



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

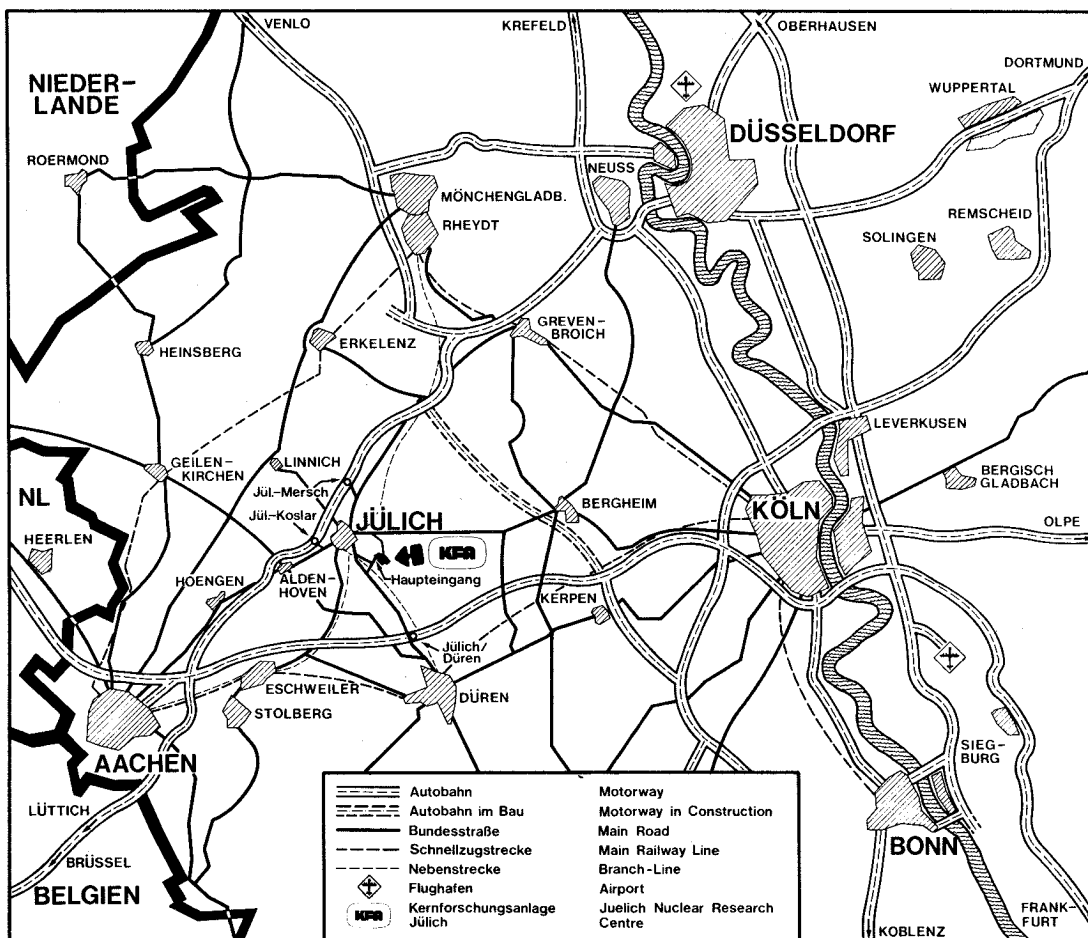
Institut für Festkörperforschung

**Untersuchungen zur statistischen
Mechanik von Spingläsern**

von

J. Reger

**Jül - 1981
März 1985
ISSN 0366-0885**



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 1981

Institut für Festkörperforschung Jül – 1981

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 024 61/610 · Telex: 833556-0 kf d

Untersuchungen zur statistischen Mechanik von Spingläsern

von

J. Reger

D 38 (Diss. Uni. Köln)

ABSTRACT

In this theses we investigate static and dynamic properties of Ising spin-glasses with short-range interactions.

In **Chapter I** the Glauber model is studied for symmetric distributions ($\pm J$ and gaussian) of the nearest-neighbour interaction, including a magnetic field. For small clusters (closed rings of bonds) the complex magnetic susceptibility $\chi(\omega)$ and time-dependent remanent magnetization $m(t)$ are found exactly for given bond configurations by diagonalization of the Liouville operator. We analyse the results along the lines of corresponding experimental work, studying the frequency dependence of the peak in $\chi(\omega)$, the $T \cdot \ln(t)$ - scaling of $m(t)$ for low temperatures, and the decomposition of $\chi(\omega)$ into a spectrum of relaxation times. Many results are strikingly similar to experimental data for systems such as the holmium-borate "spin-glass" or the superparamagnet $\text{Eu}_{0.05}\text{Sr}_{0.95}\text{S}$.

In **Chapter II** the magnetization of nearest-neighbour spin-glasses is investigated at zero temperature as a function of magnetic field, following a recent method for the study of the free-energy surface of spin-glasses. Comparison with Monte-Carlo simulations performed for the same samples shows that this mean-field method does not yield quantitatively reliable predictions; it finds metastable minima of the free-energy surface rather than the true ground states.

In **Chapter III** we develop a technique to derive a systematic high temperature series expansion for dynamic correlations of a random Ising model. Results are presented for the J model in two dimensions. Relaxation times of dynamic quantities such as the ferromagnetic susceptibility, the Edwards-Anderson order parameter and susceptibility are calculated together with the corresponding static quantities. The ferromagnetic phase transition is studied as a function of concentration of the antiferromagnetic bonds. A phase transition is found at $T = 0$ in the spin-glass regime. In particular the relaxation time τ_{EA} obeys an Arrhenius law $\tau_{\text{EA}} \sim \exp(\Delta E/T)$ with a finite energy barrier ΔE as $T \rightarrow 0$.

INHALTSVERZEICHNIS

I. EINLEITUNG.....	1
II. DYNAMIK IN 1-d SPINGLASMODELLEN	
1. Einleitung.....	14
2. Die Bewegungsgleichungen.....	18
3. $\pm J$ - Modell.....	25
3.1. Ohne konstantes äußeres Feld.....	26
3.2. In konstantem äußeren Feld.....	36
4. Gauß'sches Modell.....	38
4.1. Ohne konstantes äußeres Feld.....	38
4.2. In konstantem äußeren Feld.....	49
5. Zusammenfassung.....	53
III. ITERATIVE MOLEKULARFELD-METHODE	
1. Problemstellung.....	55
2. Numerisches Verfahren, Resultate.....	57
3. Zusammenfassung.....	65
IV. HOCHTEMPERATURENTWICKLUNG FÜR DIE	
 DYNAMIK VON SPINGLÄSERN	
1. Problemstellung.....	68
2. Formulierung der Methode.....	73
3. Resultate.....	82
3.1. Analyse von Potenzreihen.....	83
3.1.1. "Ratio method".....	84
3.1.2. Padé Approximanten.....	85
3.2. Unsymmetrischer Fall.....	87
3.2.1. Der Ferromagnetische Übergang.....	88
3.2.2. Der Spinglasübergang.....	100
3.2.2.1. Analyse der Spinglas-Relaxationszeit.....	105

3.2.2.2. Analyse	
der Spinglas-Suszeptibilität	111
3.2.3. Bemerkungen zu dem Exponenten	
der Autokorrelations-Funktion	
im Ferromagneten.....	112
3.3. Symmetrischer Fall.....	114
4. Technische Aspekte.....	118
4.1. Die Methode.....	118
4.2. Implementierung der Methode.....	121
4.3. Testmöglichkeiten.....	124
4.4. Variablentransformationen.....	125
5. Zusammenfassung.....	127

LITERATURVERZEICHNIS.....	129
----------------------------------	------------

Koeffizienten der Hochtemperaturentwicklung

für die ferromagnetische Relaxationszeit.....	89
für die ferromagnetische Suszeptibilität.....	90
für die Relaxationszeit des Edwards-Anderson	
Ordnungsparameters.....	101
für die Edwards-Anderson Relaxationszeit.....	102
für die Edwards-Anderson Suszeptibilität.....	103
für die Spinglas-Relaxationszeiten bei $p=1/2$	114

I.

EINLEITUNG

Die Festkörperforschung des XX. Jahrhunderts war auf dem Gebiet der Physik der perfekten Kristalle recht erfolgreich. Nachdem das physikalische Verhalten und alle wichtigen Eigenschaften dieser geordneten Systeme erforscht und verstanden wurden, hat die Physik ungeordneter Systeme in den letzten Jahrzehnten immer mehr an Interesse gewonnen. Das gilt sowohl für theoretische als auch für experimentelle Untersuchungen.

Man kann zwei Arten von Unordnung unterscheiden /1,2/:

1. **Topologische Unordnung:** Die Atome bauen kein periodisches Gitter auf (amorphe Materien).
2. **Konstitutionelle Unordnung:** Der Kristall ist eine Mischung von zwei oder mehr verschiedenen Sorten von Atomen (Legierungen).

Wenn die Unordnung mit den anderen Freiheitsgraden des Systems im thermischen Gleichgewicht ist, d.h. sich mit der Temperatur gemäß den Gesetzen der statistischen Mechanik ändert, wird sie "annealed" oder **thermisch** genannt.

Wenn aber die Unordnung das Gleichgewicht noch nicht erreicht hat, weil die Relaxationszeit an der Zeitskala der Experimente gemessen zu groß ist, erscheint sie als fest vorgegeben, und wird daher "quenched" oder **eingefroren** genannt. Auch dieser Fall ist oft experimentell realisierbar. Die Frage, welchen Einfluß die Unordnung auf Phasenübergänge hat, wurde in vielen Untersuchungen, vor allem in den letz-

I. Einleitung

ten Jahren, diskutiert. Vom theoretischen Standpunkt aus stellt die eingefrorene Unordnung ein schwierig zu behandelndes Problem dar /3/, während die thermische Unordnung recht gut verstanden werden konnte /4/.

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit Fragen des magnetischen Phasenübergangs in Substanzen mit eingefrorener konstitutioneller Unordnung. In vielen Systemen beobachtet man bei tiefen Temperaturen einen von der üblichen geordneten Phase sehr verschiedenen Zustand, den man als **Spinglas-Zustand** bezeichnet. Die entsprechenden Systeme sind die **Spingläser**.

