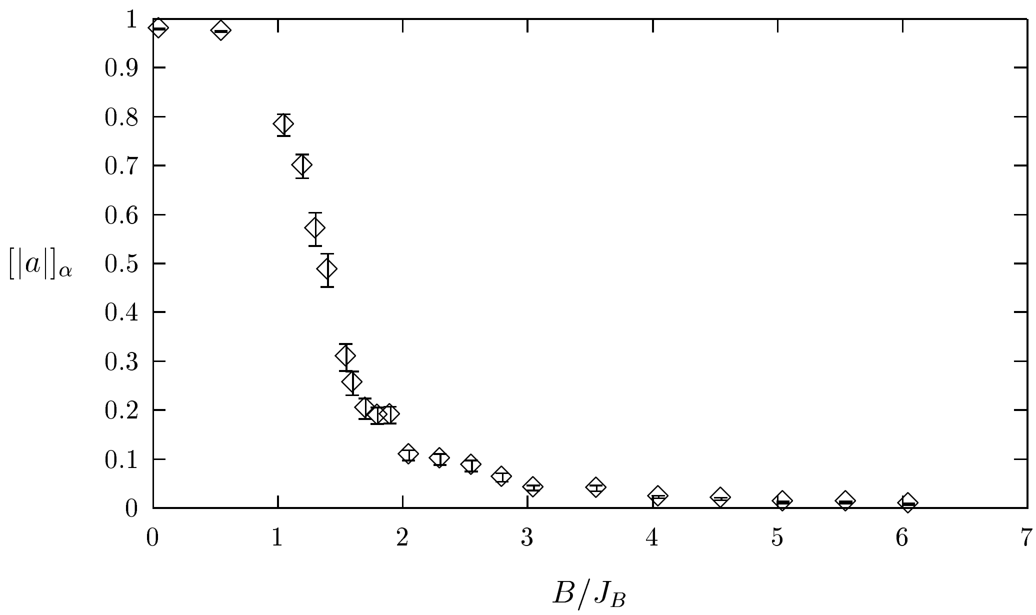

Abbildung 4.1: *AF Ordnungsparameter $a(B)$ für DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, $n = 20^3$*

In der Darstellung des Betrages des antiferromagnetischen Ordnungsparameters (mit $N \approx pn$: Anzahl der Spins)

$$a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} t(i) \epsilon_i \sigma_i \tag{4.1}$$

(Abb. 4.1) kann man deutlich den antiferromagnetisch geordneten Zustand für kleine Felder und den Hochfeldzustand unterscheiden. Der Ordnungsparameter geht im Bereich für $B/J_B \in [1, 2]$ von ca. 0.9 auf ca. 0.1 zurück. Bei $B/J_B = 2$ gibt es einen Sprung in der Kurve. Dort werden alle Spins mit genau zwei Nachbarn in Richtung des Magnetfeldes gekippt. So ein lokaler Effekt tritt auch bei den anderen ganzahligen Werten $B/J_B \in [1, 6]$ auf, führt aber zu geringer ausgeprägten Sprungstellen. Der AF Ordnungsparameter wird also im wesentlichen durch das kollektive Verhalten der Spins bestimmt. Für große Felder sind die Werte sehr genau: Die Breite der Fehlerbalken ist so gering, daß man nur noch zwei kleine waagerechte Striche innerhalb der Rauten sieht.

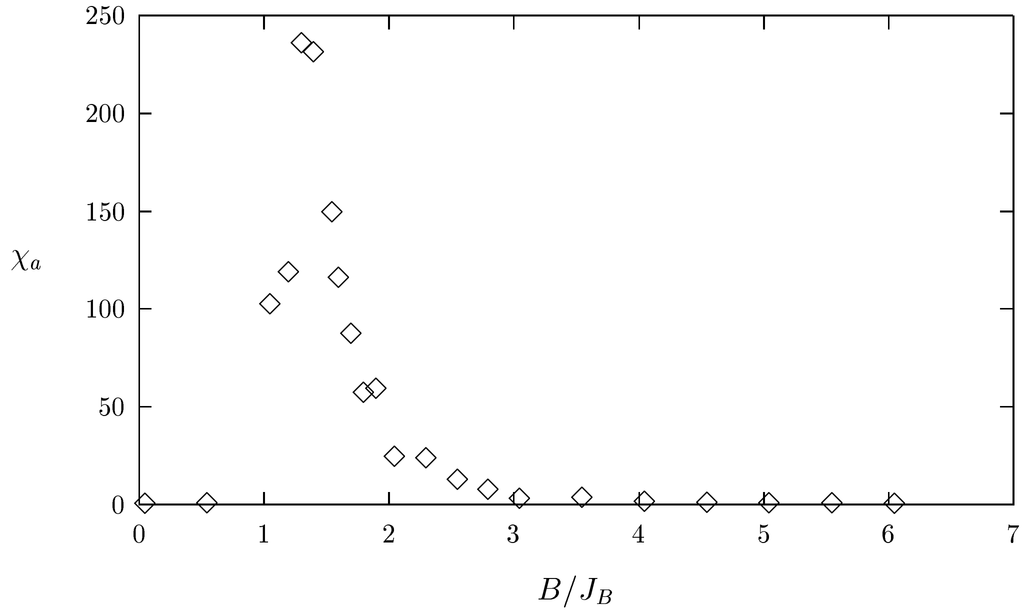

Abbildung 4.2: *Suszeptibilität $\chi_a(B)$ für DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, $n = 20^3$*

Die Suszeptibilität des AF Ordnungsparameters, d.h. dessen Schwankungen

$$\chi_a := N([a^2]_\alpha - [|a|]_\alpha^2) \tag{4.2}$$

kann man verwenden, um die kritische Feldstärke B_c für den Übergang von dem AF in den Domänenzustand zu bestimmen. In Abb. 4.2 ist $\chi_a(B)$ dargestellt. Die Kurve zeigt ein ausgeprägtes Maximum am Übergang. Es ergibt sich: $B_c(L = 20)/J_B = 1.35 \pm 0.05$. Dies entspricht in etwa dem von [Nowak92] ermitteltem Wert.
In Abb. 4.3 ist die Suszeptibilität χ_a für verschiedene Gittergrößen $n = L^3$ dargestellt. Mit steigender Größe wird das Maximum der Suszeptibilität höher und verschiebt sich zu kleineren Feldern. Somit liegt es nahe, eine finite size scaling Analyse durchzuführen. Nach Gl. 2.39 wird angenommen:

$$\chi_a(B, L) = L^{\bar{\gamma}/\bar{\nu}} f(L^{1/\bar{\nu}}(B - B_c)) \tag{4.3}$$

Diese Beziehung gilt in der Nähe des Übergangs. Die Funktion f hängt dabei von der Verdünnung p und den Randbedingungen ab. Zuerst soll $B_c := B_c(L \to \infty)$ und $\bar{\nu}$ bestimmt werden. Dabei wird folgender Skalenansatz für das kritische Feld verwendet:

$$B_c - B_c(L) \sim L^{-1/\bar{\nu}} \tag{4.4}$$

Der Wert $\bar{\nu}$ wird nun so gefittet, daß sich in der Auftragung der verschiedenen $B_c(L)$–Werte gegen $L^{-1/\bar{\nu}}$ eine Gerade ergibt [Mourit84]. Der Schnittpunkt der

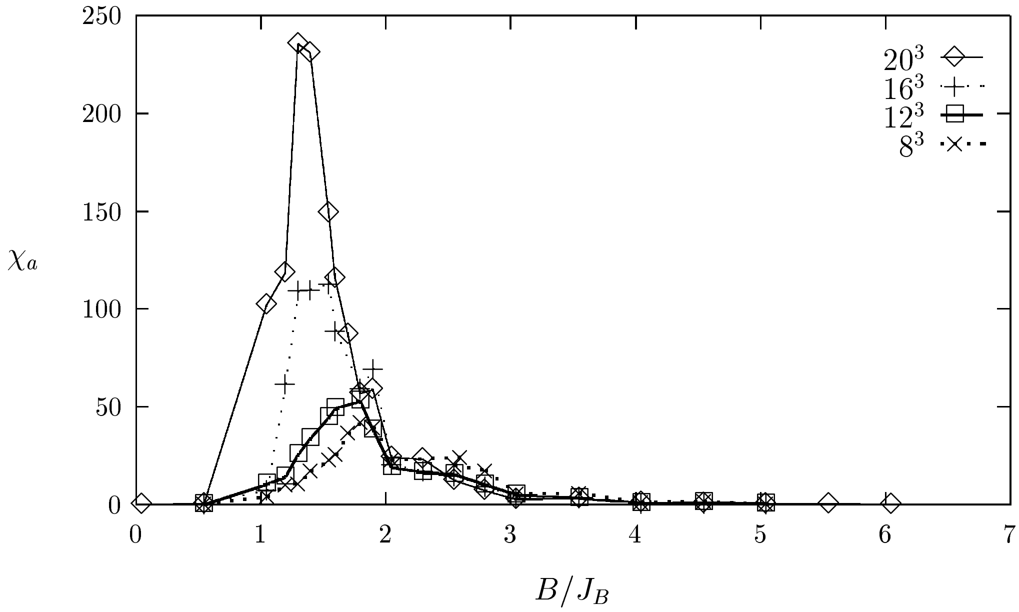

Abbildung 4.3: *Suszeptibilität $\chi_a(B)$ für DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, $n = 8^3, 12^3, 16^3, 20^3$, die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit*

Geraden mit der $B_c(L)$–Achse ist das Feld B_c. Das Ergebnis ist in Abb. 4.4 dargestellt.

Es ergeben sich $\bar{\nu} = 0.6$ und $B_c/J_B = 1.08$. Bei dem Fit wurde der Wert für $L = 8$ nicht beachtet, weil es nicht möglich war, eine Gerade zu finden, die diesen Punkt einschloß und nicht unsinnige Werte lieferte ($B_c < 0$). Wie man sieht, müßte der Wert $B_c(L = 8)/J_B$ größer als zwei sein. Bei $B/J_B = 2.0$ werden aber schon alle Spins mit 2 Nachbarn in Feldrichtung gekippt. Dieser lokale Effekt „zerstört" den kollektiven Übergang, was zur Folge hat, daß $\chi_a(L = 8)$ sein Maximum bei einem Feld B/J_B kleiner als 2.0 annimmt. Des weiteren kann man vermuten, daß das 8^3–Gitter für die Gültigkeit der Skalenhypothese zu klein ist.

Die Bestimmung der kritischen Felder für die verschiedenen Gittergrößen ist aufgrund der unregelmäßigen Formen der Suszeptibilitätskurven nur mit sehr großer Ungenauigkeit möglich. Die Fehlerbalken der Suszeptibilität sind in der Nähe des Übergangs von der Größenordnung der Suszeptibilitätswerte.[3] Das finite size scaling dient somit nicht zur genauen Bestimmung der kritischen Parameter B_c, $\bar{\nu}$ und $\bar{\gamma}$. Es soll nur gezeigt werden, daß ein Skalenverhalten auftritt.

Der Parameter $\bar{\gamma}$ wird so gewählt, daß die Maxima der Suszeptibilitäten multi-

[3]Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden die Fehlerbalken in den Kurven nicht mit angegeben.

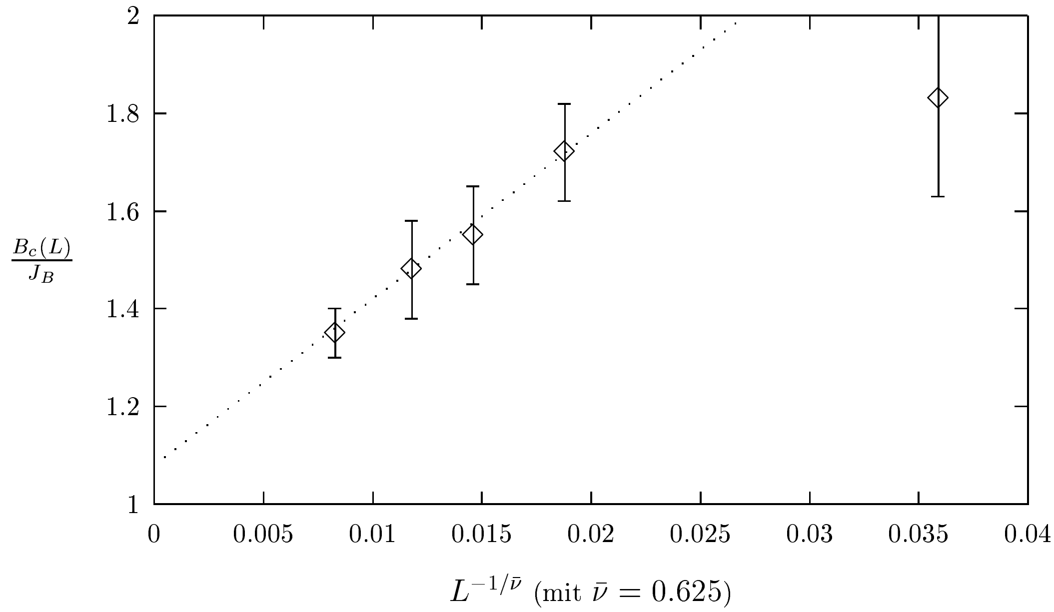

Abbildung 4.4: *kritisches Feld $B_c(L)/J_B$ ($T = 0$) gegen $L^{-1/\bar{\nu}}$ mit $\bar{\nu} = 0.6$, DAFF ($p = 0.5$), $L = 20, 16, 14, 12, 8$*

pliziert mit $L^{-\bar{\gamma}/\bar{\nu}}$ alle ungefähr die selbe Höhe haben, hier $\bar{\gamma} = 1.75$. In Abb. 4.5 ist der Skalenplot der $\chi_a(L)$ dargestellt. Im Rahmen der geringen erreichbaren Genauigkeit liegen die Werte für verschiedene Gittergrößen recht gut auf einer Kurve, dabei wurde $L = 8$ weggelassen. Die Hyperskalenrelation $\bar{\gamma} + \bar{\nu} = 2$ aus Gl. 2.36 ist allerdings nur bedingt erfüllt:

$$\bar{\gamma} + \bar{\nu} = 2.35 \tag{4.5}$$

In Abb. 4.6 ist der Betrag der Magnetisierung

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i \sigma_i \tag{4.6}$$

in Abhängigkeit des externen Magnetfeldes B dargestellt. Für ganzahlige Werte von B/J_B macht die Magnetisierung einen Sprung. An diesen Punkten werden alle Spins in Feldrichtung geklappt, die genau B/J_B Nachbarn haben, da diese Stellung die energetisch günstigere ist, unabhängig von der Stellung der Nachbarspins. Bei $B/J_B > 6$ stehen alle Spins in Feldrichtung. Der Übergang bei $B_c/J_B \approx 1.35$ ist in diesem Diagramm nicht zu entdecken. Die Sprungstellen für ganzahlige Werte von B/J_B sind wesentlich stärker ausgeprägt als beim AF Ordnungsparameter. Das zeigt, daß die Magnetisierung hauptsächlich durch das lokale Verhalten der Spins bestimmt wird. Wie man außerdem anhand der Fehlerbalken erkennt, sind die Schwankungen für m wesentlich kleiner als für a.