Konventionelle Spingläser sind verdünnte magnetische Legierungen, wie z.B. AuFe oder CuMn (die ersten Systeme, die als Spinglas eingestuft wurden), mit konkurrierenden Wechselwirkungen (ferro- und antiferromagnetische oder nur antiferromagnetische). In diesen Edelmetall-3d-Übergangsmetall-Systemen kann die Konzentration des Übergangsmetalls zwischen etwa 0.1% und 10% liegen, darüber wird die Legierung ferro- (AuFe) oder antiferromagnetisch (CuMn).

Viele der Spinglas-Eigenschaften sind universell. Neben den genannten metallischen Kristallen zeigen auch amorphe Metalle (AlGd) und Isolatoren ((EuSr)S) Spinglas-Verhalten. Analoge Phänomene findet man auch in Molekulkristallen (z.B. verdünntes NH_4Cl).

Die charakteristischen physikalischen Eigenschaften /5/ der Spingläser sind folgende:

1. Die Wechselstrom- /6/ (wie auch die Gleichstrom- im Grenzfall Magnetfeld nach Null /7/) Suszeptibilität zeigt eine scharfe Spitze bei einer "Einfriertemperatur" T_f .
2. Diese Spitze wird bereits in einem schwachen äußeren Feld stark abgerundet und hängt von der Konzentration der Verunreinigungen ab.

I. Einleitung

3. In Neutronenstreu-Experimenten findet man keine Bragg-Peaks /8,9/, die eine langreichweitige magnetische Ordnung zeigen würden.
4. Wenn die Magnetisierung nach Ausschalten eines Magnetfeldes über längere Zeit (Stunden) gemessen wird, beobachtet man eine nur langsam verschwindende Restmagnetisierung /10,11/.
5. Die Mössbauer-Linie zeigt eine Aufspaltung bei etwa T_f /12,13,14/, was nahelegen würde, daß die Spins unterhalb von T_f einfrieren und daher (quasi)statische innere Felder aufbauen.
6. Myonenpräzession /15/ und Hall-Effekt Experimente /16/ zeigen eine Anomalie bei T_f .
7. Die spezifische Wärme $C(T)$ zeigt keine Anomalie bei T_f (kein Zeichen eines Ordnungsprozesses), sondern einen linearen Anstieg bei niedrigen Temperaturen und ein breites Maximum weit oberhalb von T_f /17,18/.

Ein ähnliches lineares Verhalten in $C(T)$ in amorphen nicht-magnetischen Systemen wurde auf phänomenologischer Ebene mit der Existenz von "Zwei-Niveau Systemen" erklärt /19/. Dieser Mechanismus konnte zwar die langsame Relaxation der irreversiblen Magnetisierung (s. später) für Spingläser erklären, nicht jedoch die lineare spezifische Wärme. Die Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten in einem metallischen Spinglas ist die Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY)-Wechselwirkung, die viele der obigen Eigenschaften erklärt /20,21/. Diese ist eine schnell oszillierende Funktion, die mit dem Abstand zweier Spins wie r^{-3} abnimmt. Es wurde zuerst vermutet, daß die lange Reichweite der Wechselwirkung das Entscheidende ist /10/, dem ist aber nicht so, die Zufallsverteilung der Wechselwirkungskonstanten ist wichtig /22/. Sie kommt dadurch zustande, daß das Vorzeichen der Kopplungen stark oszilliert, und der Abstand zweier Spins wegen der Verunreinigungen (nicht-magnetische Atome) einer Zufallsverteilung unterliegt. (Zu diesem Punkt kommen wir noch zurück.)

I. Einleitung

Es ist zum Erhalten von Spinglasverhalten unentbehrlich, daß diese Zufallsverteilung zu "Frustration" führt /23/. Ein System ist dann frustriert, wenn im Grundzustand nicht alle seiner Kopplungen gleichzeitig befriedigt werden können (s. das Beispiel eines Ising-Spin-Dreiecks mit antiferromagnetischen Kopplungen). Frustration impliziert eine hohe Entartung des Grundzustands. Weil die statistische Mechanik von Systemen, die sowohl Frustration als auch Unordnung enthalten, außerordentlich schwierig ist, wurden sogenannte vollfrustrierte Systeme wie z.B. das antiferromagnetische nächste-Nachbarn Ising-Modell auf dem Dreiecks- oder FCC-Gitter /24/, oder periodisch frustrierte Systeme /25/ verstärkt studiert. Obwohl (oder gerade weil) die Frustration in translationsinvarianten Modellen den Phasenübergang zerstören kann /26/, haben diese Untersuchungen viel zu unserem Verständnis der Phasenübergänge in vielen Modellsystemen beigetragen. Sie haben gezeigt, daß in Anwesenheit von Frustration Umsicht geboten ist, weil z.B. für das exakt gelöste vollfrustrierte sphärische Modell auf hyperkubischen Gittern weder die Molekularfeld-Theorie noch die Bethe-Näherung in dem Grenzfall $d \rightarrow \infty$ exakt wird /27/. Das Konzept der Frustration hat es ermöglicht, irrelevante Unordnung (ohne Frustration) von der relevanten (mit Frustration) zu unterscheiden. Das Mattis-Modell /28/ enthält z.B. keine Frustration, die Unordnung kann durch eine Umzeichnung wegtransformiert werden. Es muß betont werden, daß für das Spinglas-Verhalten Frustration und Unordnung gleichermaßen notwendig sind. Die Unordnung hebt die Translationsinvarianz des Gitters auf. Diese Tatsache ist der Grund dafür, daß es bis heute keine vollständige theoretische Erklärung für zahlreiche ungewöhnliche Eigenschaften solcher Systeme gibt. Es ist daher wichtig allein die Rolle der Frustration in der Statik und Dynamik von Spingläsern zu verstehen.

Die dynamischen Aspekte der Spinglas-Experimente blieben bisher undiskutiert. In den Neutronenstreu-Experimenten ha-

I. Einleitung

ben die Neutronen eine Energieauflösung von etwa 0.2 meV, das bedeutet eine Zeitungenauigkeit von 10^{-11} sec. Dadurch wird eine Zeitskala festgelegt: Größen mit Relaxationszeiten $> 10^{-11}$ werden zu dem elastischen, die schneller fluktuierenden Größen zu dem quasi-elastischen Anteil beitragen. In diesen Experimenten wird eine stetige Abnahme des quasi-elastischen Wirkungsquerschnitts und die zugehörige Zunahme des elastischen Anteils zusammen mit einem Wellenvektor-abhängigen T_f beobachtet. Dies wurde als ein fortschreitendes Einfrieren der Spins, beginnend merklich oberhalb von T_f interpretiert /29/. Mössbauer-Experimente zeigen auch eine Hyperfein-Aufspaltung in der lokalen Magnetisierung mit einer Korrelationszeit von etwa 10^{-9} sec. Diese Aufspaltung findet mehr (RhFe /30/) oder weniger (AuFe /31/) weit oberhalb von T_f statt.

Die Magnetisierung $M(T)$ und die Suszeptibilität $\chi(T)$ unterhalb von T_f hängen stark davon ab, wie das System abgekühlt wird. Sie sind am größten, wenn in konstantem Feld gekühlt wird (feldgeköhlte oder thermoremanente Magnetisierung) und im allgemeinen kleiner, wenn das Feld erst nach dem Erreichen der Meßtemperatur eingeschaltet wird (isotherme Magnetisierung). Es kann ein reversibler Anteil in $M(T)$ beobachtet werden, der nach Ausschalten des Feldes verschwindet, und ein irreversibler Anteil, der nur langsam, logarithmisch oder mit einem Potenzgesetz, abklingt /10,11/. Als Folge dieses langsamen Zerfalls sind die Wechselstrom- und Gleichstrom-Suszeptibilitäten unterhalb von T_f verschieden. Auch die spezifische Wärme zeigt solche Langzeiteffekte /32/.

Die Messungen der dynamischen Suszeptibilität $\chi(\omega, T)$ liefern eine frequenzabhängige Temperatur $T_f(\omega)$ /33,34/. Die Spitze in $\text{Re}(\chi(\omega))$ ist zwar wohldefiniert, aber abgerundet. Versuche, T_f zu einem Arrhenius-Gesetz zu fitten, ergeben in manchen Fällen unphysikalisch große Werte für die Energiebarrieren /34/. Diese Fits können in einem phäno-

I. Einleitung

menologischen Modell unabhängiger Cluster begründet werden /10,35/. Dieses "Neelsche Modell" kann aber die sehr scharfe Spitze in $\chi(\omega)$ auf keinen Fall erklären, sie kommt durch kollektive Effekte zustande. Auf dieses Modell wird in der Einleitung zu Kapitel II noch näher eingegangen.

Den Durchbruch in der Theorie der Spingläser brachte ein Artikel von Edwards und Anderson (EA), 1975 /36/. Sie untersuchen ein klassisches Heisenberg Modell mit unabhängigen Zufallswechselwirkungen aus einer Gauß-Verteilung

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

$$P(J_{ij}) = (2(\Delta J)^2)^{-1/2} \exp (J_{ij} - J_0)^2 / 2(\Delta J)^2$$

Die Zufallsverteilung von Spins (s. Verunreinigungen) mit RKKY-Wechselwirkung wird also durch eine Zufallsverteilung der Kopplungen auf einem vollbesetzten Gitter ersetzt. Im folgenden verstehen wir unter Spinglas-Modellen immer Modelle, in denen die Unordnung durch die Verteilung der Kopplungen zwischen den Spins eingeführt wird. Die Lösung wird mit Hilfe eines (undurchsichtigen) mathematischen Tricks ("Replikatrick") erhalten, der es ermöglicht, die thermodynamische und die Konfigurationsmittelung zu vertauschen. EA führen einen neuen Ordnungsparameter ein, der nicht langreichweitige **räumliche** Spinkorrelationen beschreibt (wie in konventionellen magnetischen Systemen), sondern **Langzeit**-korrelationen.

$$q(T) = \lim_{t \rightarrow \infty} [\langle \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(0) \rangle] \quad (1)$$

Hier und in der ganzen Arbeit bedeutet $\langle \dots \rangle$ den thermischen-, [...] den Konfigurationsmittelwert über die Verteilung der Austauschwechselwirkungen $P(J)$. $q(T)$ kann sowohl in Heisenberg als auch in Ising Modellen definiert werden. In Molekularfeld-Näherung findet man einen scharfen Phasenübergang zweiter Ordnung bei der Temperatur T_f , mit $q(T) \neq 0$ für $T < T_f$. Die Lösung von EA ist in diesem Temperaturbe-

I. Einleitung

reich instabil /37,38/.

Analytisch ist das von Sherrington und Kirkpatrick (SK) /39,40/ eingeführte Ising Modell mit unendlich langreichweitigen und ebenfalls Gauß-verteilten Wechselwirkungen am meisten untersucht. Es wurde eingeführt, um die Molekularfeld-Näherung in dem EA Modell präzise abzuleiten. In reinen Systemen ist die exakte Lösung von solch einem Modell äquivalent zu der Molekularfeld-Theorie. Die Gleichgewichtseigenschaften des SK-Modells sind aber extrem schwer zu berechnen. Die zunächst von SK vorgeschlagene Lösung zeigt einen Phasenübergang mit einer Spitze sowohl in $\chi(T)$ als auch in $C(T)$, die durch äußeres Feld abgerundet werden. Dieser Effekt ist jedoch etwa 20mal schwächer als in Experimenten beobachtet. Die spezifische Wärme hat einen linearen Anstieg. Die Lösung hat unphysikalische Eigenschaften, wie z.B. eine negative Entropie im Grundzustand.

Bessere Lösungen können nur durch viel kompliziertere mathematische Verfahren ("Replikasymmetrie-Brechung" /41/) erhalten werden. Mit diesem Verfahren gelang es, eine marginal stabile Lösung zu konstruieren. Statt das inhomogene Problem auf eine homogene, translationsinvariante Hamiltonfunktion abzubilden (EA, Replikatrick), kann man auch den gekoppelten Satz der direkten Molekularfeld-Gleichungen des inhomogenen Systems für eine vorgegebene Konfiguration der Kopplungen betrachten. Leider haben diese Gleichungen von Thouless, Anderson und Palmer (TAP) /42/ eine unterhalb von T_f exponentiell anwachsende Anzahl von Lösungen /43,44/. Es stellt sich also das Problem, wie die Mittelung über die Lösungen erfolgen soll, die ein Minimum der freien Energie des Systems beschreiben. Eine andere Möglichkeit ist Sompolinskys dynamisches Verfahren mit zeitabhängigen Parametern /45/.

Weil der Langzeitlimes des Spinglas-Parameters (1) von dem Scharmittel

$$\tilde{q}(T) = [\langle S_i \rangle^2] \neq q(T) \quad (2)$$

I. Einleitung

verschieden ist, zeigt das SK Modell in dem thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) nicht-ergodisches Verhalten. Der zugängliche Teil des Phasenraums ist unterhalb von T_f eingeschränkt, weil sich unendlich hohe Energiebarrieren bilden. Die Vielzahl der TAP-Lösungen entspricht der Vielzahl der lokalen Minima in dem Phasenraum. Die dynamische Lösung /45,46/ und die Computerexperimente unterstützen dieses Bild.

Das EA Modell gibt eine realistischere Beschreibung von realen Spinglas-Systemen (kurze Reichweite der Wechselwirkungen). So haben Monte Carlo Simulationen des EA Modells viele der in Experimenten gefundenen charakteristischen statischen (Suszeptibilität, spezifische Wärme) und dynamischen (Remanenz, Langzeitrelaxation) Spinglas-Eigenschaften reproduziert /47,49/. In der Monte Carlo Methode wird der thermische Erwartungswert durch das Zeitmittel über einen Markoffschen Prozeß ersetzt. Weil ungeordnete Systeme typischerweise ein breites Spektrum von Relaxationszeiten besitzen, werden hierzu längere Beobachtungszeiten benötigt. Es ist daher problematisch echte Gleichgewichtszustände in der verfügbaren Rechenzeit zu erreichen. Andererseits ist es möglich, die Effekte kurzer Beobachtungszeiten zu studieren, auch wenn die wirklichen Gleichgewichts-Eigenschaften nicht ermittelt werden können. In diesen Computerexperimenten wurde eine große Datenmenge gesammelt, vor allem für Ising und klassische Heisenberg Systeme mit $\pm J$ und Gauß'scher Verteilung der Kopplungen. Diese Daten ergänzen die Messungen an realen Systemen, sind aber zum Teil mit ähnlichen Schwierigkeiten befrachtet (s. Gleichgewichtsprobleme). Die Monte Carlo Simulationen liefern also wertvolle Daten zur Aufklärung der Spinglaseigenschaften in kurzreichweitigen Modellen und können zur Verifizierung ihrer Anwendbarkeit dienen. Die Lösung des Modells können sie natürlich nicht liefern.

I. Einleitung

Der erste Schritt in diese Richtung war die Berechnung der Fluktuationen um die marginal stabile Lösung der Molekularfeld-Theorie /50,51/. Wenn man die Grenzen dieser Näherung sucht, interessiert man sich für zwei spezielle (Raum-) Dimensionen. Die eine ist die obere kritische Dimension D^* . Für $d \geq D^*$ gelten die in der Molekularfeld-Näherung berechneten kritischen Exponenten. Die andere ist die untere kritische Dimension d^* . Für $d < d^*$ sind die Fluktuationen so stark, daß sie einen Phasenübergang bei jeder endlichen Temperatur zerstören. Für $d^* \leq d \leq D^*$ ist die Molekularfeld-Theorie in dem kritischen Bereich nicht gültig, liefert aber für Temperaturen weit unterhalb von T_c verläßliche Resultate. Die exakte Bestimmung von d^* würde die zentrale Frage beantworten, ob in realen ($d = 3$) Spingläsern ein Gleichgewichts-Phasenübergang stattfindet, oder ob das Einfrieren ein dynamischer Nichtgleichgewichts-Prozeß ist.

Ohne äußeres Feld ist $D^* = 6$. Das Argument hierfür ist auf eine Dimensionsanalyse im Rahmen des Renormierungsgruppen-Formalismus gegründet. Zusätzlich konnte für $T > T_c$ eine $\epsilon = 6-d$ Entwicklung durchgeführt werden mit physikalisch sinnvollen Resultaten /52/. Alle Versuche eine Entwicklung für $T < T_c$ durchzuführen sind bisher gescheitert /37,53/. Über die untere kritische Dimension konnte bisher kein Einvernehmen erzielt werden. Je nach Methode wurden verschiedene Werte im Bereich $2 < d^* < 5$ vorgeschlagen. Eine ausreichende Kenntnis der Grundzustände und der tiefstliegenden Anregungen, die eine exakte Bestimmung ermöglichen würden, steht nicht zur Verfügung.

Vielfach wurden die Methoden der Ortsraumrenormierung für Ising Spingläser angewendet /z.B. 54,55/. Während verschiedene Varianten dieser Methoden in reinen Systemen im allgemeinen zu denselben Resultaten führen, findet man in Spingläsern verschiedene Aussagen für die untere kritische Dimension: $2 \leq d^* \leq 4$ /55/. Monte Carlo Simulationen finden

I. Einleitung

keinen qualitativen Unterschied im Bereich von $2 \leq d \leq 5$ /56/. Ein Skalenargument in einer Ortsraumrenormierung vom Migdal-Typ ergibt $d^* = 3$ für Heisenberg und $d^* \geq 2$ für Ising Systeme /57/.

Eine frühe numerische Berechnung der Defekt-Energien in einem Ising Spinglas mit Gauß-verteilten Kopplungen fand $d^* = 4$ /58/, in Übereinstimmung mit dem Resultat aus einem effektiven Ising-Ginzburg-Landau Hamiltonian /59/. Ein wichtiges Argument für $d^* = 4$ lieferte die erwähnte Entwicklung um die Molekularfeld-Theorie von Sompolinsky und Zippelius, die für $d < 4$ zusammenbricht /51/. Systematische Hochtemperaturentwicklungen für die EA-Suszeptibilität, sowohl für das $\pm J$ /60,62,63/ als auch für das Gauß'sche Modell /61/, ergeben auch $d^* = 4$. Diese Reihen sind relativ kurz (≤ 10 Terme, da die Systematik einer Entwicklung in inhomogenen Systemen komplizierter ist als in reinen Systemen), und dazu in niedrigen Dimensionen sehr irregulär, was die Analyse erheblich erschwert /63/. Aus dieser Fülle von verschiedenen Werten folgert man, daß $d^* \leq 2$ ausgeschlossen werden kann, und $d^* = 4$ die größte Unterstützung hat.

Die Existenz eines Spinglas-Zustandes bei $T = 0$ in 2 und 3 Dimensionen in Ising Modellen ist dagegen gut fundiert /64-67/. Die exakte Berechnung der Zustandssumme von kleinen Systemen mit der Transfermatrix-Methode zeigt keinen Phasenübergang bei $T \neq 0$. Das Besondere an dieser Methode ist die Mittelung: es wird im Gegensatz zu Monte Carlo Rechnungen über den ganzen Phasenraum gemittelt. Während dieses Verfahren in $d = 2$ die Untersuchung von relativ großen Systemen ermöglicht (18×18), sind die Ergebnisse in $d = 3$ mit einer Systemgröße von $4 \times 4 \times 10$ leichter zu kritisieren. Ausgiebige Monte Carlo Simulationen /65,67/ und Skalentheorie /66/ stehen in $d = 2$ in qualitativer und quantitativer Übereinstimmung mit den Resultaten der Transfermatrix-Methode, während die Frage des Phasenübergangs bei endlicher Temperatur in $d = 3$ wieder heiß debattiert wird.