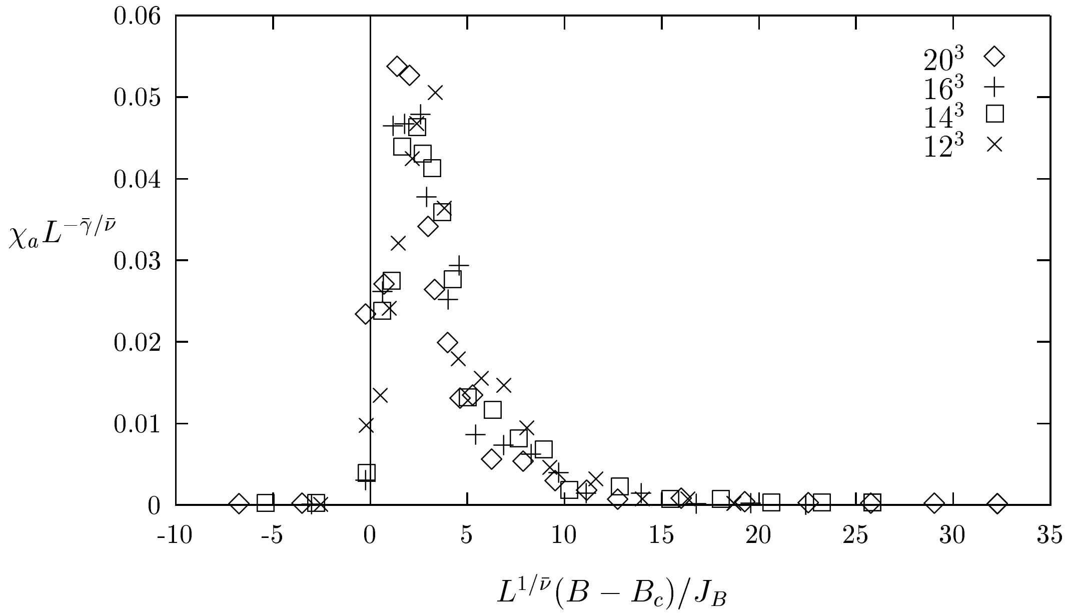

Abbildung 4.5: *Skalenplot* $\chi_a L^{-\bar{\gamma}/\bar{\nu}}$ *gegen* $L^{1/\bar{\nu}}(B-B_c)$ *mit* $\bar{\gamma}=1.75$, $\bar{\nu}=0.6$, $B_c/J_B=1.08$, *DAFF (*$p=0.5$*) bei* $T=0$, $L=20,16,14,12$

Die Suszeptibilität der Magnetisierung

$$\chi_m := N([m^2]_\alpha - [|m|]_\alpha^2) \tag{4.7}$$

ist in Abb. 4.7 dargestellt. Im Gegensatz zur Magnetisierung läßt sich der Übergang in den Domänenzustand deutlich erkennen.

Die Magnetisierung wird im wesentlichen durch den lokalen Effekt des Spinumklappens bei ganzzahligen Feldwerten B/J_B bestimmt, unabhängig von der Gittergröße (siehe Abb. 4.8). Eine Skalenanalyse ist somit nicht durchführbar. In der Nähe von B_c verändert sich die Magnetisierung allerdings stetig. Dort zeigt auch die Suszeptibilität χ_m ein ausgeprägtes Maximum. Da aber in der unmittelbaren Umgebung von B_c zu wenig Werte ermittelt wurden, ist es nicht möglich einen sinnvollen Skalenplot für diesen Bereich zu erstellen.

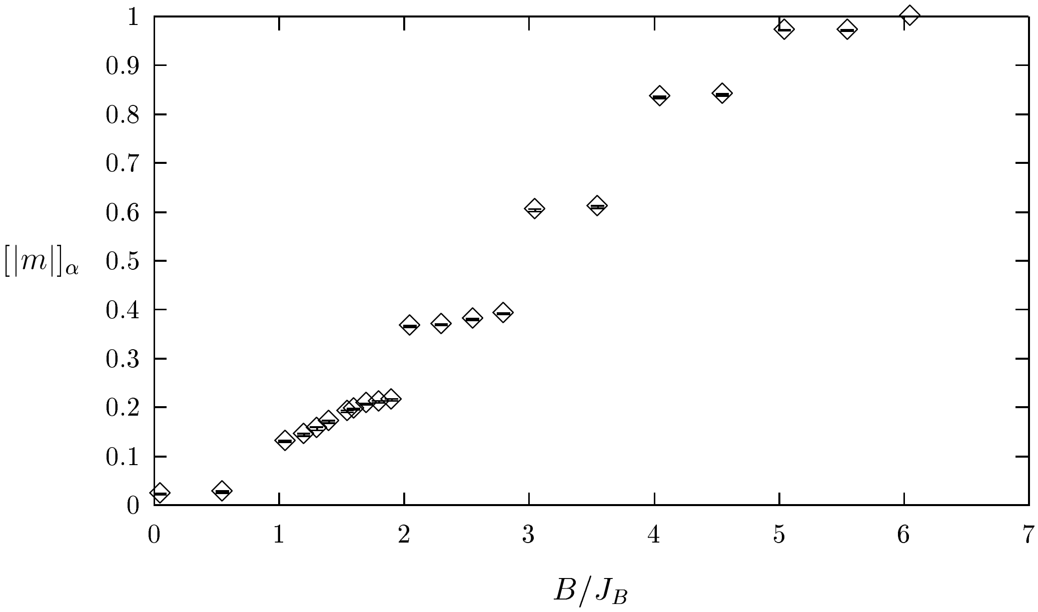

Abbildung 4.6: *Magnetisierung* $m(B)$ *für DAFF* $(p = 0.5)$*,* $T = 0$*,* $n = 20^3$

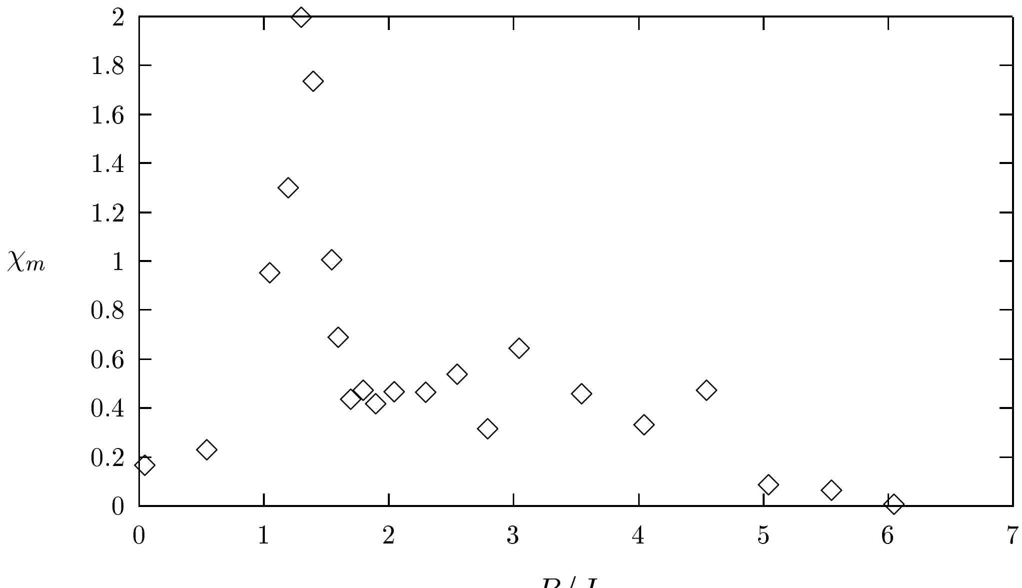

Abbildung 4.7: *Suszeptibilität* $\chi_m(B)$ *für DAFF* $(p = 0.5)$*,* $T = 0$*,* $n = 20^3$

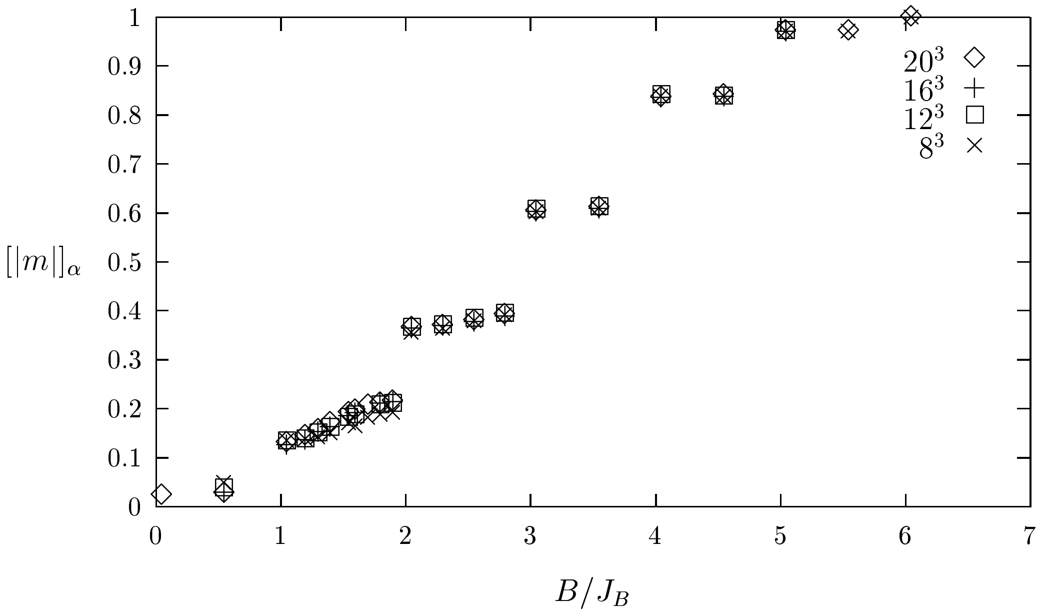

Abbildung 4.8: *Betrag der Magnetisierung pro Spin im DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, für verschiedene Gittergrößen $L = 20, 16, 12, 8$*

4.2 Überlapps

Die Bestimmung der Überlapps soll dazu dienen den Domänenzustand genauer zu charakterisieren: In wie weit zeigt er Spinglasverhalten?
Der Überlapp $q^{\alpha\beta}$ zwischen zwei Replicas α, β eines Systems mit einer bestimmten Löcherkonfiguration $\{\epsilon_i\}$ ist wie folgt definiert:

$$q^{\alpha\beta} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n} \epsilon_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \tag{4.8}$$

Dabei sind $\{\sigma_i^\alpha\}$ und $\{\sigma_i^\beta\}$ die Spinwerte der Replicas. Im Fall von $T = 0$ sind die Replicas verschiedene, voneinander unabhängig ermittelte Grundzustände. Die im folgenden dargestellten Überlappwerte wurden immer aus zwei Grundzuständen für 50 bis 100 Loch–Konfigurationen ermittelt. Es wurden dabei aber nur die Spins des perkolierenden Clusters (mit N_c Spins) betrachtet. Auf diese Weise beeinflussen isolierte Cluster, deren magnetisches Gesamtmoment verschwindet[4], nicht das Ergebnis.

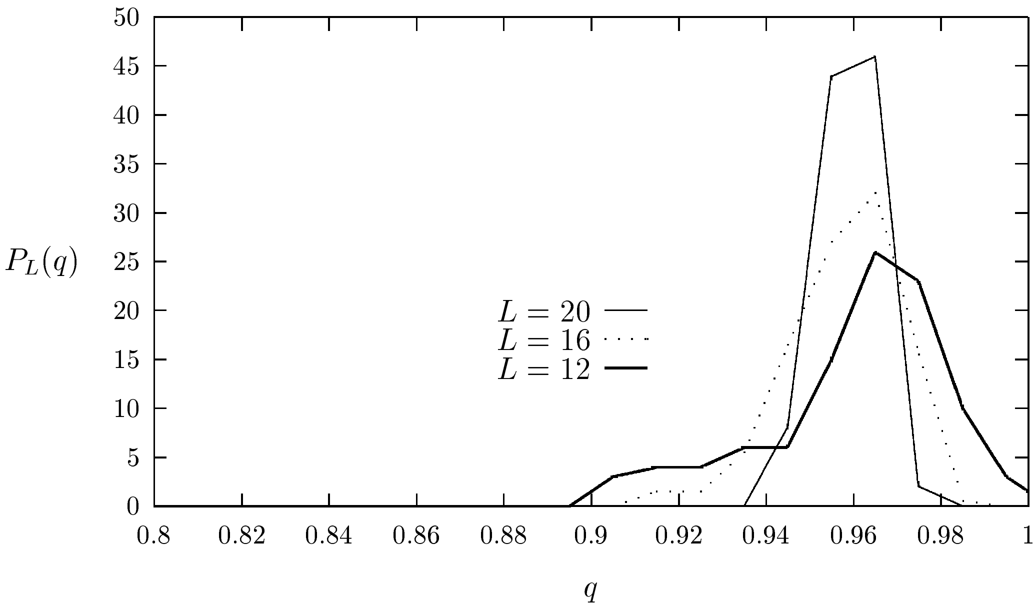

Abbildung 4.9: *Verteilung der Überlapps auf dem perkolierenden Cluster für DAFF* ($p = 0.5$) *bei* $T = 0$, $B/J_B = 3.05$, *mit* $n = 20^3, 16^3, 12^3$

In Abb.4.9 ist die Verteilung der Überlapps bei $B/J_B = 3.05$ für verschiedene Gittergrößen angegeben. Es wurde dieses nicht–ganzzahlige Feld B/J_B verwendet, damit auch einzelne Spins nicht zwei Einstellmöglichkeiten haben. Die

[4]Diese Spincluster haben immer zwei Einstellmöglichkeiten

Verteilung wird durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $P_L(q)$ repräsentiert. Die Funktion ist grob glockenförmig, wobei die Wahrscheinlichkeit für Überlapps kleiner als 0.8 verschwindet. Für $q < 0$ existieren ebenfalls keine Überlapps, da die Spins durch das äußere Magnetfeld eine Vorzugsrichtung erhalten. Für steigende Gittergrößen wird die Verteilung immer schmaler und höher. Man kann somit erwarten, daß $\lim_{L\to\infty} P_L(q) = \delta(q - q_0)$ für ein q_0 gilt. Es ergibt sich $q_0 \approx 0.95$. Also ist auch für unendlich große Systeme der Grundzustand des verdünnten Antiferromagneten entartet. Der Entartungsgrad muß sehr groß sein (unendlich ?), da die Wahrscheinlichkeit zwei gleiche Grundzustände zu erhalten offenbar gegen 0 geht. Trozdem ergibt sich für alle Grundzustände derselbe Überlapp.

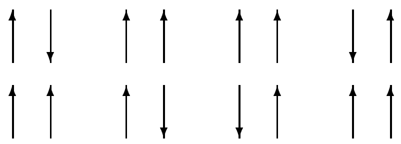

Abbildung 4.10: *Vier Zustände, deren Überlappwerte alle gleich sind*

Daß das kein Widerspruch sein muß, zeigt Abb. 4.10. Dort sind vier verschiedene Zustände eines Spin–Systems dargestellt. Der Überlapp zwischen je zwei Systemen ergibt immer den gleichen Wert 0.

Der Vergleich der Überlappverteilung mit dem Ergebnis aus [Staats93] (siehe Abschnitt 2.3.2) zeigt: Die mittels Monte Carlo–Simulation erhaltene Kurve ist etwa doppelt so breit (somit nur halb so hoch) wie die aus exakten Grundzuständen ermittelte, und das für ein System mit doppelt so großer Kantenlänge. Außerdem liegt die Kurve von [Staats93] weiter links. Zwar wurde dort ein kleineres Magnetfeld ($B/J_B = 1.9$) verwendet, aber in diesem Bereich des Domänenzustandes unterscheiden sich die Verteilungen für verschiedene Magnetfelder nur sehr wenig (s.u.). Die Ursachen für die anderen Ergebnisse in der zitierten Quelle können das nicht–Erreichen des Gleichgewichts bei der Simulation und die dort verwendete Berechnungsmethode der Überlapps sein.

Eine ähnliche Kurve wie in Abb. 4.9 wurde in [Young85] für das SK–Modell oberhalb der AT–Linie gefunden. Die Verteilung der Überlapps wurde mittels Simulation bei $k_BT/J_B = 0.4$ im äußeren Feld $B/J_B = 1.2$ für verschiedene Systemgrößen ermittelt (siehe Abb. 4.11). Auch hier ergibt sich eine Verteilung, die um einen Wert zentriert ist, der kleiner als 1 ist, und deren Breite mit zunehmender Systemgrösse abnimmt. Überlapps mit kleinen Werten (kleiner als 0.4) gibt es nicht.