I. Einleitung

Mehrere Arbeiten scheinen ihn zu bestätigen: Verschiedene Varianten der sog. "Large Cell Renormalization Group" Methode (bei $T = 0$ /68/ , bei $T \neq 0$ /69/ , "Domain Wall Renormalization Group" /70/) wurden für Ising-Systeme mit Gauß'scher Kopplungsverteilung angewendet. Eine andere Arbeit analysiert die finite size Effekte in Monte Carlo Daten, die für kleine Systeme mit $\pm J$ Kopplungen berechnet wurden /71/. Aus Berechnungen der freien Energie in einem EA-ähnlichen Modell mit einer langen aber endlichen Reichweite der Wechselwirkungen in dem Greens-Funktionen Formalismus wird gefolgert, daß ein Übergang in eine stark nicht-ergodische Phase stattfindet /72/. Letztendlich wurden die ersten Daten des Ising "Special Purpose Computer"-s bei Bell Laboratories für die $\pm J$ Verteilung in $d = 3$ veröffentlicht /73/. Die Ergebnisse dieser Arbeiten werden durch einen Phasenübergang bei einer Temperatur $T_c \approx 1.0 \cdot J$ interpretiert. Demnach wäre die untere kritische Dimension $2 < d^* < 3$.

Es muß jedoch bemerkt werden, daß keine der aufgeführten Methoden schlüssige Ergebnisse liefert. Die Frage eines Gleichgewichts-Phasenüberganges in $d = 3$ bleibt ungeklärt. Auf jeden Fall müßte die kritische Dynamik des Ising-Spinalgases untersucht werden, um die Rolle der Nichtgleichgewichts-Phänomene bei tiefen Temperaturen zu verstehen.

In dieser Arbeit werden Untersuchungen zur Statik und Dynamik von Ising Modellen mit stochastischen kurzreichweitigen Wechselwirkungen beschrieben.

Kapitel II befaßt sich mit der Dynamik eindimensionaler Spinglas Modelle. Insbesondere wird die Dynamik kleiner Cluster mit periodischen Randbedingungen und mit ferro- und antiferromagnetischen Kopplungen gleicher Stärke ($\pm J$ Modell) untersucht, um die Rolle der Frustration in der Relaxation zu studieren. Die volle dynamische Suszeptibilität

I. Einleitung

wird exakt berechnet. In dem Gauß'schen Modell werden die Remanenz und die dynamische Suszeptibilität numerisch bestimmt. Der absorptive Teil gibt über die Verteilung der Relaxationszeiten Auskunft. Der Einfluß eines konstanten äußeren Feldes auf die dynamische Suszeptibilität wird in beiden Modellen studiert.

Kapitel III beschreibt den Versuch, die untere kritische Dimension kurzreichweitiger Spingläser mit einem vor kurzem vorgeschlagenen numerischen Verfahren zu bestimmen. Eine gründliche Analyse zeigt, daß diese Methode, die die Minima auf der freien Energie Oberfläche sucht, außerstande ist, wahre Grundzustände zu finden und daher nur qualitative Aussagen treffen kann.

Kapitel IV bildet schließlich den Hauptteil dieser Arbeit. Das kritische Verhalten des zweidimensionalen Ising Modells mit $\pm J$ Austauschwechselwirkungen wird im Rahmen einer systematischen Hochtemperaturentwicklung studiert. Ein Verfahren wird entwickelt, das es zum ersten Mal ermöglicht, dynamische Korrelationen in einem inhomogenen Ising-Modell mit dieser Methode zu berechnen. Relaxationszeiten verschiedener dynamischer Größen, wie die des Edwards-Anderson Ordnungsparameters und Suszeptibilität, sowie die der ferromagnetischen Suszeptibilität werden berechnet. Der ferromagnetische Phasenübergang als Funktion der Konzentration der antiferromagnetischen Kopplungen und der Spinglas-Übergang werden diskutiert. Statische und dynamische kritische Exponenten werden berechnet und der Einfluß der Verunreinigungen auf sie beschrieben.

Jedes Kapitel ist mit eigener Zusammenfassung versehen.

Übersichtsartikel

über Spingläser findet man in

- K. Binder,
in Fundamental Problems in Statistical Mechanics V.,
ed. by E.G.D. Cohen,
North-Holland, Amsterdam, 1980, S. 21.
- R. Rammal and J. Souletie,
in Magnetism of Metalls and Alloys,
ed. by M. Gyrot,
North-Holland, Amsterdam, 1982, S. 379.
- K.H. Fischer,
phys. stat. solid. (b) 116, 357 (1983).
- J.L. van Hemmen and I. Morgenstern (eds.),
Heidelberg Colloquium on Spin Glasses,
Lecture Notes in Physics 192,
Springer, Berlin, 1983.
- K. Binder and D. Stauffer,
in Applications of the Monte Carlo Method in
Statistical Physics, ed. by K. Binder,
Springer, Berlin, 1984, S. 241.

II.

DYNAMIK IN 1-d SPINGLAS MODELLEN

1. Einleitung

In den letzten Jahren haben sich viele Autoren mit den Untersuchungen eindimensionaler Ising-Ketten und verwandter Modelle mit stochastischen Kopplungen befaßt. Das Interesse an eindimensionalen Systemen hat mehrere Gründe /74/.

1. Aus theoretischer Sicht sind sie wichtig und attraktiv, denn viele nicht-triviale Modelle sind in $d = 1$ exakt lösbar, während sie in $d = 3$ nur approximativ gelöst und verstanden sind. Die zur Verfügung stehenden exakten Lösungen dienen als Tests der Näherungsmethoden, die man in höheren Dimensionen verwenden muß. Oft bleiben gewisse Eigenschaften der eindimensionalen Lösung auch in höheren Dimensionen relevant. Einige treten sogar besonders klar zum Vorschein in $d = 1$, z.B. Einfluß der Fluktuationen, Nichtlinearitäten, Unordnung. Aus dieser Motivation heraus studieren wir das eindimensionale Ising Spinglas.

Das einfache Ising Modell hat keine intrinsische Dynamik. Eine Dynamik wird erst dadurch eingeführt, daß das System mit einem Wärmebad in Kontakt gebracht wird. Die Wechselwirkung mit dem Wärmebad führt zu spontanen Fluktuationen im Spinsystem. Die Übergangswahrscheinlichkeiten einzelner Spins hängen von dem Zustand (Temperatur) des Wärmebades und von dem Zustand der unmittelbaren Umgebung (nächste Nachbarn) ab. Die zeitabhängigen Spinfunktionen bilden einen kontinuierlichen Markoff-Prozeß von diskreten Variablen. Statistische Korrelationen zwischen diesen

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Variablen entstehen durch die Wechselwirkung. Mit der Bedingung, daß zu jedem Zeitpunkt nur eine Spinvariable ihren Wert ändern kann, ist dies die Definition der Glauber-Dynamik /75/. Eine exakte Lösung ist nur für das eindimensionale Modell ohne äußeres magnetisches Feld erhältlich /75,76/. In Feld oder in höheren Dimensionen sind nur Ansätze gemacht und verschiedene Näherungen eingeführt worden /77-81/.

2. Mit der Einführung der Unordnung (Zufallskopplungen mit der Verteilung $P(J)$) ändern sich die statischen Eigenschaften stark. Eine exakte Behandlung des Problems ist dennoch in vielen Fällen möglich /82,83/. Charakteristische Eigenschaften der Unordnung, wie die Existenz der Griffiths-Singularitäten /84/ sind sogar in einem Renormierungsgruppen-Bild zu sehen /85/. Eine einfache Kette mit gemischten ferro- und antiferromagnetischen Kopplungen ($\pm J$ Modell) ist in einer Dimension nur im äußeren Feld frustriert (s. unten). Die Grundzustandseigenschaften dieses Modells sind mit Hilfe von numerischen Verfahren /86,87/ und der Transfer-Matrix Methode /88/ untersucht worden. Während die Grundzustandsenergie eine stetige Funktion des magnetischen Feldes ist, zeigt die Magnetisierung Sprünge bei einer Reihe von kritischen Feldstärken. Später wurden diese absolut nicht-trivialen Befunde in einer physikalisch durchsichtigen Weise bestätigt /89,90/. Man konnte daher hoffen, daß auch die dynamischen Eigenschaften dieser Ising Modelle mit Zufallskopplungen einige charakteristische Züge der Spingläser (deren Hauptmerkmale Unordnung und Frustration sind) widerspiegeln.

Eine Untersuchung gewisser irreduzibler Spincluster-Klassen /91/ zeigt tatsächlich die Struktur der metastabilen Zustände, die die Langzeitrelaxation bestimmen. Eine logarithmische Relaxation der Energie folgt direkt aus der Analyse. Es ist diese sehr langsame Relaxation in das

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Gleichgewicht, die starke Ähnlichkeit mit den dynamischen Spinglas-Eigenschaften zeigt und die große Anzahl der Arbeiten über diese Modelle erklärt /92-99/. Diese Arbeiten untersuchen verschiedene $P(J)$ Kopplungsverteilungen. Alle zeigen einen langsamen Zerfall der Korrelationen und langsame Relaxation der Magnetisierung. Die verwendeten Techniken sind sehr unterschiedlich, keine ist aber in der Lage, die analytische Berechnung weit zu treiben. Am einfachsten ist die Verdünnung zu behandeln. Wegen der fehlenden Kopplungen ist eine natürliche Klassifizierung in Cluster gegeben /92,93,96,98/. Es ist aber möglich, auch bei stetigen Verteilungen eine Klassifizierung einzuführen und die Cluster, die für die langsame Relaxation verantwortlich sind, zu identifizieren /97/. Das verdünnte Modell zeigt kritisches dynamisches Skalenverhalten in der Nähe des Perkulationsbikritischen-Punktes /99/.

Das eindimensionale Ising Modell mit Zufallskopplungen zeigt also nicht-triviale Spinglas-ähnliche Eigenschaften. Da dieses Modell einen Gleichgewichtsphasenübergang nur bei $T=0, H=0$ hat, sind alleine die vielen metastabilen Zustände, d.h. die Dynamik, für dieses Verhalten verantwortlich. Man kann daher in diesem Modell solche Spinglas-Eigenschaften, die rein dynamischen Ursprungs sind, bequem studieren.

3. Monte Carlo Simulationen /100/ haben gezeigt, daß unterhalb von T_f ein nicht-verschwindender Bruchteil der Spins in kleine Cluster einfriert. Andererseits ist die Korrelationslänge ξ_{EA} bei $T = T_f$ eine stetige Funktion der Temperatur, und in $d = 2$ ist sie nicht größer als zwei Gitterkonstanten /67a/. Es stellt sich die Frage, ob es nicht eine vernünftige Näherung wäre, das System in kleine, unabhängige Cluster von der Größe ξ_{EA} zerlegt zu betrachten /101/. Das phänomenologische Modell unabhängiger Cluster /10/ ("magnetische Wolken")

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

ist sehr ähnlich dem Néel'schen Modell des Superparamagnetismus von Gesteinen /35/. Es wird angenommen, daß sich starke magnetische Korrelationen nur in kleinen Cluster von Spins bilden. Die Wechselwirkung zwischen verschiedenen Clustern werden vernachlässigt und jedem Cluster ein magnetisches Moment zugewiesen. Es wird ferner angenommen, daß diese sogenannten "superparamagnetischen Teilchen" nicht frei rotieren können, sondern sich in einem Anisotropie-Feld orientieren müssen. Die hierfür notwendige typische Zeit wird durch eine Arrhenius-Formel angegeben

$$\tau = \omega^{-1} \cdot e^{\mu K / T}$$

mit Versuchsfrequenz ω und Anisotropie-Energie μK . Bei niedrigen Temperaturen ist diese typische Zeit für gewisse Cluster zu lang, sie erscheinen während der Beobachtungszeit als eingefroren. Die Suszeptibilität besitzt daher in diesem Modell ein Maximum bei einer von der Meßfrequenz logarithmisch abhängenden Temperatur. Dieses Modell ist offensichtlich zu vereinfachend. Die Annahme der unabhängigen Cluster ist fragwürdig und kann nur in bestimmten Systemen, wie z.B. in $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ für Konzentrationen unterhalb der Perkolationsschwelle $x_p = 0.136$ vertreten werden /102/. In metallischen Spingläsern (langreichweitige RKKY-Wechselwirkung) ist $x_p = 0$, es gibt also keinen superparamagnetischen Bereich. In jedem Fall ist der Ursprung der Anisotropie nicht erklärt. Das superparamagnetische Bild ist daher prinzipiell inkonsistent. Dennoch können in gewissen Substanzen die superparamagnetischen Effekte wichtig sein. Wir wollen hier annehmen, daß sie etwas von den Grundzügen der Dynamik bei $T \approx T_f$ enthalten. Um die eindimensionale Struktur zu behalten, kann man ein Ensemble von nicht-wechselwirkenden kleinen eindimensionalen Clustern mit periodischen Randbedingungen (Ringe) und stochastischen Kopplungen betrachten. Dies ist eine direkte Verallgemeinerung von

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

/101/, wo alle Kopplungen in einem Cluster gleich sind, aber von Cluster zu Cluster verschieden. Es ist jedoch eine weitere Vereinfachung des Nèelschen Bildes, daß nicht alle Cluster bis zu einer bestimmten Größe betrachtet werden, sondern nur die der obigen Struktur.

4. Das eindimensionale kinetische Ising Modell wurde für viele praktische Probleme erfolgreich angewandt. Die Denaturierung der DNS-Moleküle /103/, die Aktivität der allosterischen Enzyme /104,105/, die Adsorption an Eiweißmoleküle /106,107/, wie das Schmelzen von Biopolymeren und der "Helix-Knäuel" (helix-coil) Übergang /108/ können beschrieben werden. Es existieren quasi-eindimensionale Substanzen, die in dynamischen Experimenten Spinglas-Eigenschaften zeigen /109,110/. Auf den Vergleich der Modellberechnungen mit den Experimenten kommen wir noch am Ende dieses Kapitels zurück.

In diesem Kapitel befassen wir uns mit der Dynamik des eindimensionalen Ising Modells mit Zufallskopplungen mit und ohne konstantem äußeren Feld. Ein Ensemble von kleinen Clustern ($N \approx 7$) mit periodischen Randbedingungen wird untersucht, der $N \rightarrow \infty$ Grenzfall wird, wo es möglich ist, studiert.

2. Die Bewegungsgleichungen

In der Aufstellung der kinetischen Gleichungen folgen wir Glaubers Behandlung /75/. Das System besteht aus N Ising Spins in einem Ring mit der Energie $\mathcal{H}$

$$-\frac{1}{T} \mathcal{H} = \sum_{i=1}^N K_i s_i s_{i+1} + h \sum_i s_i \quad (1)$$

Dabei ist $k_B = 1$ gesetzt worden, $K_i = J_i/T$, $h = H/T$,

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$s_{N+1} = s_1$ (periodische Randbedingungen); die Kopplungskonstanten J_i sind Zufallsvariablen mit vorgegebener Verteilung.

Die einzelnen Spins werden durch das Wärmebad mit der (Übergangs-)Wahrscheinlichkeit

$$w_j(s_j \rightarrow -s_j) = \frac{1}{2\tau} \{ 1 - s_j (\tanh(E_j/T)) \} \quad (2)$$

umgedreht. Dabei ist τ die Relaxationszeit eines Spins, sie wird als Konstante angenommen und in die Zeitskala absorbiert. E_j ist das lokale magnetische Feld, in dem sich der Spin s_j befindet. w_j erfüllt die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts, führt also in das thermodynamische Gleichgewicht. Zuerst untersuchen wir den Fall, wo das äußere Feld ausgeschaltet ist ($h=0$). Es gilt

$$\begin{aligned} \tanh(E_j/T) &= \tanh(K_{j-1} + K_j) \frac{s_{j-1} + s_{j+1}}{2} \\ &= \tanh(K_{j-1} - K_j) \frac{s_{j-1} - s_{j+1}}{2} \end{aligned} \quad (3)$$

Die Markoffsche Master-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilungs-Funktion $P(s_1, \dots, s_N; t)$, die die zeitliche Entwicklung des Systems beschreibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(s_1, \dots, s_N; t) &= - \left[\sum_j w_j(s_j) \right] P(s_1, \dots, s_j, \dots, s_N; t) \\ &\quad + \sum_j w_j(-s_j) P(s_1, \dots, -s_j, \dots, s_N; t) \end{aligned} \quad (4)$$

kann mit (2) wie folgt umgeschrieben werden

$$\dot{m}_k(t) = -m_k(t) + \Gamma_{k-1}^+ m_{k-1}(t) + \Gamma_k^- m_{k+1}(t) \quad (5)$$

Hier wurden die Schreibweise

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$$\frac{d}{dt} X = \dot{X}, \quad m_k(t) = \langle S_k(t) \rangle = \sum_{\{s\}} S_k(t) P(\underline{s}; t)$$

und die Variablen

$$\Gamma_j^{\pm} = \frac{\sinh 2K_j}{\cosh 2K_j + \cosh 2K_{j\pm 1}} \quad (6)$$

eingeführt. Der Erwartungswert der 2-Spin Korrelationen

$$C_{ij}(t) = \langle S_i(t) S_j(t) \rangle \quad (7)$$

entwickeln sich nach

$$\begin{aligned} \dot{C}_{j,k}(t) = & -2C_{j,k} + \Gamma_{j-1}^+ C_{j-1,k} + \Gamma_j^- C_{j+1,k} \\ & + \Gamma_{k-1}^+ C_{j,k-1} + \Gamma_k^- C_{j,k+1} \end{aligned} \quad (8)$$

Um eine Lösung der Gleichungen (5) und (6) zu erhalten, muß, mathematisch gesehen, eine (wegen der nächsten Nachbarn Kopplungen) tridiagonale Matrix mit stochastischen Elementen diagonalisiert werden. In diesem Sinn ist das Problem sehr ähnlich der Berechnung der Zustandsdichte von einer ungeordneten harmonischen Kette /111/ oder von Elektronen in einem eindimensionalen ungeordneten Medium /112/. Unser Fall ist aber komplizierter, weil die Koeffizientenmatrix

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -1 & \Gamma_1^- & 0 & \dots & \Gamma_N^+ \\ \Gamma_1^+ & -1 & \Gamma_2^- & \dots & 0 \\ 0 & \Gamma_2^+ & -1 & \Gamma_3^- & \dots \\ \vdots & & & & \Gamma_{N-1}^- \\ \Gamma_N^- & & & \dots & \Gamma_{N-1}^+ & -1 \end{pmatrix}$$

nicht symmetrisch ist, und die Elemente nicht unabhängige stochastische Variablen sind. Wie aus (6) ersichtlich, hängen sie von zwei Kopplungskonstanten ab (welche Zufallsvariablen sind). Die erste Schwierigkeit kann durch die dia-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

gonale Transformation

$$\tilde{\Gamma} = D \Gamma D^{-1} \quad (9)$$

mit

$$D_{ik} = \delta_{ik} \cdot \left(\prod_{m=0}^{N-1} \Gamma_m^- / \prod_{n=0}^{N-1} \Gamma_n^+ \right)^{1/2} \quad (10)$$

umgangen werden. Die zweite hat als Folge, daß der Dyson Formalismus /113/ nicht anwendbar ist, und daß man auf diese Weise keine analytische Lösung für eine beliebige Verteilung der Kopplungen findet.