Unterhalb der AT–Linie sieht die Verteilung der $q^{\alpha\beta}$ anders aus. Wie man der Abb. 4.12 [Young85] entnimmt, haben beliebig kleine Überlappwerte eine nicht

Abbildung 4.11: *Verteilung der Überlapps für das SK–Modell bei* $k_B T/J_B = 0.4$, $h := B/J_B = 1.2$, *mit* $300, 200, 64, 32$ *Spins nach* [*Young83*]

verschwindende Wahrscheinlichkeit. Die punktierte Linie gibt die analytische Näherungslösung aus [Young83] an.
Auch für Spingläser mit Nächster–Nachbar–Wechselwirkung (EA–Modell) wurde eine Überlappverteilung ermittelt [Bhatt85], die für $q \to 0$ positiv bleibt.
Insgesamt kann man somit sagen, daß der DAFF mitten im Domänenzustand starke Ähnlichkeit mit Spingläsern oberhalb der AT–Linie zeigt, d.h. außerhalb der Spinglasphase.
Im folgenden wird das Verhalten der Überlappverteilung in Abhängigkeit vom Magnetfeld diskutiert. Das Verhalten des Mittelwertes

$$\bar{q} := \int_0^1 q P_L(q)\, dq \tag{4.9}$$

ist für $n = 20^3$ in Abb. 4.13 wiedergegeben. Für niedrige Felder ist das System fast rein antiferromagnetisch, d.h. die meisten Überlapps liegen in der Nähe von 1. Entsprechendes gilt für hohe Magnetfelder, wenn (fast) alle Spins parallel zum äußeren Feld stehen. Für mittelgroße Felder wandert die Verteilung zu kleineren Werten. Das Minimum von $\bar{q}$ wird weit nach dem AF→SG Übergang, bei $B/J_B \approx 3$ angenommen. Hier ist der Unterschied zwischen den Grundzuständen am größten.
In [Caracc90] wird eine Spinglas–Suszeptibilität wie folgt definiert:

$$\chi_{SG} := N[\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2]_J \tag{4.10}$$

Dabei ist $\langle \ldots \rangle$ das thermische Mittel und $[\ldots]_J$ das Mittel über die Bond–

Abbildung 4.12: *Verteilung der Überlapps für das SK–Modell bei* $k_BT/J_B = 0.4$, $h := B/J_B = 0$, *mit* $192, 128, 64, 32$ *Spins nach* [*Young83*]

Verteilung. Wenn man nun das thermische Mittel durch das Mittel über die Loch–Verteilung $[\ldots]_p$ ersetzt, das Mittel $[\ldots]_J$ wegläßt und nur die Spins auf dem perkolierenden Cluster betrachtet ($N \to N_c$), so erhält man:

$$\chi_q := N_c([q^2]_p - [q]_p^2) \tag{4.11}$$

Diese „Überlappsuszeptibilität“ ist proportional zur Varianz von $P_L(q)$. Die Schwankungen der Überlapps sind in Abb. 4.14 dargestellt. Es gibt ein sehr scharfes Maximum, welches am Übergang bei $B/J_B \approx 1.4$ auftritt. Somit ist die Verteilung der Überlapps am Übergang wesentlich breiter als für andere Magnetfelder.

Durch Vergleich mit den Suszeptibilitäten χ_m und χ_a in Abschnitt 4.1 zeigt sich, daß χ_q den Übergang AF$\to$SG am deutlichsten darstellt.

In Abb. 4.15 ist die Verteilung der Überlapps für $B/J_B = 1.4$ dargestellt. Die großen Schwankungen resultieren von den zwei weit auseinanderliegenden Maxima. Diese Kurve ähnelt schon ein wenig der Verteilung für die Spinglasphase des SK–Modells. Allerdings sinkt der Abstand der beiden Maxima mit der Gittergröße (ohne Abb.). Es könnte sich somit um einen finite–size Effekt handeln. Um das festzustellen müßte man noch größere Systeme untersuchen.

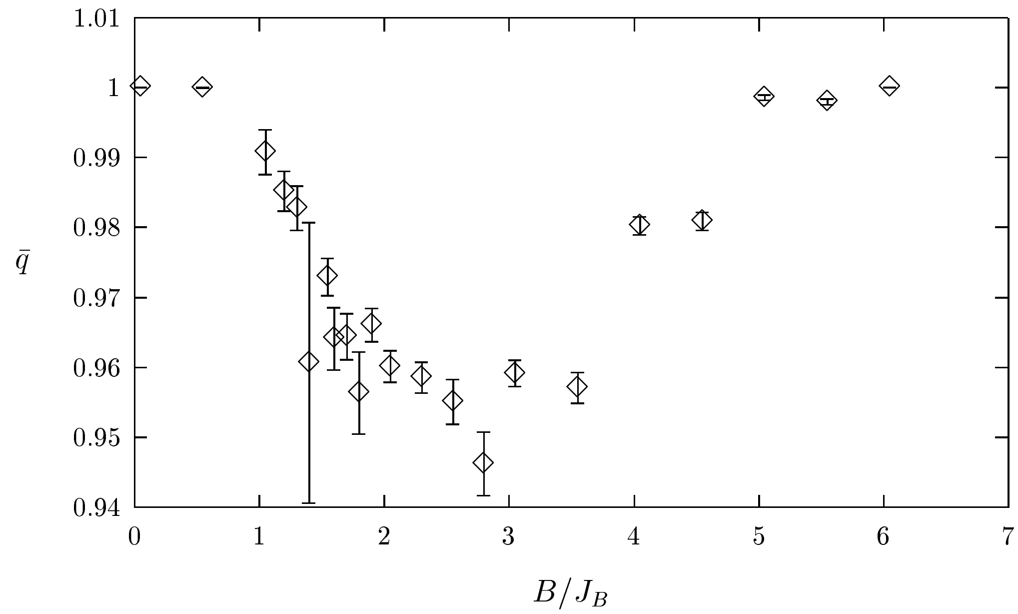

Abbildung 4.13: *Mittelwert der Überlapps auf dem perkolierenden Cluster in Abhängigkeit von B, für DAFF ($p = 0.5$) bei $T = 0$, mit $n = 20^3$*

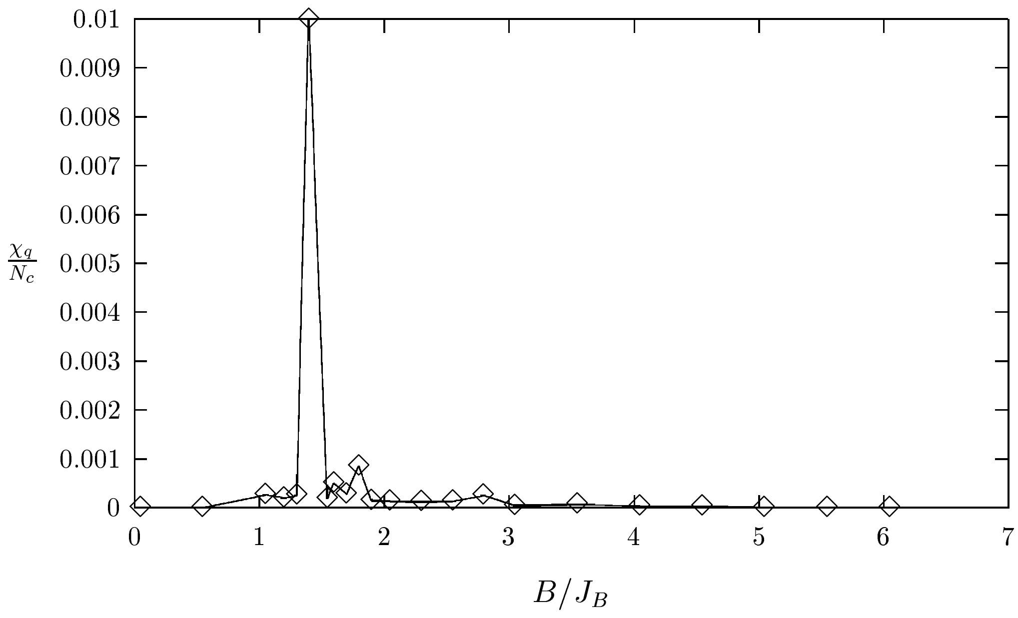

Abbildung 4.14: *Schwankungen der Überlapps auf dem perkolierenden Cluster in Abhängigkeit von B für DAFF ($p = 0.5$) bei $T = 0$, mit $n = 20^3$, die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit*

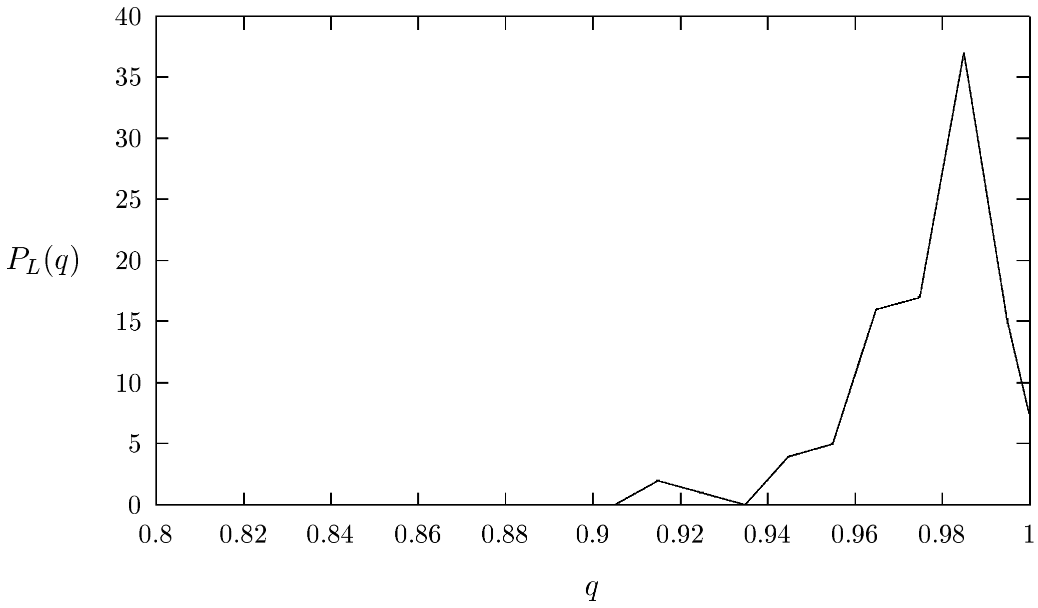

Abbildung 4.15: *Verteilung der Überlapps auf dem perkolierenden Cluster für DAFF ($p = 0.5$) bei $T = 0$, $B/J_B = 1.4$ mit $n = 20^3$*

4.3 Struktur der Domänen

Jeder Grundzustand besteht aus einer Ansammlung von Domänen. Das sind Bereiche, die in sich rein antiferromagnetisch geordnet sind, d.h. die Bindungen zwischen den Spins einer Domäne sind alle gesättigt. Der Algorithmus, mit dem die Domänen eines Zustandes bestimmt wurden, ist in Anhang D beschrieben. Um die Struktur der Domänen zu beschreiben, wurden folgende Größen ermittelt:

- Das *Volumen* V_D einer Domäne ist die Anzahl ihrer Spins.
- Der *Radius* R_D ist die Wurzel aus dem Mittelwert aller quadratischen Abstände der Spins. Aufgrund der zyklischen Randbedingungen wurde der Abstand in jeder Koordinatenrichtung wie folgt berechnet: Ist d der Betrag der Differenz der Koordinaten, so ist der Abstand das Minimum von d und $L-d$. Auf diese Weise werden auch nicht–perkolierende Domänen korrekt behandelt, die über den Rand des Gitters reichen.
- Die *Oberfläche* F_D ist die Zahl aller nicht gesättigten, d.h. gebrochenen oder nicht vorhandenen Bindungen, die einen Spin der Domäne berühren.
- Das *magnetische Moment* M_D ist die Summe der Momente aller Spins einer Domäne.
- Die *Wandenergie* E_D (in Einheiten der Bond–Kopplungsstärke J_B) ist die Zahl aller gebrochenen Bindungen an der Oberfläche einer Domäne.

Die jeweiligen Größen wurden für alle Domänen berechnet und dann für jedes Volumen V_D gemittelt. Die Anzahl der Domänen n mit einem bestimmten Volumen ist in Abb. 4.16 für die ermittelten Grundzustände der 100 Loch–Konfigurationen bei $B/J_B = 3.05$ dargestellt. Für kleine Domänen wurde somit das jeweilige Mittel aus sehr vielen Einzelwerten gebildet, während sehr große Domänen eines bestimmten Volumens nur in geringer Anzahl auftraten.
In Abbildung 4.17 ist der mittlere Domänenradius R_D in Abhängigkeit des Volumens doppellogarithmisch aufgetragen. Man kann für nicht zu große Domänen ein Potenzverhalten der Form

$$R_D \sim V_D^{1/D_\nu} \tag{4.12}$$

mit $1/D_\nu = 0.42 \pm 0.01$ feststellen. Die Dimension $D_\nu = 2.3$ entspricht nicht der euklidischen Dimension 3. Die Domänen sind somit fraktal.
Für große Domänen gilt dieses Gesetz nicht, da sie perkolieren, d.h. über den Gitterrand zyklisch in sich geschlossen sind. Für solche Domänen ist die obige Radiusdefinition nicht sinnvoll.
In Abb. 4.18 ist der Zusammenhang $F_D(V_D)$ dargestellt. Auch hier gilt wieder ein Potenzgesetz:

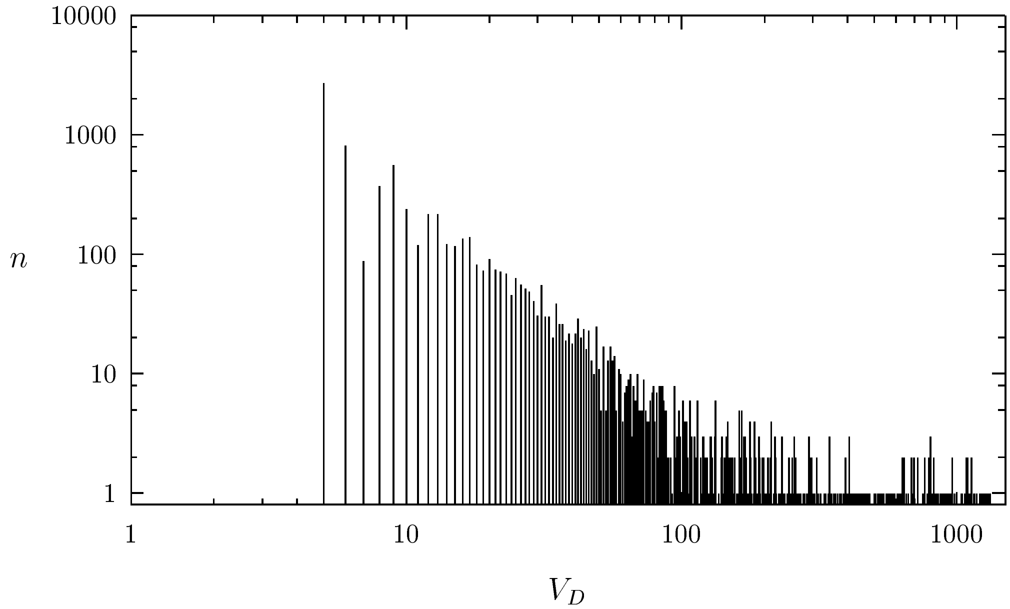

Abbildung 4.16: *Anzahl der Domänen eines vorgegebenen Volumens in 100 Domänenzuständen für DAFF ($p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $n = 20^3$*

$$F_D \sim V_D^{1/D_{\nu f}} \tag{4.13}$$

Dabei ist $1/D_{\nu f} = 0.97 \pm 0.01$. Dieser Wert ist nicht ungewöhnlich für stark durchlöcherte Objekte, da ein großer Teil der Oberfläche innerhalb der Domänen liegt, so daß die Fläche proportional zum Volumen ist.
Die Werte D_ν und $D_{\nu f}$ zeigen, daß die Domänen keine kompakten Gebilde und fraktal sind. Weitere Untersuchungen mittels Monte–Carlo–Simulation [Nowak91] ergaben, daß sich alle Domänen durchdringen und insgesamt sehr komplex aufgebaut sind. Dort wurden ähnliche Werte für D_ν und $D_{\nu f}$ ermittelt, welche somit durch exakte Rechnung bestätigt werden konnten.
Die Abhängigkeit des magnetischen Moments M_D vom Volumen V_D ist in Abb. 4.19 wiedergegeben. Für diese Daten ergibt sich das Potenzgesetz

$$M_D \sim V_D^\theta \tag{4.14}$$

mit $\theta = 0.94 \pm 0.01$. Das magnetische Moment ist ein Maß für den Überschuß der Spins, die in Feldrichtung orientiert sind, gegenüber den Spins, die gegen das Feld gekippt sind. Falls sich dieser Überschuß rein statistisch aufgrund der Verteilung der Löcher ergäbe, müßte $M \sim V^{1/2}$ gelten. Aufgrund der komplexen Struktur ist somit eine solche statistische Argumentation nicht anwendbar.
In Abb. 4.20 ist die Wandenergie E_D als Funktion von V_D dargestellt. Wiederum gilt ein Potenzgesetz:

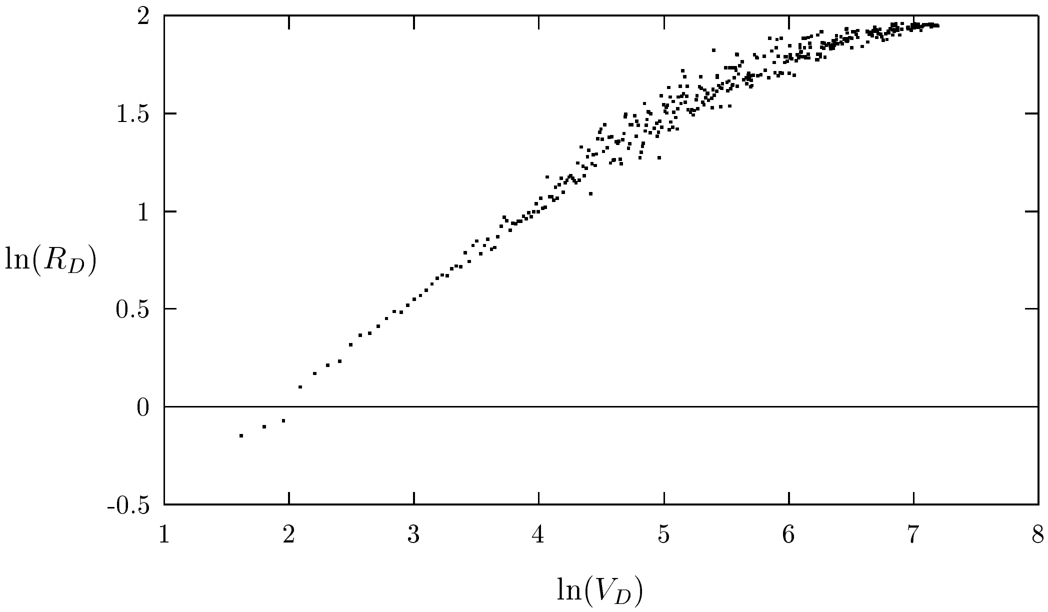

Abbildung 4.17: *Domänenradius über Volumen für DAFF ($p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 20^3$*

$$E_D \sim V_D^{\sigma} \tag{4.15}$$

mit $\sigma = 0.95 \pm 0.01$. Auch hier konnten die Werte für θ und σ aus [Nowak92] bestätigt werden.

Die ermittelten Exponenten hängen nur sehr wenig vom Magnetfeld ab. Allerdings ist im AF Zustand D_ν praktisch nicht zu ermitteln. Die Exponenten für die Wandenergie und das magnetische Moment liegen ca. 10% unter dem oben angegebenen Werten, steigen bis $B/J_B \approx 3$ an und fallen danach bis $B/J_B = 6$ um ca. 5%. Der Wert für $D_{\nu f}$ ist praktisch für alle Magnetfelder gleich groß.

Aus den Gleichungen 4.14 und 4.15 folgt, daß $M_D \sim E_D$ gilt. Man kann somit mittels eines *Imry–Ma Argumentes* keine Aussage darüber machen, ob eine Domäne asymptotisch (für große Gitter) stabil ist. Somit läßt sich auf diese Weise nicht klären, ob das Gitter im Domänenzustand weiterhin eine AF Fernordnung aufweist, d.h. ob im unendlichen Gitter eine perkolierende Domäne existiert.

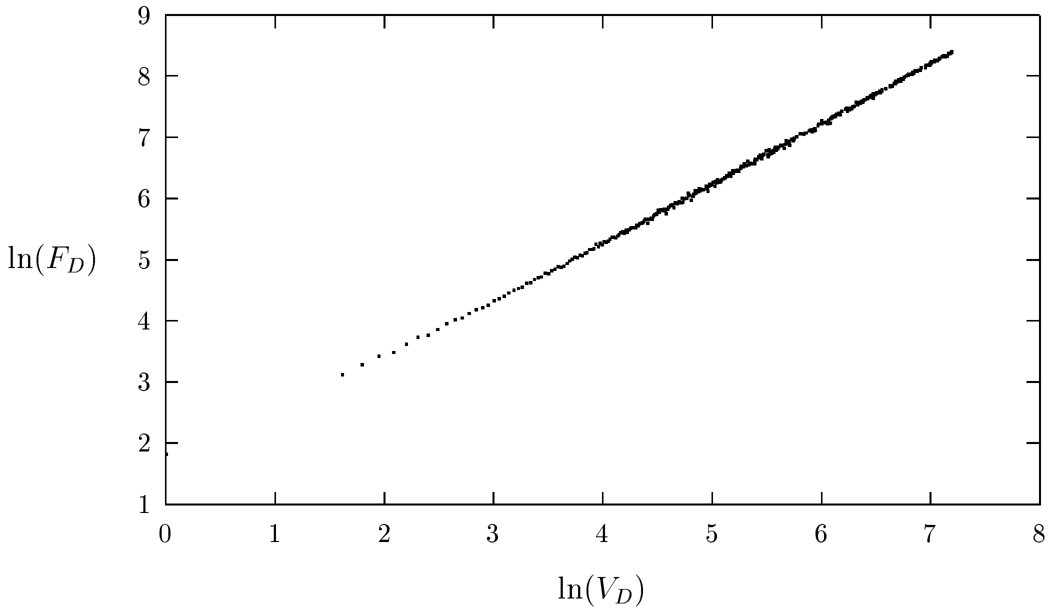

Abbildung 4.18: *Domänenoberfläche über Volumen für DAFF ($p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 20^3$*

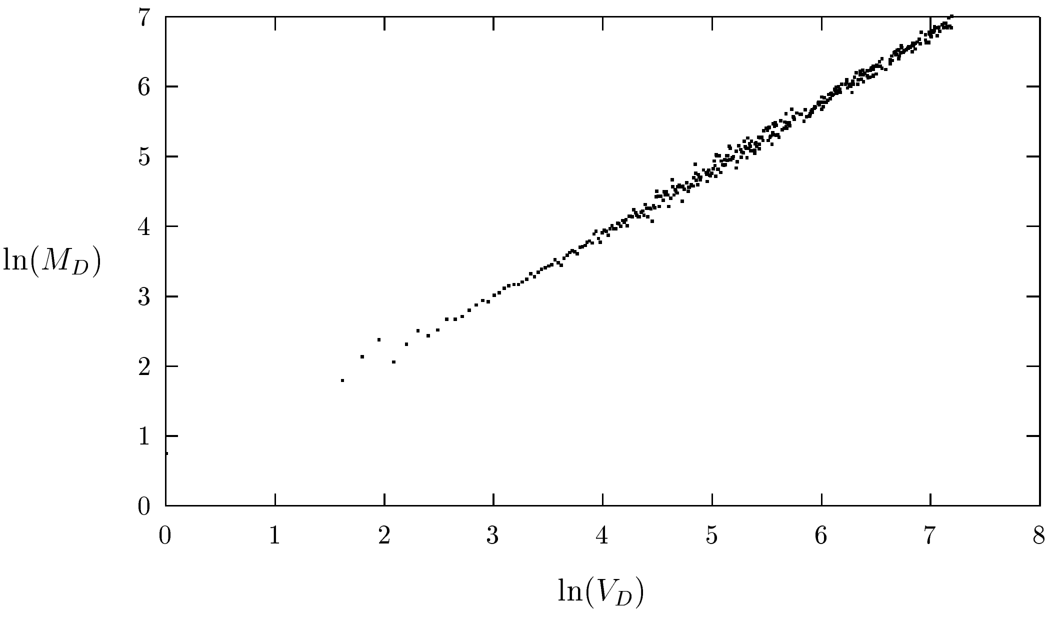

Abbildung 4.19: *magnetisches Moment der Domänen über Volumen für DAFF ($p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 20^3$*

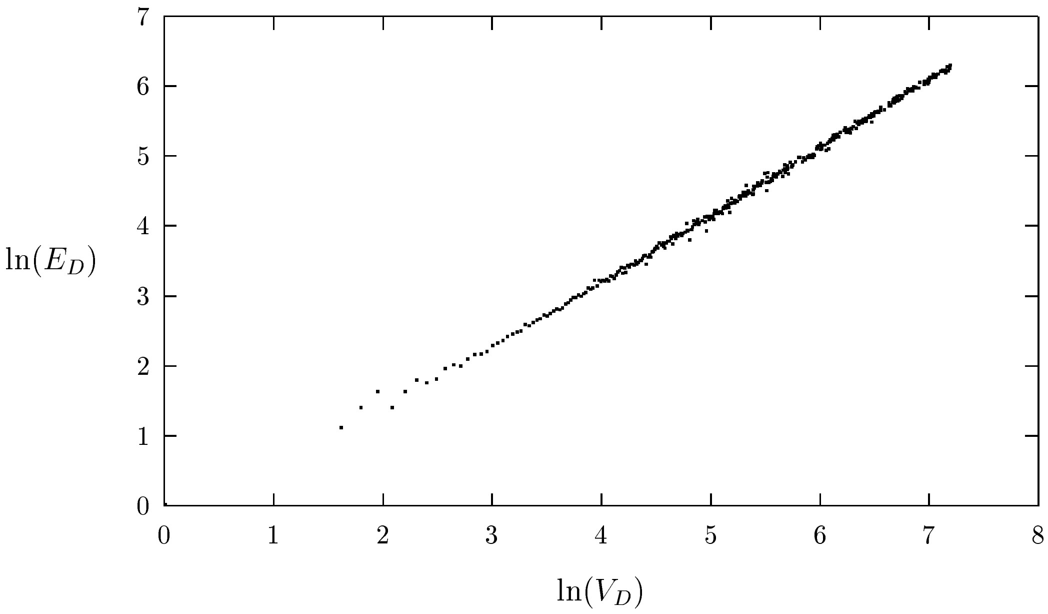

Abbildung 4.20: *Domänenwandenergie über Volumen für DAFF* ($p = 0.5$) *bei* $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 20^3$

Um diese Frage zu klären, wurde für verschiedene Magnetfelder und Gittergrößen die Fernordnung künstlich zerstört und jeweils überprüft, ob die so entstandene Spin–Konfiguration bezüglich der Oberflächenenergie günstiger ist als in einer Konfiguration mit AF Fernordnung. Dazu wurden an zwei gegenüberliegenden Stirnseiten des Systems jeweils eine Schicht von Spins hinzugefügt (ohne Löcher), deren Stellungen über sehr starke lokale Magnetfelder fest vorgegeben wurden. An diesen Stirnseiten wurden feste Randbedingungen verwendet. Zuerst wurden diese Randspins so eingestellt, daß eine Fernordnung bevorzugt wird (A). Anschließend wurden alle Spins an einer Stirnseite umgedreht, so daß eine Domänenwand innerhalb des Systems erzwungen wird (B). In den Abb. 4.21 und 4.22 wird dieser Vorgang für ein $(6+2) \times 6$ System mit Verdünnung $p = 0.15$ ohne äußeres Feld verdeutlicht. Die Spinstellungen werden hier durch die Zeichen + und − repräsentiert. Die Bindungen sind nicht dargestellt.

$$
\left|\begin{array}{cccccccc}
- & + & - & + & - & + & - & + \\
+ & - & + & - & & - & + & - \\
- & & - & + & & + & & + \\
+ & - & + & - & + & - & + & - \\
- & + & - & + & & & - & + \\
+ & - & + & - & + & - & + & -
\end{array}\right|
$$

Abbildung 4.21: *Zweidimensionaler DAFF ($p = 0.15$, $B = 0$, $T = 0$) mit festen Randspins links und rechts, AF ferngeordnet.*

$$
\left|\begin{array}{cccccccc}
- & + & - & + & + & - & + & - \\
+ & - & + & - & & + & - & + \\
- & & - & + & & - & & - \\
+ & - & + & - & + & + & - & + \\
- & + & - & + & & & + & - \\
+ & - & + & - & - & + & - & +
\end{array}\right|
$$

Abbildung 4.22: Zweidimensionaler DAFF ($p = 0.15$, $B = 0$, $T = 0$) mit Domänenwand, die über die Randspins links und rechts erzwungen wird.

Diese Untersuchung wurde beim dreidimensionalen DAFF ($p = 0.5$) für die Gitterkantenlängen $L = 6, 8, 10, 12, 14$ bei den Magnetfelder $B/J_B = 0.05$ bis 5.05 durchgeführt. Es wurden jeweils 300 Loch–Konfigurationen ausgelost. Die Grundzustände für die Randbedingungen A und B wurden energetische verglichen. Damit die Ankopplung der Domänen an das äußeren Feldes keinen Einfluß auf die Energiebilanz hat, wird dazu nicht die Gesamtenergie, sondern nur die Oberflächenenergie der Domänen verwendet (in Einheiten der Kopplungskonstante J_B):

$$\Delta E := E_D(B) - E_D(A) \tag{4.16}$$

In Abb. 4.23 ist der Energieunterschied gemittelt über die Loch–Konfigurationen für einige Magnetfelder dargestellt.