Um die dynamische Suszeptibilität $\chi(\omega, T)$ berechnen zu können, schalten wir ein harmonisches Feld ein

$$H(t) = H_\omega \cdot e^{-i\omega t} \quad (11)$$

Weil sich das lokale Feld E_j in (2) durch (11) ändert, ändern sich auch die Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$w_j'(s_j) = w_j(s_j) \left\{ 1 - s_j \tanh(H(t)/T) \right\} \quad (12)$$

Die Bewegungsgleichung für die lokale Magnetisierung

$$\dot{m}_k(t) = \sum_l \Gamma_{kl} m_l(t) + b_k(t) \quad (13)$$

wird durch den Feld-abhängigen Term

$$b_k(t) = \frac{H(t)}{T} \left(1 - \Gamma_k^- c_{k,k+1}(t) - \Gamma_{k-1}^+ c_{k-1,k}(t) \right) \quad (14)$$

erweitert. Angenommen wurde dabei, daß die Feldstärke sehr klein ist, $H_\omega \ll T$, so daß $\tanh(H/T)$ durch H/T ersetzt werden kann. Wir wollen die Antwort des Systems in linearer Näherung betrachten. Deshalb können wir die in H quadratischen Terme in (14) vernachlässigen und $c_{k,k+1}(t)$ durch seinen Gleichgewichtswert

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$$C_k \equiv C_{k,k+1} = (\sigma_k + \prod_{i \neq k} \sigma_i) / (1 + \prod_i \sigma_i) \quad (15)$$

ersetzen, wobei $v_i = \tanh(K_i)$ eingeführt wurde. Damit sind die Gleichungen (5) und (8) entkoppelt. Das inhomogene lineare Differentialgleichungssystem (13) wird mit den Anfangsbedingungen $m_k(t=0) = 0$, $t_0 = -\infty$ gelöst

$$\underline{m}(t) = \int_{-\infty}^t \exp\{\underline{\Gamma}(t-s)\} \underline{b}(s) ds. \quad (16)$$

Die dynamische Suszeptibilität mit

$$\Delta \langle M(t) \rangle = \sum_k m_k(t) = \chi(\omega, T) \cdot H_\omega \cdot e^{-i\omega t} \quad (17)$$

nach der Konfigurationsmittelung

$$[\chi(\omega, T)] = \int \chi(\omega, T, \{J_{ij}\}) P(\{J_{ij}\}) dJ_{ij} \quad (18)$$

hat die Form

$$[\chi(\omega, T)] = \frac{1}{T} \sum_k \left[(\Gamma + i\omega)_{kk}^{-1} b_k(t=0) / H_\omega \right]. \quad (19)$$

Um die Suszeptibilität in konstantem äußeren magnetischen Feld H_0 zu erhalten, müssen die Gleichgewichtsgrößen im Feld berechnet werden. Das zeitabhängige Feld in (11) hat jetzt die Form

$$H(t) = H_0 + H_\omega e^{-i\omega t}, \quad (20)$$

daher muß $H(t)$ in (14) durch die neue lineare Entwicklung in H_ω ersetzt werden

$$H(t) \rightarrow \tanh\left(\frac{H_0}{T}\right) + H_\omega e^{-i\omega t} \cdot \cosh^{-2}\left(\frac{H_0}{T}\right). \quad (21)$$

Der konstante Term in (21) koppelt die Gleichungen (5) und (8) in jedem Fall, sie müssen zusammen gelöst werden. Wenn man keine Näherung machen möchte, sondern alle Kor-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

relationsfunktionen berechnen will, muß man 2^N gekoppelte Differentialgleichungen lösen. Eine Alternative ist, im Raum der Wahrscheinlichkeitsfunktionen zu bleiben und die Master-Gleichung (4) zu lösen. Wir benutzen dazu den Formalismus von Kadanoff, Swift /114/ und Kawasaki /115/.

Wir definieren einen orthonormalen vollständigen Satz von Basisvektoren im Raum der 2^N Zustände des Systems.

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad . \quad (22)$$

Der statistische Zustand des Systems zur Zeit t wird durch

$$|P(t)\rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha}(t) |\alpha\rangle \quad (23)$$

gegeben, $\langle \alpha | P(t) \rangle$ ist also die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System zur Zeit t im Zustand $|\alpha\rangle$ befindet. Die Master-Gleichung hat dann die Form

$$\frac{d}{dt} |P(t)\rangle = \mathcal{L} |P(t)\rangle \quad (24)$$

wobei $\mathcal{L}$ die Matrix des Liouville-Operators im Raum der Zustände $|\alpha\rangle$ ist. Wir definieren einen Hilfsvektor

$$|1\rangle = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \quad ,$$

mit dem die Wahrscheinlichkeitserhaltung einfach zu formulieren ist:

$$\frac{d}{dt} \langle 1 | P(t) \rangle = \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} P_{\alpha}(t) = \frac{d}{dt} 1 = 0 \quad . \quad (25)$$

Mit anderen Worten ist die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts

$$\langle 1 | \mathcal{L} = 0 \quad . \quad (26)$$

Jede Größe X wird als eine diagonale Matrix dargestellt,

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

deren Diagonalelement X_α der Wert von X im Zustand α ist

$$X = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle X_{\alpha} \langle\alpha| . \quad (27)$$

Der Mittelwert von X zur Zeit t ist

$$\langle\langle X; P(t) \rangle\rangle := \langle |X| P \rangle = \sum_{\alpha} X_{\alpha} P_{\alpha}(t) . \quad (28)$$

Eine Zeitkorrelationsfunktion kann dann so geschrieben werden

$$\langle\langle X(t) Y(0) \rangle\rangle = \sum_{\alpha} \langle |X e^{+L t} | \alpha \rangle \langle |Y| \alpha \rangle P_e(\alpha) , \quad (29)$$

wobei $P_e(\alpha)$ die Wahrscheinlichkeit ist, daß sich das System im Zustand α im Gleichgewicht befindet. Die Suszeptibilität wird aus dem Fluktuation-Dissipations-Satz berechnet

$$\begin{aligned} \chi(\omega, T) &= \frac{1}{T} \int_0^{\infty} \langle\langle \delta M(t) \{ M_R - R M \} \rangle\rangle e^{i\omega t} dt \quad (30) \\ &= -\frac{1}{T} \langle\langle \delta M (L + i\omega)^{-1} [M, R]_c \rangle\rangle , \quad (31) \end{aligned}$$

dabei bezeichnet δM den Antwortteil der totalen Magnetisierung. Die $2^N \times 2^N$ Matrix $(L + i\omega)^{-1}$ ist zwar sehr schwach besetzt, hat aber zu wenige Symmetrie-Eigenschaften; eine exakte Invertierung ist nicht möglich, ja man muß einen ziemlichen numerischen Aufwand treiben, selbst für verhältnismäßig kleine Cluster.

Die dynamische Suszeptibilität in konstantem äußeren Feld berechnen wir also numerisch durch (31).

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

3. $\pm J$ - Modell

In diesem Fall ist die Verteilung der Kopplungen:

$$P(J') = \frac{1}{2} \delta(J-J') + \frac{1}{2} \delta(J+J') . \quad (32)$$

In $d > 1$ Dimensionen führt sie zu Frustration. In $d = 1$ ist die Lage subtiler. Der Hamiltonian der Ising-Kette

$$\mathcal{H} = -J \sum_{k=1}^{N-1} t_k S_k S_{k+1} - H \sum_{k=1}^N S_k , \quad (33)$$

mit den Zufallsvariablen $t_k = \pm 1$, kann durch die Einführung der Pseudospins

$$\sigma_1 = S_1 , \quad \sigma_k = \left(\prod_{j=1}^{k-1} t_j \right) S_k , \quad k \geq 2 \quad (34)$$

umgeschrieben werden

$$\mathcal{H} = -J \sum_{k=1}^{N-1} \sigma_k \sigma_{k+1} - H \sum_{k=1}^N r_k \sigma_k \quad (35)$$

Jetzt sind $r_k = \pm 1$ ($k > 1$) die Zufallsvariablen. Ohne äußeres Feld kann diese Art der Unordnung durch die lokale Eichtransformation (34) fortgeschafft werden. In Feld sind die Probleme: Zufallsbondmodell in homogenem Feld (33) und Ferromagnet in Zufallsfeld (35) äquivalent. Bei $H = 0$ sind zwar die statischen Eigenschaften weitgehend trivial, nicht aber die dynamischen /96a,116/, auch wenn das Spektrum der Relaxationszeiten durch die Unordnung unverändert bleibt /92a/.

Für den Fall der periodischen Randbedingungen ist die Situation anders. Wegen der Bedingung

$$S_{N+1} = S_1 \quad (36)$$

ist (34) nicht direkt anwendbar

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$$\sigma_{N+1} = f \cdot \sigma_1 ; \quad f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N t_i \quad . \quad (37)$$

Die Randbedingung bleibt nur für $f = 1$ erhalten. f ist der Frustrationsindex im Sinne von Toulouse /23/

$$f \quad \left\{ \begin{array}{l} = -1 \quad \text{für frustrierte Ringe} \\ = +1 \quad \text{für nicht-frustrierte Ringe.} \end{array} \right. \quad (38)$$

Die Unordnung ist eichinvariant, also relevant für $f = -1$, sie kann wegen der Frustration nicht forttransformiert werden.

3.1. $\pm J$ -Model ohne äußeres Feld

Die Variablen (6) in (5) und (8) reduzieren sich auf

$$\Gamma_j^+ = \Gamma_j^- = t_j \cdot \frac{1}{2} \tanh(2K) = t_j \cdot \gamma/2 \quad . \quad (39)$$

Damit ist die Koeffizienten-Matrix symmetrisch. Sie wird mit dem vollständigen orthonormalen Satz der Eigenvektoren

$$|m, k\rangle = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N t_j \right) \cdot \exp \left\{ i \frac{2\pi}{N} (m + \phi) k \right\} \quad (40)$$

diagonalisiert. Die Eigenwerte der Matrix sind

$$\lambda_m = 1 - \gamma \cdot \cos \frac{2\pi}{N} (m + \phi) \quad . \quad (41)$$

Hierbei ist ϕ der Phasenfaktor der Frustration

$$\phi = \frac{1-f}{4} \quad \begin{array}{l} \approx 0 \quad \text{für frustrierte Cluster} \\ \approx 1/2 \quad \text{für nicht-frustrierte.} \end{array} \quad (42)$$

Das Spektrum hängt also nur von der Frustration ab, die aus-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

fürliche Information über die Unordnung ist in den Eigenvektoren zu finden. Die nicht-frustrierten Cluster haben ein ferromagnetisches Spektrum. Die lokale Magnetisierung für eine gegebene Konfiguration ist

$$m_k(t) = \sum_{n=0}^{N-1} A_n |n, k\rangle e^{-\nu_n t} \quad (43)$$

$$m_k(t) = \frac{E_k}{N} \sum_{\ell=1}^N E_\ell m_\ell(0) \cdot \sum_{n=0}^{N-1} \exp \left\{ i \frac{2\pi}{N} (n+\phi)(k-\ell) - \nu_n t \right\} . \quad (44)$$