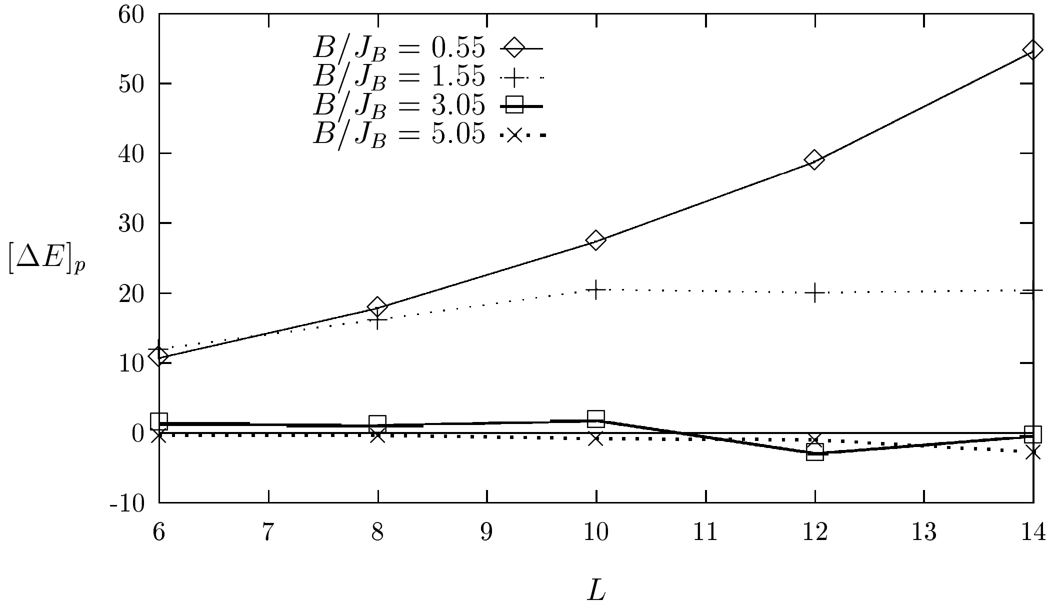

Abbildung 4.23: *Mittlerer Unterschied der Oberflächenenergien bei erzwungenen Domänenwänden für DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, in Abhängigkeit der Kantenlänge L für Magnefelder $B/J_B = 0.55, 1.55, 3.05, 5.05$*

Bei kleinen Feldern steigt $[\Delta E]_p$, wie eine genauere Untersuchung zeigt, quadratisch mit der Kantenlänge L an. Das liegt daran, daß dem rein AF geordeten Zustand eine Domänenwand aufgezwungen wird, die wie die Querschnittsfläche des Systems skaliert. Mit steigendem Magnetfeld wird die Steigung der Energiedifferenz immer kleiner. Innerhalb des Domänenzustandes ($B/J_B \approx 3$) verschwindet $[\Delta E]_p$ nahezu[5]. Das liegt daran, daß sich die erzwungene Domänenwand mit Hilfe der bereits vorhandenen Wände aufbauen kann. Im Domänenzustand ist die AF Fernordnung somit gebrochen.
In [Nowak92] wird aufgefürt, daß im Domänenzustand immer zwei annähernd gleich große perkolierende Domänen gefunden wurden. Dieser Befund wird im folgenden untersucht.

[5]Der Fehlerbalken für die Werte bei $B/J_B > 3$ sind größer als die Werte selbst.

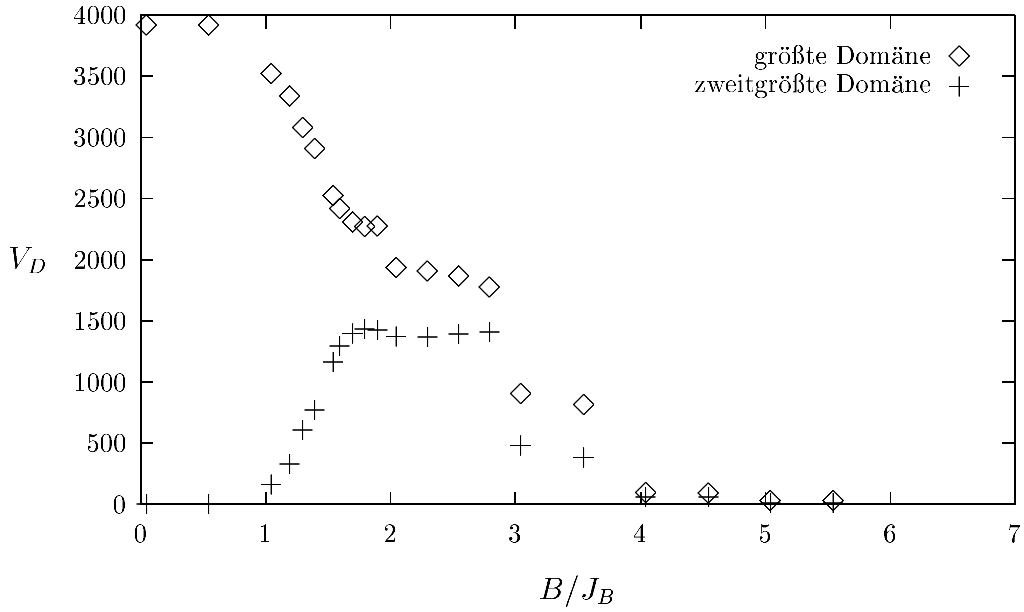

Abbildung 4.24: *Volumen der größten und der zweitgrößten Domäne über dem Magnetfeld ($T = 0$) für DAFF ($p = 0.5$), $n = 20^3$*

In Abb. 4.24 sind die mittleren Volumina der größten Domäne $D1$ und der zweitgrößten Domäne $D2$ aufgetragen. Für kleine Felder ist das System rein antiferromagnetisch geordnet, es gibt nur eine Domäne. Mit steigendem Magnetfeld wächst $D2$ (im Mittel) auf Kosten von $D1$, bis sie sie fast erreicht. Durch gleiche Untersuchungen an kleineren Systemen zeigte sich: Je größer das Gitter ist, desto mehr gleichen sich die Volumina der beiden größten Domänen an.

Bei $B/J_B = 3.0$ ändert sich das Verhalten. Die größten Domänen büßen an Volumen ein, ihr Größenverhältnis sinkt auf ca. 0.5. Oberhalb von $B/J_B = 4.0$ existieren praktische nur noch kleine Domänen. Außerdem machen $D1$ und $D2$ für $B/J_B < 3.0$ den größten Teil der Spins aus, was für höhere Felder nicht mehr der Fall ist.

Um die Verhältnisse um $B/J_B = 3.0$ genauer zu untersuchen, wurden die Größenverhältnisse $v := V_{D2}/V_{D1}$ für alle Grundzustände und Konfigurationen (insgesamt 100 Werte) einzeln ermittelt. In Abb. 4.25 sind die Verteilungen der Verhältniswerte für $B/J_B = 2.80$ und $B/J_B = 3.05$ angegeben, indem gegen die v–Achse die Zahl der Werte aufgetragen ist, die in ein Intervall der Breite 0.05 fiel.

Für das kleinere Feld liegen die meisten v–Werte um 0.8. Für das höhere Feld erstreckt sich die Verteilung über einen großen Teil des Intervalls $[0, 1]$. Die Struktur des Domänenzustandes ändert sich oberhalb von $B/J_B = 3.0$ also wesentlich.

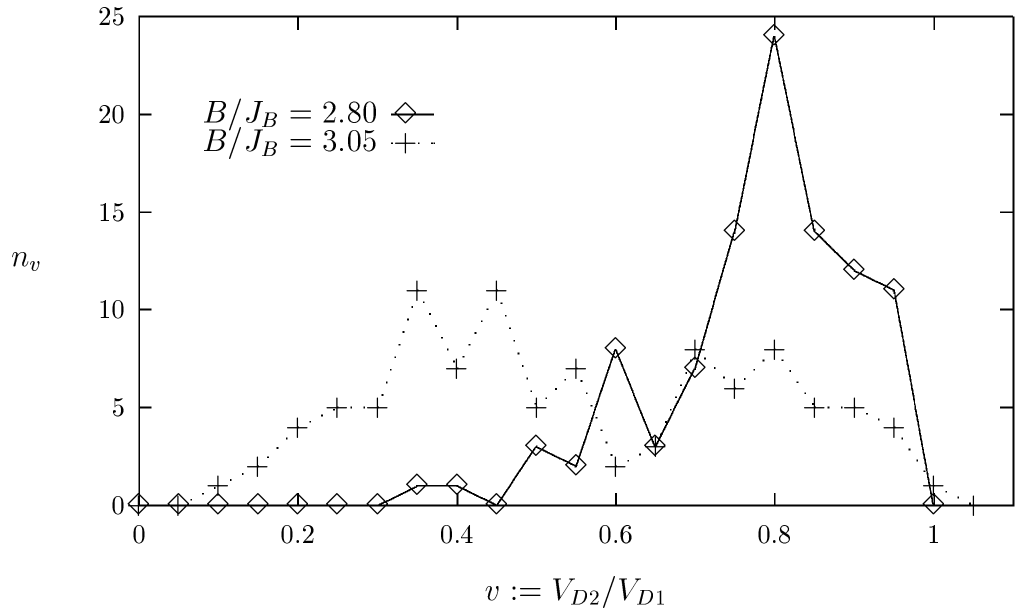

Abbildung 4.25: *Verteilung der Volumenverhältnisse von zweitgrößter zur größten Domäne bei* $B/J_B = 2.80$ *und* $B/J_B = 3.05$ *(*$T = 0$*) für DAFF (*$p = 0.5$*),* $n = 20^3$*. Die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit.*

4.4 Korrelationen

Im folgenden soll eine weitere charakteristische Größe des Domänenzustandes ermittelt werden: Die Korrelationslänge. Dazu wird die Spin–Spin Korrelationsfunktion $c(\vec{r})$ verwendet. Sie gibt an, wie stark sich zwei Spins mit Abstandsvektor $\vec{r}$ gegenseitig beeinflussen:

$$c(\vec{r}) = [\sigma(\vec{r}_0)\sigma(\vec{r}_0 + \vec{r})] \tag{4.17}$$

Mit $[\ldots]$ ist hier die Mittelung über das Gitter (d.h. über alle $\vec{r}_0$ an denen ein Spin sitzt), die Grundzustände und die Konfigurationen gemeint.
Berechnet wurde die Korrelationsfunktion $c(r\vec{e}_x)$, wobei $\vec{e}_x$ der Einheitsvektor in x–Richtung ist. Diese Werte wurden bereits in [Nowak92] mittels Monte Carlo–Simulation ermittelt, es zeigten sich aber Ahängigkeiten von der Kühlrate und es erschien fraglich, inwieweit es überhaupt möglich sein würde, ein thermisches Gleichgewicht bei kleinen Feldern und kleinen Temperaturen zu erreichen.
Bei der Berechnung von $c(r\vec{e}_x)$ muß man das äußere Magnetfeld berücksichtigen. Für große Abstände r sind die Spins voneinander unabhängig, d.h. es gilt [Nowak92]:

$$c(r\vec{e}_x) = [\sigma(\vec{r}_0)\sigma(\vec{r}_0 + r\vec{e}_x)] \approx [\sigma(\vec{r}_0)][\sigma(\vec{r}_0 + r\vec{e}_x)] = m^2 \tag{4.18}$$

Um diesen Einfluß zu korrigieren, wird von den berechneten Werten m^2 subtrahiert. Außerdem muß beachtet werden, daß aufgrund der antiferromagnetischen Struktur das Vorzeichen der so erhaltenen Größe mit $(-1)^r$ schwankt. Deshalb wurde noch der Betrag genommen. Insgesamt wurde somit folgende korrigierte Größe ermittelt:

$$c_k(r) := |c(r\vec{e}_x) - m^2| \tag{4.19}$$

In Abb. 4.26 ist die korrigierte Korrelationsfunktion der Grundzustüde bei 4 Magnetfeldern $B/J_B = 1.55$, 2.05, 3.05, 4.55 für Abstände $r = 1, \ldots, 10$ aufgetragen. In der einfach–logarithmischen Auftragung erkennt man, daß die Korrelationsfunktionen für kleine Spin–Abstände nahezu exponentiell abfallen (außer bei $B/J_B = 1.55$):

$$c_k(r) \sim e^{-r/\xi} \tag{4.20}$$

Dabei ist ξ die *Korrelationslänge*. Für größere Werte von r flachen die Kurven ab und werden unregelmäßiger. Der flachere Kurvenverlauf ergibt sich aufgrund der zyklischen Randbedingungen: Für größere Abstände als 10 muß die Korrelation wieder zunehmen und zwar genauso, wie sie für kleine Werte abnahm. Die Korrelationsfunktionen bestehen somit aus einer Überlagerung von Exponentialfunktionen symmetrisch zu $r = 10$:

$$c_k(r) \sim e^{-r/\xi} + e^{-(20-r)/\xi} \tag{4.21}$$

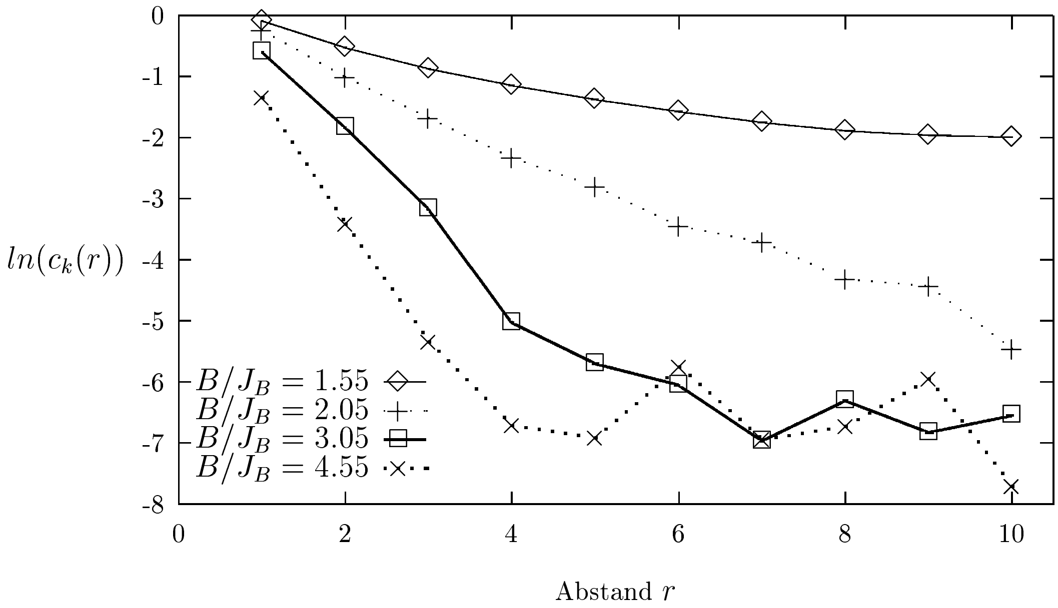

Abbildung 4.26: *einfach–logarithmische Auftragung der korrigierten Korrelationsfunktion* $c_k(r)$ *über dem Abstand* r *für DAFF* ($p = 0.5$) *bei* $T = 0$, $B/J_B = 1.55,\ 2.05,\ 3.05,\ 4.55$ *mit* $n = 20^3$, *die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit*

Diese Überlagerung macht sich besonders für kleine Korrelationswerte in der Nähe von $r = 10$ bemerkbar, und ist um so stärker je größer die Korrelatioslänge ist.
Die starken Schwankungen für größere Abstände r resultieren aus der Berechnungsmethode von $c_k(r)$: Bei der Bildung der Differenz zweier Werte macht sich die Rechengenauigkeit des Computers besonders für kleine Differenzen bemerkbar. Somit ist auch klar, daß die Schwankungen bei um so kleineren Werten von r auftreten, je stärker die Korrelationsfunktion abfällt.
Die Korrelationslängen ξ für die verschiedenen Magnetfelder ergeben sich aus dem Fit der Daten aus Abb. 4.26 an die Funktion in Gl. 4.21. Werte für ξ wurden auch für Magnetfelder ermittelt, deren Korrelationsfunktionen nicht in der Abbildung dargestellt sind.
In Abb. 4.27 ist die Korrelationslänge als Funktion von B für den Domänenzustand ($B/J_B \geq 1.5$) aufgetragen. Man kann grob ein Potenzgesetz ablesen:

$$\xi \sim B^{-1.5\pm0.2} \tag{4.22}$$

Der Wert -1.5 für den Exponenten ist größer als bei [Nowak92] (Monte–Carlo Simulation mit Kantenlänge $L = 49\ldots99$ bei $k_BT/J_B = 0.8$ ($\approx 0.4k_bT_N/J_B$), Exponent -2.2) Die Ursachen muß man wohl einerseits in den starken (Rechen–) Ungenauigkeiten und der geringen Systemgröße $n = L^3$ suchen. Andererseits ist

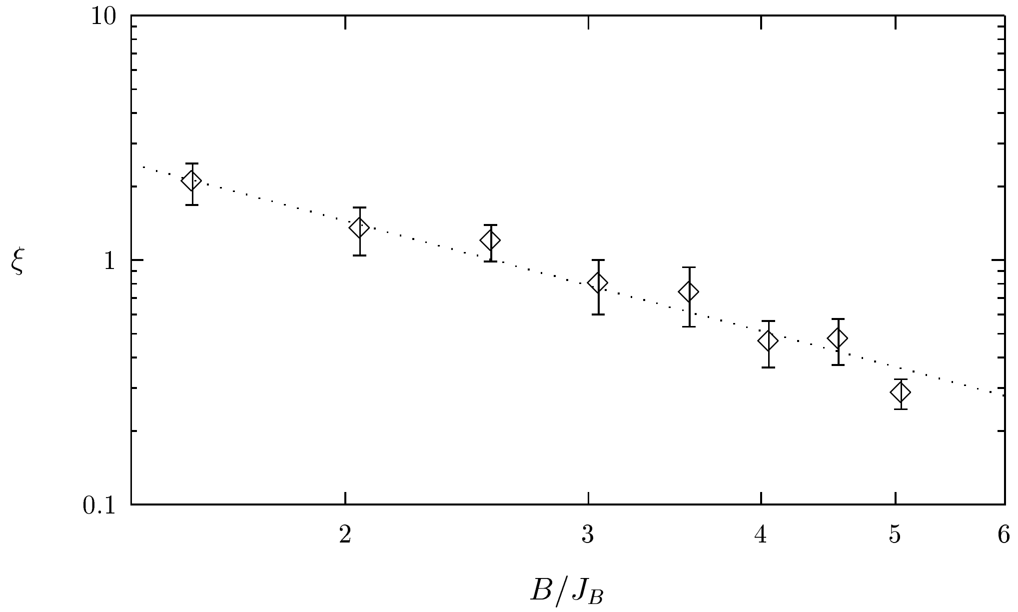

Abbildung 4.27: *Korrelationslänge über dem Feld mit angefitteter Potenzfunktion für DAFF ($p = 0.5$) bei $T = 0$, mit $n = 20^3$*

nicht klar, wie sich das Nichterreichen des Gleichgewichts und die Temperatur $T \approx 0.4T_N$ auf das Ergebnis der Simulation auswirkte. Außerdem konnte die Korrelationslänge nur für Felder $B/J_B > 1.5$ an eine Potenzfunktion angepasst werden, während in der zitierten Quelle Felder $B/J_B \in [0.75, 2.0]$ verwendet wurden.
In jedem Fall zeigt das Potenzverhalten der Korrelationslänge, daß sie nicht die charakteristische Länge ist, welche am Phasenübergang divergiert.
Festzuhalten ist weiterhin, daß die ermittelten Korrelationslängen des Domänenzustandes in der Größenordnung von wenigen Gitterkonstanten liegen. Durch Vergleich mit den ermittelten Domänenradien zeigt sich: Die Korrelationslänge ist nicht eine Art typischer Domänenradius, sondern viel kleiner. Dies erklärt sich aus dem gegenseitigem Durchdringen der Domänen.

4.5 Entartung

Wie im Abschnitt 4.2 gezeigt wurde, ist der Grundzustand des DAFF entartet. Die verschiedenen Grundzustände werden mit dem Algorithmus per Zufall ermittelt. Bei der Mittelung der Ordnungsparameter über verschiedene Grundzustände spielt es somit eine Rolle, mit welcher Wahrscheinlichkeit die einzelnen Zustände ermittelt werden und wie stark sie sich in ihren physikalischen Werten unterscheiden.

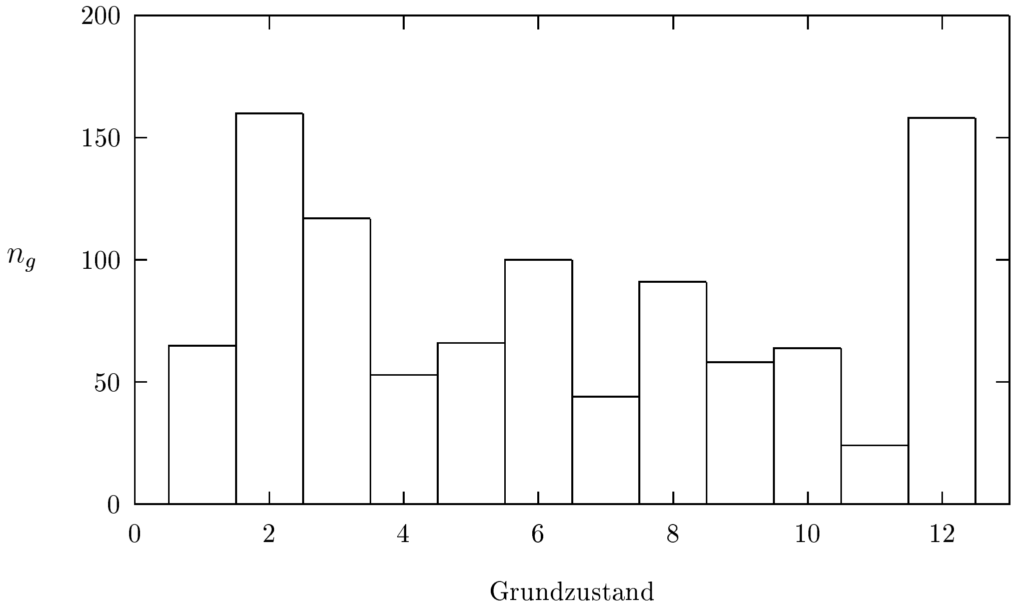

Abbildung 4.28: *Anzahl n_g wie oft ein Grundzustand bei 1000 unabhängigen Berechnungen ermittelt wurde, für DAFF ($p = 0.5$), $T = 0$, $B/J_B = 3.5$, $n = 8^3$*

Um diese Einflüsse zu untersuchen, wurden für eine ausgeloste Loch–Konfiguration eines $n = 8^3$ Systems[6] bei $B/J_B = 3.5$ 1000 mal ein Grundzustand berechnet. Wie oft welcher Grundzustand dabei ermittelt wurde, ist in Abb. 4.28 dargestellt. Der wahrscheinlichste Grundzustand wurde etwa sechs mal so häufig ermittelt wie der unwahrscheinlichste. Es stellt sich die Frage, ob die Ursache dieser Ungleichverteilung im Algorithmus oder in der ausgelosten Loch–Konfiguration zu suchen ist.

Für eine künstlich erstellte Loch-Verteilung, die genau zweifach entartet war, lieferte der Algorithmus die beiden Grundzustände mit etwa gleicher Häufigkeit (ca. 470 zu 430). Außerdem wurde die obige Untersuchung auch für andere Magnetfelder und andere Loch–Konfigurationen durchgeführt, und es ergaben sich gleichmäßigere Verteilungen. Es ist somit sicherlich ein komplexes Problem den Algorithmus so zu ändern, daß alle Grundzustände gleich wahrscheinlich werden, sofern das überhaupt möglich ist. Wahrscheinlich würde durch eine solche Änderung das Verfahren sein polynominales Zeitverhalten verlieren, womit der Algorithmus überflüssig wäre, da man die Grundzustände gleich durch Betrachtung aller möglichen Spinstellungen gewinnen könnte.

Um festzustellen, wie stark die Nicht–Gleichverteilung der Grundzustandshäufigkeiten die ermittelten physikalischen Parameter beeinflußt, wurden

[6]Für größere Systeme hätte eine solche Untersuchung zu viel Rechenzeit benötigt.

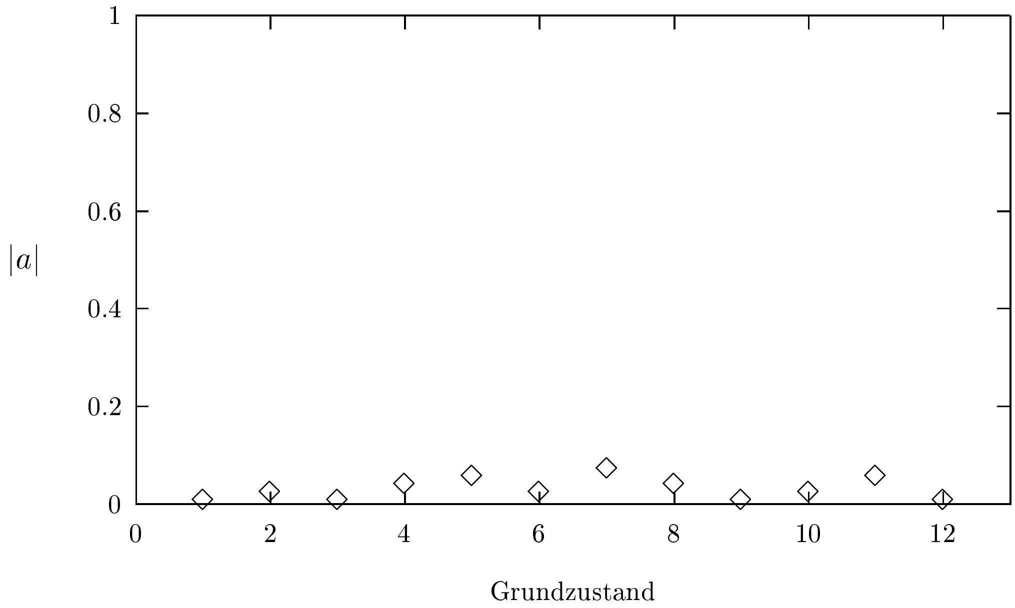

Abbildung 4.29: *Betrag des AF Ordnungsparameter für die Grundzustände des DAFF (p = 0.5), T = 0,* $B/J_B = 3.5$*,* $n = 8^3$

für die Grundzustände der AF Ordungsparameter und die Magnetisierung bestimmt. Wie man in Abb. 4.30 und 4.29 sehen kann, unterscheiden sich die Werte für die verschiedenen Spin–Konfigurationen nicht oder nur sehr wenig. Ein ähnliches Verhalten wurde auch für andere Loch–Konfigurationen bei anderen Magnetfeldern ermittelt. Man kann somit davon ausgehen, daß der Fehler, der durch die Verwendung des Algorithmus' entsteht, im Rahmen der Ungenauigkeiten liegt, die durch die Mittelung über verschiedene Loch–Konfigurationen entstehen.

Bei der Untersuchung des Entartungsgrades ergab sich außerdem, daß für nichtganzahlige Verhältnisse B/J_B die Zahl der Grundzustände klein war, aber mit dem Magnetfeld anstieg. Das läßt sich dadurch erklären, daß mit steigendem Feld die Zahl der Cluster zunimmt, somit auch die Anzahl der Möglichkeiten, wie sie sich zueinander orientieren können. Von diesen vielen Möglichkeiten führen natürlich nur wenige zur niedrigsten Energie. Für ganzahlige Werte von B/J_B ($B \neq 0$) war der Entartungsgrad so groß, daß er nicht ermittelt werden konnte. Das entspricht den Erwartungen, denn für n Spins, die sich aufgrund ihrer Zahl der Nachbarn nicht für eine Spinstellung entscheiden können, gibt es mindestens 2^n Grundzustände.

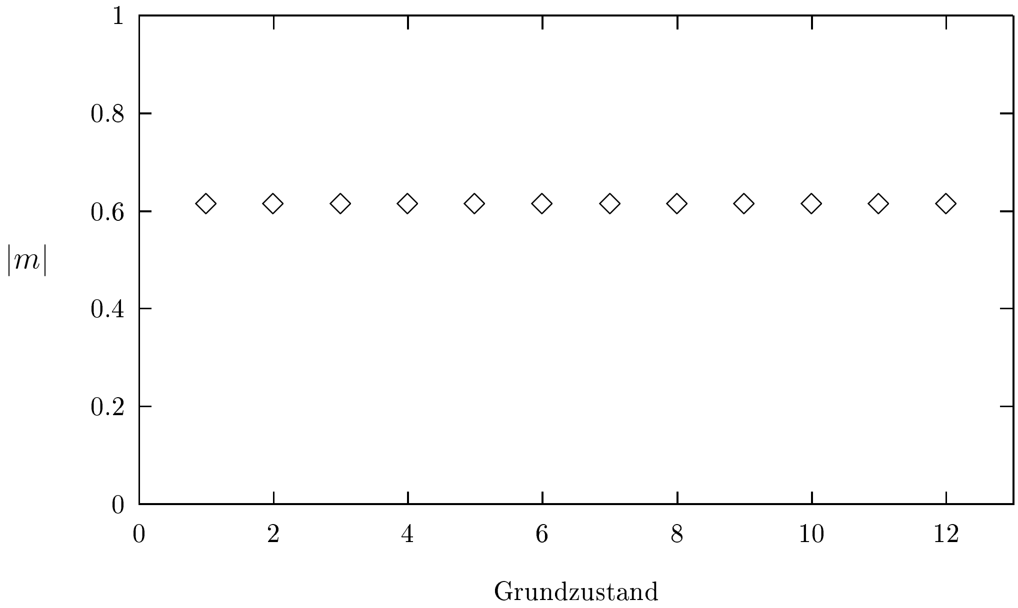

Abbildung 4.30: *Betrag der Magnetisierung* $|m|$ *für die Grundzustände des DAFF (*$p = 0.5$*),* $T = 0$*,* $B/J_B = 3.5$*,* $n = 8^3$

4.6 Das Zufallsfeldsystem

In diesem Abschnitt wird der DAFF mit einem Zufallsfeldsystem (RFIM) verglichen. In der Literatur (siehe Kap. 2) werden im wesentlichen ferromagnetische RFIMs betrachtet, bei denen die Breite der Magnetfeldverteilung die Rolle des äußeren Feldes B im Phasendiagramm übernimmt. Auf diese Weise geht aber die Lochkonzentration p nicht in die Parameter des RFIM ein.
Aus diesem Grund wird hier ein anderer Weg beschritten. Ausgangspunkt ist die Beobachtung, daß bei einem Gitterplatz mit z Nachbarn ein äußeres Feld von $B/J_B > z$ in jedem Fall dazu führt, daß sich der Spin in Richtung des B–Feldes stellt. Man kann somit die Anwesenheit von (2d-z) Löchern dadurch simulieren, daß man ein lokales zusätzliches Magnetfeld von $B_i/J_B = z$ an einem Gitterplatz i anlegt, dessen $2d$ Nachbargitterplätze alle besetzt sind. Da für einen einzelnen Gitterplatz des DAFF die Zahl der nichtbesetzten Nachbarn $(2d, p)$–binominalverteilt ist, wird deshalb die entsprechende diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Zufallsfeld verwendet:

$$P(B_i/J_B = z) = \binom{2d}{2d-z} p^{2d-z}(1-p)^z \tag{4.23}$$

Wenn man nun diese Feldverteilung mit einem *Antiferromagneten* verwendet (RFAFF = **r**andom **f**ield **a**nti**f**erromagnet in a **f**ield), müßten sich Ähnlichkeiten zum DAFF zeigen. Völlig gleichwertig können beide Systeme allerdings nicht

sein, weil im RFAFF die Zufallsfelder voneinander unabhängig sind, während im DAFF ein Loch alle seine Nachbarn beeinflußt und so die lokalen Felder gekoppelt sind.
Im folgenden werden Ergebnisse für den RFAFF mit der angegebenen Verteilung vorgestellt und mit den Werten des DAFF verglichen. Aus Rechenzeitgründen wurden nur für kleinere Systeme mit $n = 16^3$ Gitterplätzen zwei Grundzustände für jeweils 50 Magnetfeldkonfigurationen berechnet.