Dabei enthalten E_k die genaue Kopplungskonfiguration

$$E_k = \prod_{j=1}^{k-1} t_j . \quad (45)$$

Um die Mittelung über die Konfigurationen ausführen zu können, mitteln wir über die frustrierten Konfigurationen getrennt. Weil

$$[E_k, E_\ell] = 2^{N-1} / 2^N \cdot \delta_{k,\ell} \quad (46)$$

in beiden Fällen (es gibt 2^{N-1} frustrierte Konfigurationen), erhalten wir

$$\begin{aligned} M(t) &= \sum_{k=1}^N [m_k(t)] \\ &= M(0) e^{-t} \frac{1}{2N} \sum_{m=0}^{2N-1} e^{t \cos \frac{\pi m}{N}} . \end{aligned} \quad (47)$$

In diesem Ensemble kleiner Cluster ($N \lesssim 6$) beschreibt (47) folgendes Verhalten der Magnetisierung: Für $t \ll 1$ zerfällt $M(t)$ exponentiell. Das Langzeit-Verhalten wird durch

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$$M(t) \sim M(0)/2N \cdot e^{-(1-\gamma)t}, \quad t \gg 1 \quad (48)$$

beschrieben. Bei niedrigen Temperaturen ($T \ll J$) hat (48) ein Plateau

$$M(t) \approx M(0)/2N. \quad (49)$$

Zum Vergleich zeigen wir in **Abb. II.1.** das Resultat einer Monte Carlo Simulation von Kirkpatrick /117/.

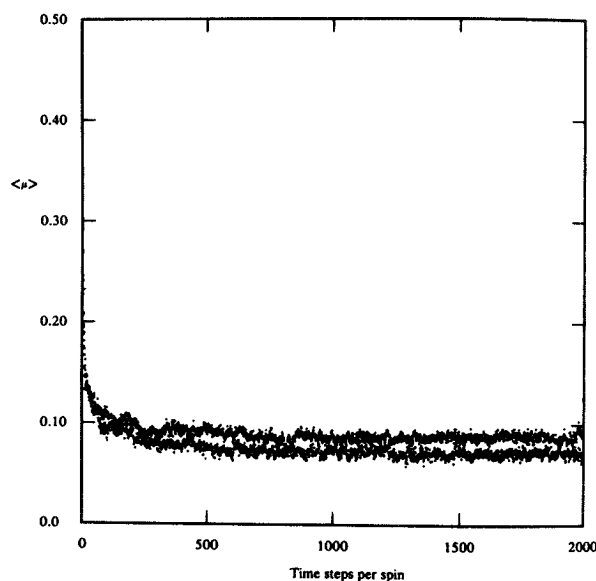


Abb. II.1.

Zerfall der Magnetisierung in einem 20^3 System in einer Monte Carlo Simulation des $\pm J$ -Modells /117/.

(47) beschreibt einen ähnlichen Zerfall der Magnetisierung, wie er in $d = 3$ Dimensionen beobachtet wurde. Diese Relaxation ist nicht logarithmisch, wie bei stetigen Verteilungen gefunden wurde. Schließt man aus der Höhe des Plateaus in **Abb. II. 1.** auf N zurück, findet man nach (49) $N \approx 5$. Der kleinste Ring auf einem kubischen Gitter hat $N = 4$, der nächste $N = 6$.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Es ist von Interesse, den Grenzfall $N \rightarrow \infty$ zu betrachten. Die Summe in (47) wird zu einem Integral, das eine Darstellung der nullten modifizierten Bessel-Funktion erster Art ist. Damit ist

$$M(t) = M(0) \cdot e^{-t} \cdot I_0(\gamma t) \quad (50)$$

Nur die nullte Funktion I_0 überlebt die Konfigurationsmittelung /96a/. (50) zeigt nach der exponentiellen Anfangsrelaxation bei niedrigen Temperaturen $T \ln(t) \ll 1$ einen Zerfall nach folgendem Potenzgesetz:

$$M(t)/M(0) \sim t^{-1/2} \quad (51)$$

(47) und (50) zeigen, daß es in dem Cluster-Modell nur eine endliche Anzahl von Relaxationszeiten gibt, dagegen gibt es in der unendlichen Kette ein breites Spektrum.

Die Autokorrelations-Funktion kann man wie folgt berechnen

$$\langle S_j(t) S_k(t+t') \rangle = \quad (52)$$

$$= \sum_{\{s\}} s_j P(\underline{s}; t) \sum_{\{s'\}} s'_k P(\underline{s} | \underline{s}'; t)$$

Hierbei ist $P(\underline{s} | \underline{s}'; t')$ die Wahrscheinlichkeit des Zustandes $\underline{s}' = (s'_1, \dots, s'_N)$ zur Zeit t' , vorausgesetzt, daß das System im Zustand $\underline{s}$ zur Zeit $t' = 0$ war. Für die konfigurationsgemittelte Funktion

$$C_{jk}(t) = [\langle S_j(0) S_k(0) \rangle] \quad (53)$$

erhalten wir

$$C_{jk}(t) = \frac{\delta_{jk}}{2N} \sum_{l=1}^N \sum_{f=\pm} \frac{r^{|l-k|} + f \cdot v^{N-|l-k|}}{1 + f v^N} \cdot \quad (54)$$

$$\cdot \sum_{m=0}^{N-1} \exp \left\{ i \frac{2\pi}{N} (k-l)(m+\phi) - (1 - \gamma \cos \frac{2\pi}{N} (m+\phi)) t \right\}.$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Hier haben wir die frustrierten / nicht-frustrierten Cluster wieder getrennt gemittelt und $v = \tanh(K)$ eingeführt. Für kleine Cluster zeigt $C(t)$ ein der Magnetisierung ähnliches Verhalten.

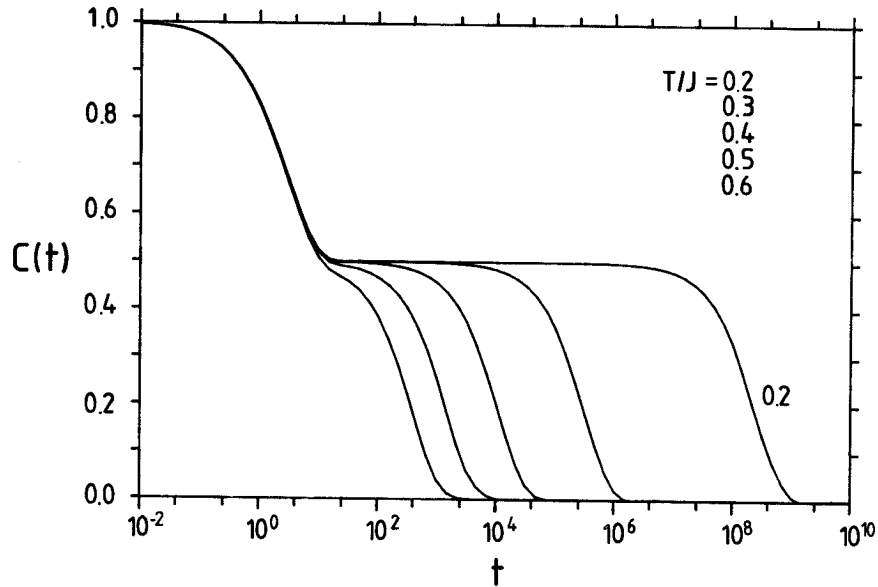


Abb. II.2.

Die Autokorrelations-Funktion im $\pm J$ -Modell, bei verschiedenen Temperaturen, für $N = 4$.

Die schnelle Relaxation erfolgt zu dem Plateau

$$C(t) \sim \frac{1}{2} e^{-(1-\gamma)t} \quad (55)$$

Dieses Cluster-Modell hat ein diskretes Spektrum, in dem nur eine (ferromagnetische) Relaxationszeit divergiert

$$\lambda_0 = (1-\gamma)^{-1} \sim \exp \left\{ \frac{4J}{T} \right\} \quad (56)$$

Die größte frustrierte Relaxationszeit divergiert in dem endlichen Cluster nicht (N ist klein)

$$\lambda_0^* = 1 - \gamma \cos \frac{\pi}{N} \quad (57)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Der Unterschied zum reinen Modell (reine exponentielle Relaxation) besteht darin, daß das System wegen der Frustration mehr Relaxationszeiten hat und die verschiedenen Moden wegen der Konfigurationsmittelung anders gewichtet werden.

In dem Grenzfall $N \rightarrow \infty$ geht das Spektrum zum Kontinuierlichen über, man erhält eine breite Verteilung der Relaxationszeiten. (54) wird zum

$$C_{jk}(t) = \delta_{jk} e^{-t} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \sigma^{|\ell|} \cdot I_{\ell}(\gamma t) \quad (58)$$

/s. auch 116/.