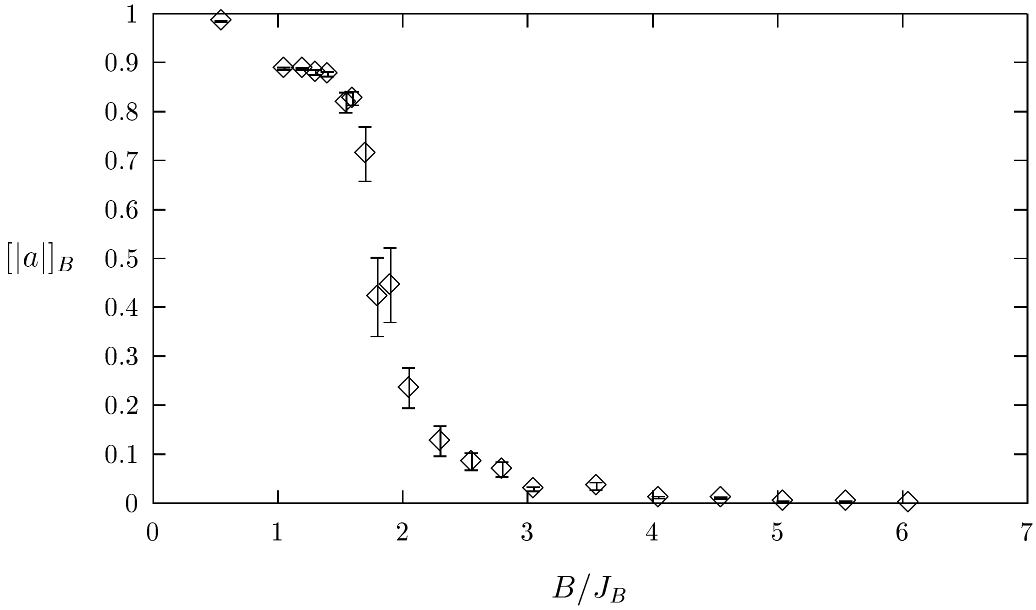

Abbildung 4.31: *AF Ordnungsparameter $a(B)$ für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$), $T = 0$, $n = 16^3$*

Der antiferromagnetische Ordnungsparameter des RFAFF ist in Abb. 4.31 dargestellt. Deutlich ist der Übergang vom AF zum Domänenzustand (vergl. Abb. 4.1) auszumachen.
Dieser Übergang zeigt sich auch in der AF Suszeptibilität (Abb. 4.32). Allerdings ist er im Vergleich zum DAFF zu etwas höheren Magnetfeldern (siehe Abb. 4.3) verschoben. Besonders interessant wäre es, das Skalenverhalten des RFAFF mit dem des DAFF zu vergleichen. Aus Zeitgründen war das nicht mehr möglich.
Die Magnetisierung (Abb. 4.33) zeigt das erwartete Verhalten: Für ganzzahlige Werte von B/J_B ergeben sich Sprünge. Die Kurve ähnelt der des DAFF (Abb. 4.6).
Um die Struktur des Domänenzustandes des RFAFF zu untersuchen, wurde die Abhängigkeit des Domänenradius' R_D vom Volumen der Domänen V_D bei $B/J_B = 3.05$ ermittelt (Abb. 4.34). Für kleine Domänen ergibt sich die Abhängigkeit:

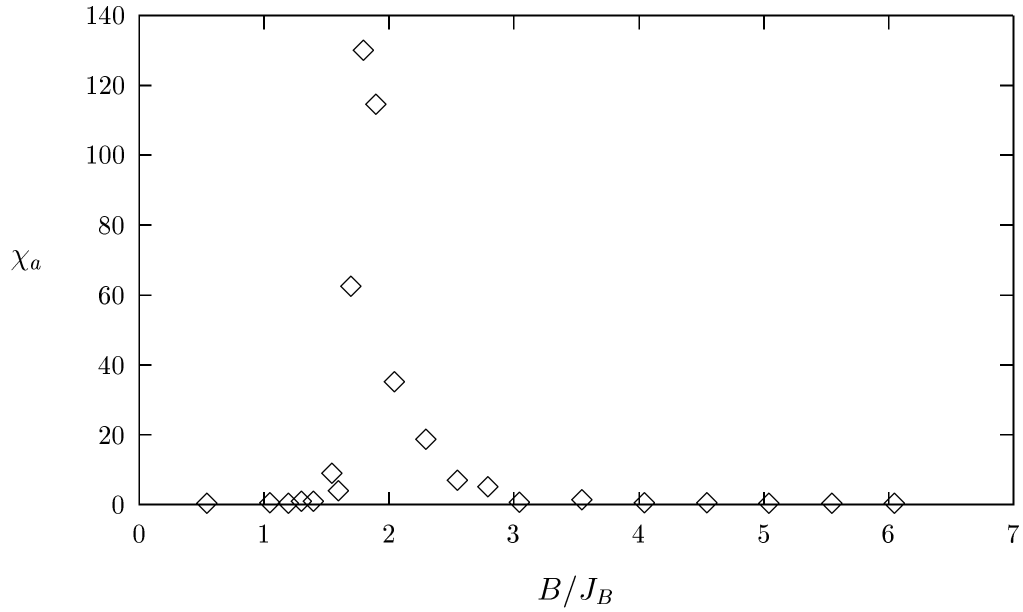

Abbildung 4.32: *Suszeptibilität $\chi_a(B)$ für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$), $T = 0$, $n = 16^3$*

$$R_D \sim V_D^{0.45\pm0.06} \tag{4.24}$$

Dieses Ergebnis ist mit dem Wert für den DAFF ($1/D_\nu = 0.42 \pm 0.01$) vergleichbar. Allerdings ist die Verteilung der Domänengrößen unterschiedlich: Während beim DAFF „alle" Größen von Domänen vorkommen (siehe Abb. 4.17), gibt es im Fall des RFAFF eine „Lücke".

Auch bei der Abhängigkeit der Domänenoberfläche vom Volumen ergibt sich beim RFAFF ein exponentielles Verhalten (ohne Abb.). Der Exponent ($1/D_{\nu f} = 0.94 \pm 0.01$) entspricht dem Wert für den verdünnten AF ($1/D_{\nu f} = 0.97 \pm 0.01$). Das Moment M_D der Domänen als Funktion des Volumens ist in Abb. 4.35 dargestellt. Es ergibt sich hier, ebenso wie bei der Wandenergie E_D (ohne Abb.), eine exponentielle Abhängigkeit:

$$M_D \sim V_D^{0.96\pm0.01} \tag{4.25}$$
$$E_D \sim V_D^{0.94\pm0.01} \tag{4.26}$$

Die entsprechenden Exponenten für den DAFF lauteten 0.94 ± 0.01 und 0.97 ± 0.01.

In Abb. 4.36 sind die Volumina von größter und zweitgrößter Domäne in Abhängigkeit vom homogenen Magnetfeld B dargestellt. Das Verhalten ähnelt

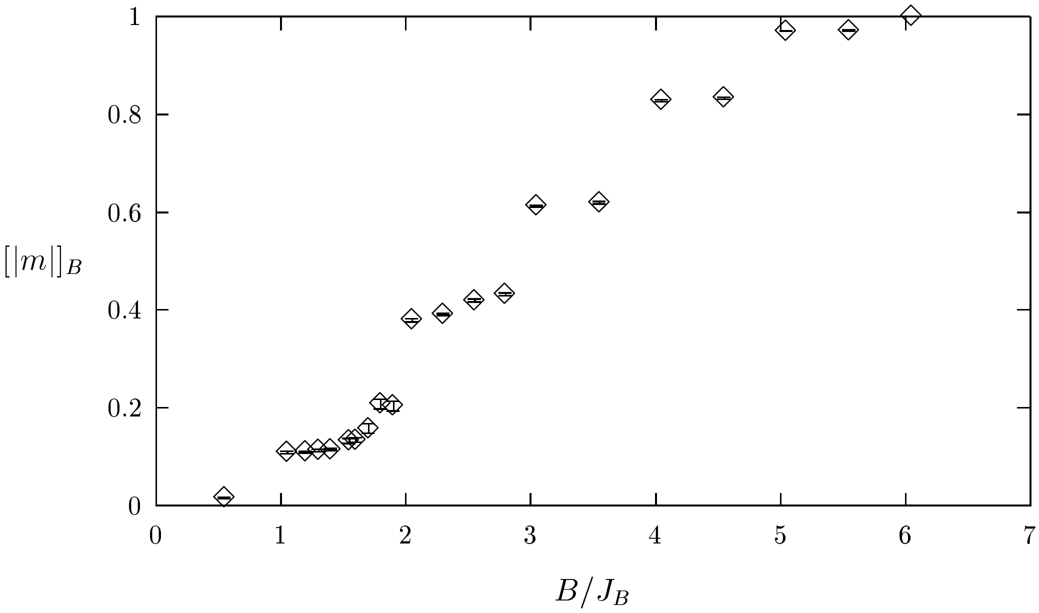

Abbildung 4.33: *Magnetisierung $m(B)$ für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$),* $T = 0$, $n = 16^3$

dem des DAFF (Abb. 4.24) allerding ist das Feld, an dem sich die Volumina annähern, wiederum nach rechts verschoben. Außerdem gleichen sich V_{D1} und V_{D2} stärker anneinander an. Der sprunghafte Abfall der Domänengrößen bei $B/J_B = 3$ ist bei RFAFF nicht so groß. Das ist die Ursache dafür, daß Domänen mit mittleren Größen nicht vorkommen: Die meisten Spins gehören noch zu den großen perkulierenden Domänen. Bei $B/J_B = 4$ ist der Sprung dafür um so größer. Es gibt danach nur sehr kleine Domänen.
Insgesamt zeigt sich, daß es große Ähnlichkeiten zwischen dem DAFF und dem RFAFF mit Binominalverteilung gibt, die sogar bis zur Übereinstimmung der geometrischen Exponenten der Domänen gehen.

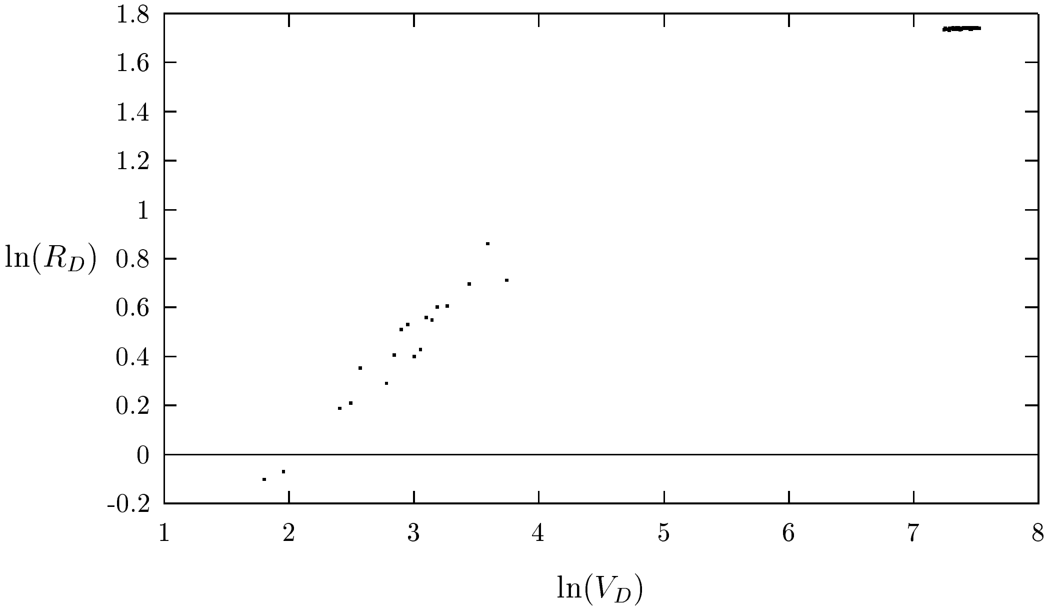

Abbildung 4.34: *Domänenradius über Volumen für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 16^3$*

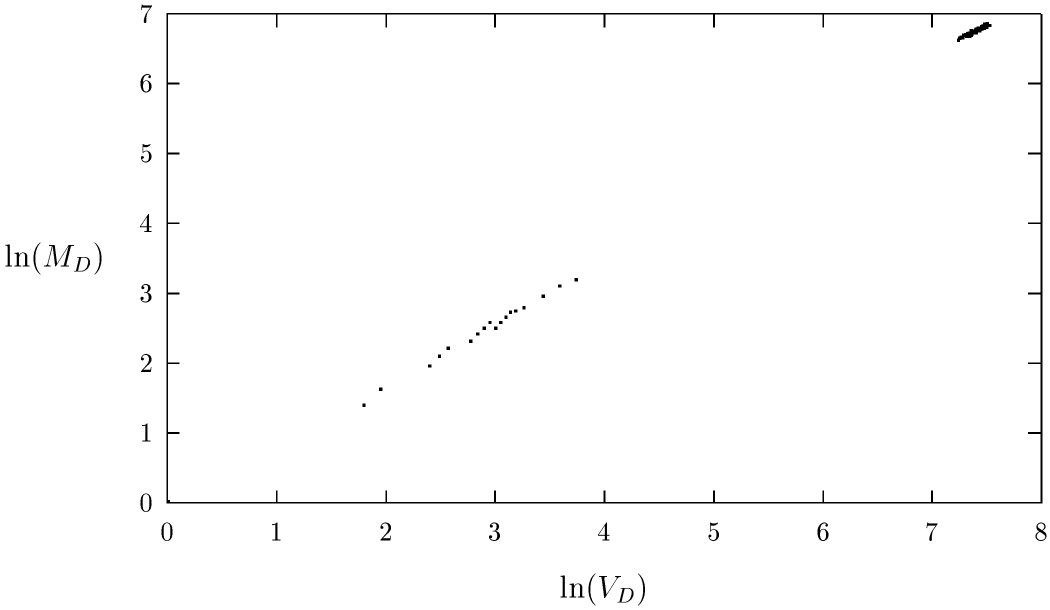

Abbildung 4.35: *magnetisches Moment der Domänen über Volumen für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$) bei $B/J_B = 3.05$, $T = 0$, $n = 16^3$*

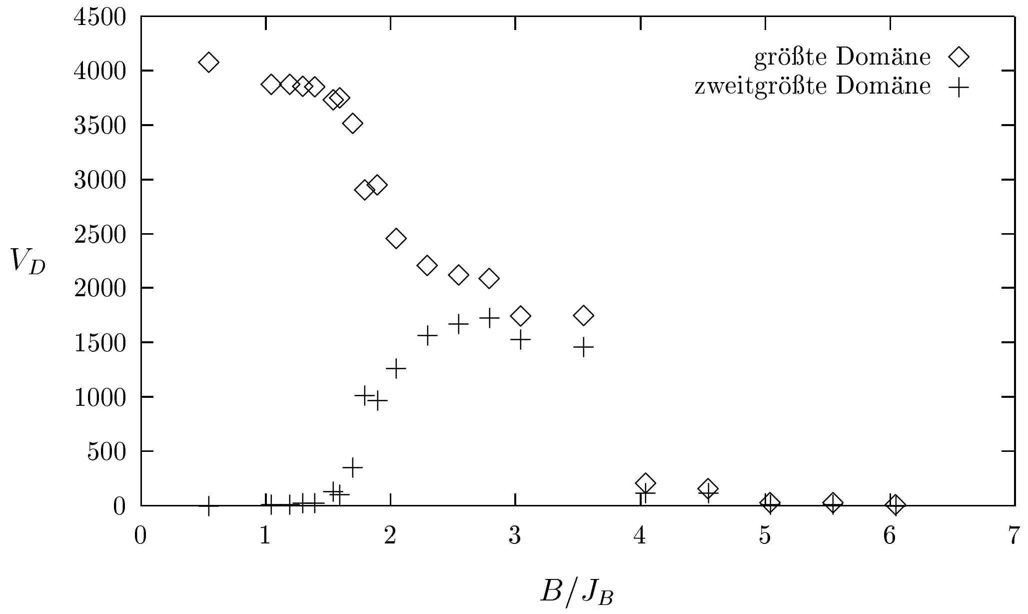

Abbildung 4.36: *Volumen der größten und der zweitgrößten Domäne über dem Magnetfeld ($T = 0$) für RFAFF (binominalverteilt $p = 0.5$), $n = 16^3$*

Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Algorithmus entwickelt, der es ermöglicht, nach einem Zufallsprinzip beliebige Grundzustände von verdünnten Antiferromagneten mit einfach–kubischer Gitterstruktur zu berechnen. Das Verfahren ist auch auf Zufallsfeldsysteme anwendbar. Wichtige Bestandteile des Verfahrens sind die Transformation des Gitters in einen Graphen und die Anwendung des Ford–Fulkerson Algorithmus zur Berechnung von maximalen Flüssen. Die Zeitkomplexität der Grundzustandsberechnung hängt im wesentlichen quadratisch von der Gittergröße ab.
Es wurde die Existenz eines Domänenzustandes nachgewiesen. Dieser Zustand ist durch eine fraktale Geometrie der Domänen gekennzeichnet. Durch Betrachtung der geometrischen Eigenschaften der Domänen lassen sich keine Aussagen über die Existenz einer AF Fernordnung machen. Die Korrelationslänge im Domänenzustand ist nur wenige Gitterkonstanten groß und entspricht auch im Skalenverhalten nicht einer charakteristischen Länge für den Übergang. Somit konnten durch exakte Berechnung der Grundzustände die Aussagen bestätigt werden, welche in [Nowak92] mit Hilfe von Monte Carlo–Simulationen gewonnen wurden. Der Wert für den Exponenten der Korrelationslänge als Funktion des Feldes konnte aber nicht bestätigt werden.
Die kritische Feldstärke wurde durch Skalenanalyse zu $B_c/J_B = 1.08$ ermittelt. Es konnten Werte für die kritischen Exponenten der charakteristischen Länge ($\bar{\nu} = 0.6$) und für die Suszeptibilität des AF Ordnungsparameters ($\bar{\gamma} = 1.75$) abgeschätzt werden.
Durch Berechnung der Oberflächenenergie von künstlichen Domänenwänden, welche über feste Randspins erzwungen wurden, konnte gezeigt werden, daß im Domänenzustand keine AF Fernordnung existiert.
Bei der Berechnung der Überlapps konnten das Ergebnis aus [Staats93], welches durch Monte Carlo–Simulation gewonnen wurden, qualitativ bestätigt werden. Durch Betrachtung des Skalenverhaltens der Überlappverteilung wurde gezeigt, daß der Grundzustand im Domänenzustand hochentartet ist, insofern also Spinglasverhalten zeigt. Allerdings ist die Form der Verteilung nur bedingt mit der

Verteilung vergleichbar, welche für Spingläser sowohl theoretisch als auch durch Simulation in der Spinglasphase gefunden wurde. In der Nähe des Übergangs in den Domänenzustand traten allerdings größere Ähnlichkeiten auf, wobei allerdings nicht klar ist, ob es sich um einen Effekt der endlichen Gittergröße handelt.
Es konnte gezeigt werden, daß ein antiferromagnetisches Zufallsfeldsystem mit binominaler Verteilung des lokalen Feldes für die einfachen Ordnungsparameter und das geometrische Verhalten der Domänen mit dem DAFF übereinstimmt. Allerdings unterscheiden sich die Größenverteilungen der Domänen für die beiden Systeme.
Es muß angefügt werden, daß aufgrund der begrenzten zur Verfügung stehenden Rechenzeiten nur kleine Systeme betrachtet werden konnten. Außerdem wurden die Mittelwerte nur aus geringen Stichproben bis 200 Werten gewonnen. Man muß also insbesondere bei der Skalananalyse mit großen Ungenauigkeiten rechnen. Des weiteren konnte ein Einfluß des Verfahrens auf die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Grundzustand auftritt, nicht ausgeschlossen werden. Allerdings fallen die daraus resultierenden Ungenauigkeiten gegenüber den oben genannten nicht ins Gewicht.
Es wäre somit wünschenswert, bei Verfügung gesteigerter Rechenleistung, größere Systeme noch genauer zu untersuchen. Insbesonders wäre ein Vergleich des Skalenverhaltens von DAFF und RFAFF (und anderen Zufallsfeldsystemen) interessant.

Anhang A

Berechnung der Suszeptibilität

Für den Ising–Hamiltonian aus Gl. 2.4 ergibt sich mit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial B}\exp(-\beta H) &= \frac{\partial}{\partial B}\exp(\beta\sum_{i,j=1}^{N}J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \beta B\sum_{i=1}^{N}\sigma_i) \\
&= \beta\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\exp(-\beta H) \qquad \text{(A.1)}
\end{aligned}$$

für die Suszeptibilität:

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{\partial}{\partial B}\langle\sigma\rangle \\
&= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial B}Z^{-1}\mathrm{Sp}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\exp(-\beta H) \\
&= \frac{1}{N}\left(Z^{-1}\mathrm{Sp}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\frac{\partial}{\partial B}\exp(-\beta H) - Z^{-2}\frac{\partial Z}{\partial B}(\mathrm{Sp}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\exp(-\beta H))\right) \\
&= \frac{1}{N}\beta\left(Z^{-1}\mathrm{Sp}(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i)^2\exp(-\beta H) - Z^{-2}(\mathrm{Sp}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\exp(-\beta H))^2\right) \\
&= N\beta(\langle\sigma^2\rangle - \langle\sigma\rangle^2) \qquad \text{(A.2)}
\end{aligned}$$

Anhang B

Umrechnung der Kapazität eines Schnittes

Mit folgenden Umformungen kann man in dem Ausdruck für die Kapazität eines Schnittes, welcher durch einen Vektor X repräsentiert wird, die konstanten Anteile ausrechnen: Es werden $x_0 = 1$ und $x_{n+1} = 0$ eingesetzt:

$$\begin{aligned}
c(X) &= \sum_{i,j=0}^{n+1} c(i,j)x_i(1-x_j) \\
&= \sum_{i=0}^{n+1}[c(i,0)x_i \underbrace{(1-x_0)}_{0} + c(i,n+1)x_i \underbrace{(1-x_{n+1})}_{1} + \sum_{j=1}^{n} c(i,j)x_i(1-x_j)] \\
&= c(0,n+1)\underbrace{x_0}_{1} + \sum_{j=1}^{n} c(0,j)\underbrace{x_0}_{1}(1-x_j) + \\
&\quad c(n+1,n+1)\underbrace{x_{n+1}}_{0} + \sum_{j=1}^{n} c(n+1,j)\underbrace{x_{n+1}}_{0}(1-x_j) + \\
&\quad \sum_{i=1}^{n}[c(i,n+1)x_i + \sum_{j=1}^{n} c(i,j)x_i(1-x_j)] \\
&= -\sum_{i,j=1}^{n} c(i,j)x_i x_j + \sum_{i=1}^{n}[c(i,n+1) - c(0,i) + \sum_{j=1}^{n} c(i,j)]x_i + \\
&\quad c(0,n+1) + \sum_{j=1}^{n} c(0,j) \qquad \text{(B.1)}
\end{aligned}$$

Anhang C

Transformation der Hamiltonfunktion

Durch Einsetzen von $\sigma_i = (2x_i - 1)t(i)$ mit $t(i)t(j) = -1$ für $j \in N(i)$ ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{\langle i,j \rangle} J_B \epsilon_i \epsilon_j \sigma_i \sigma_j - \sum_i B_i \epsilon_i \sigma_i \\
&= \sum_{i,j=1}^{n} J \delta_{j \in N(i)} \epsilon_i \epsilon_j (2x_i - 1)(2x_j - 1) t(i) t(j) - \sum_{i=1}^{n} B_i \epsilon_i (2x_i - 1) t(i) \\
&= \sum_{i,j=1}^{n} J \delta_{j \in N(i)} \epsilon_i \epsilon_j (4x_i x_j - 2x_i - 2x_j + 1)(-1) - \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i B_i t(i)(2x_i - 1) \\
&= -\sum_{i,j=1}^{n} [4J \epsilon_i \epsilon_j \delta_{j \in N(i)}] x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i [4J \sum_{j \in N(i)} \epsilon_j - 2B_i t(i)] x_i \\
&\quad - J \sum_{i,j=1}^{n} \epsilon_i \epsilon_j \delta_{j \in N(i)} + \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i B_i t(i) \qquad \text{(C.1)}
\end{aligned}
$$

Anhang D

Algorithmus zur Bestimmung von Domänen

Der Algorithmus basiert auf dem in [Hoshen76] geschilderten Verfahren. Die Idee ist, das Gitter einmal zu durchlaufen und dabei immer dann, wenn zwei benachbarte Spins entgegengesetzt stehen, d.h. ihre Bindung gesättigt ist, die Domänen, in denen sie enthalten sind, zu einer Domäne zu verschmelzen. Im folgenden ist n die Zahl der Gitterplätze und σ_i der Wert des Spins am Gitterplatz i. Es gilt $\epsilon_i = 0$, falls der Gitterplatz leer ist, sonst $\epsilon_i = 1$.

Algorithmus domaen(n, $\{\sigma_i\}$, $\{\epsilon_i\}$)

1. Initialisiere für jeden Spin ($\epsilon_i \neq 0$) eine Domäne der Größe 1.
2. Für jeden Gitterplatz $i \in \{1, \ldots, n\}$ führe aus:
3.   Für jeden Gitterplatz $j \in N(i)$ führe aus:
4.   Falls $\epsilon_i \epsilon_j \sigma_i \sigma_j = -1$:
5.   Verschmelze die Domänen von i und j.

Bei der Implementierung des Algorithmus' wurden die Domänen durch Listen repräsentiert. Jedes Listenelement entspricht einem Gitterplatz. Das Verschmelzen der Domänen wird durch Aneinanderhängen der jeweiligen Listen erreicht. Das darf allerding nicht erfolgen, falls zwei Spins sich bereits in derselben Domäne befinden. Um diesen Test schnell durchzuführen, wird für jeden Gitterplatz ein Zeiger auf seine Domäne gespeichert. Die Zeiger müssen für die Gitterplätze der angehängten Liste neu gesetzt werden. Damit dieser Prozeß schnell erfolgt, wird immer die kürzere Liste an die längere gehängt.

Literaturverzeichnis

[Almeid78] J.R.L. de Almeida, D.J. Thouless, Stability of the Sherrington–Kirpatrick solution, J.Phys.A 11(1978), S. 983–990

[Amit78] D.J. Amit, Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena, World Scientific, Singapur 1978

[Bhatt85] R.N. Bhatt, A.P. Young, Search for a Transition in the Three–Dimensional $\pm$ J Ising Spin–Glass, Phys.Rev.Lett. 54(1985), S. 924–927

[Caracc90] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Patarnello, N. Sourlas, Low temperature behaviour of 3–D spin glasses in a magnetic field, J.Phys.France 51(1990), S. 1877–1895

[Cardy84] J.L. Cardy, Random–Field effects in site–disordered Ising antiferromagnets, Phys.Rev.B 29(1984), S. 505–507

[Claibo90] J.D. Claiborne, Mathematical preliminaries for computer networking, John Wiley & Sons, New York 1990

[Coles78] B.R. Coles, B.V.B. Sarkissian, R.H. Taylor, Phil.Mag. 37(1978), S. 489ff

[Cowley84] R.A. Cowley, H. Yoshizawa, G. Shirane, R.J. Birgeneau, Random Fields Effects in the Three Dimensional Ising Magnet: $Fe_xZn_{1-x}F_2$, Z.Phys.B 58(1984), S. 15–30

[Domb74] C. Domb, M.S. Green, Phase transitions and critical phenomena 3, Academic Press, London 1974

[Edward75] S.F. Edwards, P.W. Anderson, Theory of spin glasses, J.Phys.F 5(1975), S. 965–974

[Fische91] K.H. Fischer, J.A. Hertz, Spin glasses, Cambridge University Press, Cambridge 1991

[Fishma79] S. Fishman, A. Aharony, Random field effects in disordered anisotropic antiferromagnets, J.Phys.C 12(1979), S. L729–L733

[Ford56] L.R. Ford, D.R. Fulkerson, Maximal Flow Through a Network, Canadian J. Math. 8(1956), S. 399–404

[Grest86] G.S. Grest, C.M. Soukoulis, Comparative Monte Carlo and mean–field studies of random–field Ising systems, Phys.Rev.B 33(1986), S. 7659–7674

[Hammer65] P.L. Hammer (Ivanescu), Some Network Flow Problems Solved with Pseudo–Boolean Programming, Operations Research 13(1965), S. 388–399

[Hoshen76] J. Hoshen, R. Kopelman, Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm, Phys.Rev.B. 14(1976), S. 3438–3445

[Imry75] Y. Imry, S–k. Ma, Random–Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry, Phys.Rev.Lett. 35(1975), S. 1399–1401

[Ising25] E. Ising, Z.Phys. 31(1925), S. 253ff

[Knödel69] W. Knödel, Graphentheoretische Methoden und ihre Anwendung, Springer, Berlin 1969

[Malett79] H. Maletta, P. Convert, Phys.Rev.Lett. 42(1979), S. 108ff

[Mezard87] M. Mezard, G. Parisi, M.A. Virasoro, Spin glass theory and beyond, World Scientific, Singapur 1987

[Monten91] F.C. Montenegro, A.R. King, V. Jaccarino, Random–field–induced spin–glass–like behavior in the diluted Ising antiferromagnet $Fe_{0.31}Zn_{0.69}F_2$, Phys.Rev.B 44(1991), S. 2155–2160

[Mourit84] O.G. Mouritsen, Computer Studies of Phase Transitions an Critical Phenomena, Springer, Berlin 1984

[Natter89] T. Nattermann, P. Rujan, Random Field and other Systems dominated by Disorder Fluctuations, J.Mod.Phys.B 3(1989), S. 1597–1654

[Noltin86] W. Nolting, Quantentheorie des Magnetismus, B.G. Teubner, Stuttgart 1986

[Nowak91] U. Nowak, K.D. Usadel, Diluted antiferromagnets in a magnetic field: A fractal–domain state with spin–glass behavior, Phys.Rev.B 44(1991), S. 7426–7432.

[Nowak92] U. Nowak, Computer–Simulation verdünnter Ising–Antiferromagnete, Dissertation am Fachbereich Physik–Technologie der Universität–Gesamthochschule Duisburg 1992

[Ogiels86] A.T. Ogielski, Integer Optimization an Zero–Temperature Fixed Point in Ising Random–Field Systems, Phys.Rev.Lett. 57(1986), S. 1251–1254

[Onsage44] L. Onsager, Phys.Rev. 65(1944), S. 117ff

[Parisi80] G. Parisi, The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1, J.Phys.A 13(1980), S. 1101–1112

[Picard75] J.P. Picard, H.D. Ratliff, Minumum Cuts and Related Problems, Networks 5(1975), S. 357–370

[Sherri75] D. Sherrington, S. Kirkpatrick, Solvable Modell of a Spin–Glass, Phys.Rev.Lett. 35(1975), S. 1792–1796

[Staats93] M. Staats, Monte Carlo Simulation verdünnter Antiferromagnete, Diplomarbeit am Fachbereich Physik–Technologie der Universität–Gesamthochschule Duisburg 1993

[Usadel90] K.D. Usadel, Theoretische Physik V, Vorlesung an der Universität–Gesamthochschule Duisburg 1990

[Usadel91] K.D. Usadel, Phasenübergänge, Spezialvorlesung an der Universität–Gesamthochschule Duisburg 1991

[Usadel92] K.D. Usadel, U. Nowak, Diluted antiferromagnets in a magnetic field: evidence for a spin glass phase, J.Magn.Magn. 104–107(1992), S. 179–180

[Young83] A.P. Young, Direct Determination of the Probability Distribution for the Spin–Glass Order Parameter, Phys.Rev.Lett. 51(1983), S. 1206–1209

[Young85] A.P. Young, Numerical simulations on spin glasses, J.Appl.Phys. 57(1985), S. 3361–3365

Ich versichere, daß ich dieses Diplomarbeit ausschließlich mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Duisburg, den