Zur Berechnung der dynamischen Suszeptibilität könnte man den Fluktuations-Dissipations-Satz

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\langle M(0)M(t) \rangle] e^{i\omega t} dt = \frac{2\pi}{\omega} \cdot \text{Im } \chi(\omega) \quad (59)$$

benützen. Man kann aber auch andere zu (59) sehr ähnliche Zusammenhänge ableiten /75/, die zwar denselben physikalischen Inhalt widerspiegeln, von ihrer Form her aber besser geeignet sind, die volle komplexe dynamische Suszeptibilität zu berechnen. So erhält man nach Anwendung der linearen Antwort Näherung

$$\chi(\omega) = \frac{1}{T} \int_0^{\infty} \sum_{j,k} \left[\left\{ 1 - \frac{\gamma}{2} (t_j + t_{j-1}) \right\} \langle S_j(0) S_k(t) \rangle \right] e^{-i\omega t} dt. \quad (60)$$

Nach Einsetzen von (54) in (60) bekommt man

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{f=\pm 1} \frac{(1-v^2)(1-fv^N)}{(1+v^2)(1+fv^N)} \sum_{m=0}^{N-1} \frac{1}{\mathcal{L}_m(\phi)} \quad (61)$$

mit

$$\mathcal{L}_m(\phi) = 1 - \gamma \cos \frac{2\pi}{N} (m+\phi) - i\omega. \quad (62)$$

In **Abb. II.3.** zeigen wir (61) für verschiedene Frequenzen. Re $\chi(\omega, T)$ zeigt Curie-Verhalten bei hohen Temperaturen und

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

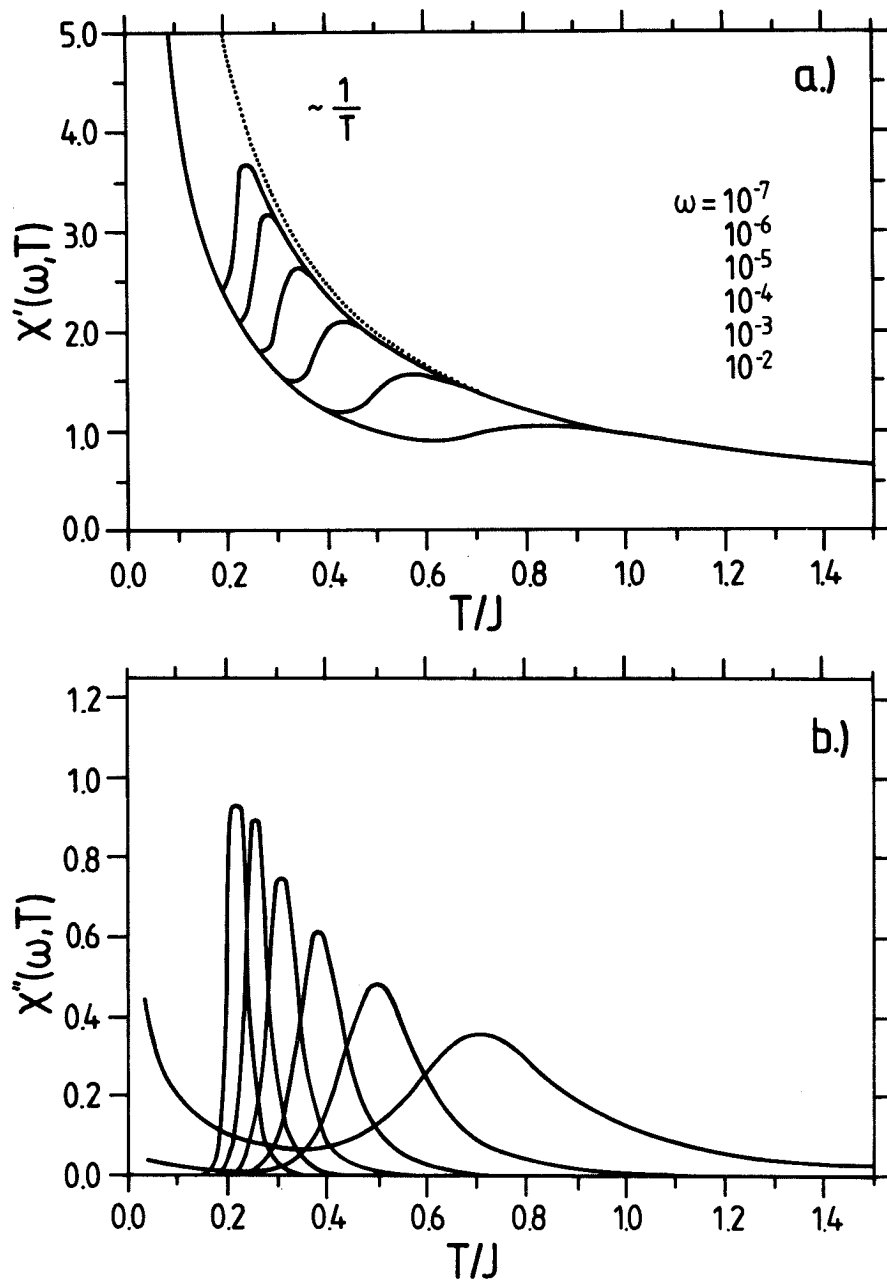


Abb. II.3.

Die dynamische Suszeptibilität im J-Modell, für $N = 4$.

(a) $\text{Re } \chi(\omega, T) / N = \chi'(\omega, T)$

(b) $\text{Im } \chi(\omega, T) / N = \chi''(\omega, T)$.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

ein frequenzabhängiges Maximum bei T_f . Mit sinkender Temperatur ist dann noch ein Minimum und eine $(2T)^{-1}$ Divergenz für $T \rightarrow 0$ zu beobachten. Sie wurde in Monte Carlo Simulationen in $d = 2, 3$ auch gefunden [116, 117]. Der Grund für diese Divergenz ist darin zu finden, daß es in diesem Modell Gitterplätze gibt, wo das lokale Feld exakt Null ist. Diese Spins können durch ein infinitesimales Feld frei gedreht werden. Das Umdrehen eines solchen Spins setzt andere in Feld Null. In $d = 2$ befinden sich etwa 8% der Spins bei $T = 0$ im Feld Null [117]. In unserem Cluster-Modell ist die Hälfte der Konfigurationen frustriert. In solch einem Cluster ist ein Spin immer frei zu drehen.

Der Grenzfall $\omega \rightarrow 0$ in (61, 62) ergibt natürlich die statische Suszeptibilität. Diese unterscheidet sich von der des Ferromagneten dadurch, daß sie bis $T = 0$ dem Curieschen Gesetz folgt. Die Frequenz-Abhängigkeit von T_f ist ein Arrhenius-Gesetz

$$J \cdot T_f^{-1}(\omega) = 0.14 - 0.23 \ln(\omega), \quad (63)$$

relativ unabhängig von N . Eine Untersuchung von (61) zeigt, daß in beiden Clustertypen ein Maximum um etwa

$$J \cdot T_f^{-1}(\omega) \approx \frac{1}{4} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln(\omega) \quad (64)$$

zu finden ist. Die komplexe Form in **Abb. II.3.** setzt sich aus folgenden Beiträgen von Frustrierten / Nicht-Frustrierten Cluster zusammen.

$$T > T_f : \quad \chi'_{NF} \approx \frac{1}{2T} \quad , \quad \chi''_{NF} \approx \frac{\omega}{2T} \left(\frac{e^{4K}}{2} - \frac{N^2-8}{6} \right)$$

$$T < T_f : \quad \chi'_{NF} \approx \frac{N^2-1}{6T} e^{-4K} \quad , \quad \chi''_{NF} \approx \frac{1}{T} \cdot \frac{e^{-4K}}{\omega}$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

$$T \lesssim T_f : \quad \chi'_F \approx \frac{1}{2T} ,$$

$$\chi''_F \approx \frac{\omega}{2T} \left(\frac{N^2+2}{6} + e^{-4K} \frac{(N^2-4)(7N^2+8)}{9_0} \right) .$$

Dieses ungewohnte Verhalten der Suszeptibilität wurde in Experimenten nicht beobachtet, weil in realen Systemen die Wechselwirkungskonstanten nicht genau von gleicher Stärke sind.

Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ nähert sich (61) zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \chi(\omega) &= \frac{1}{T} \frac{1-\sigma^2}{1+\sigma^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{1-\gamma \cos \theta - i\omega} \\ &= \frac{1}{T} \frac{1-\sigma^2}{1+\sigma^2} \left((1+\gamma-i\omega)(1-\gamma-i\omega) \right)^{-1/2} \quad (65) \end{aligned}$$

/96a/. (65) ist das geometrische Mittel der Suszeptibilitäten eines ferromagnetischen und eines antiferromagnetischen Systems

$$\chi_{\pm J} = (\chi_{+J} \cdot \chi_{-J})^{1/2} . \quad (66)$$

Das zeigt, auf welche komplexe Weise die Konfigurationsmittelung die verschiedenen Kopplungskonfigurationen mischt. Weil Frustration in einem unendlich großen System nicht existiert, fehlt die $T \rightarrow 0$ Divergenz für endliche Frequenzen.

Die Frequenzabhängigkeit von T_f folgt demselben Arrhenius-Gesetz wie im endlichen System (65) (s. auch /116/). Für ausreichend lange Beobachtungszeiten ($\omega \rightarrow 0$) ist kein Maximum zu finden, das System zeigt reines Curie-Verhalten. Für endliche Frequenzen findet man eine frequenzabhängige Temperatur, bei der die Cluster von der gegebenen Größe "blockieren": unter dieser Temperatur nehmen sie an der Dynamik nicht teil.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

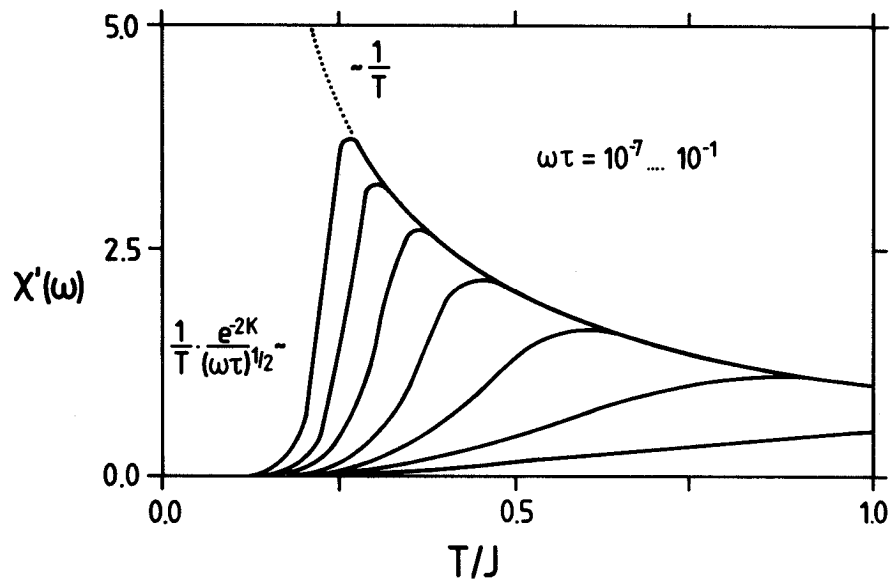


Abb. II.4.

Reeller Teil der dynamischen Suszeptibilität im $\pm J$ -Modell für $N \rightarrow \infty$.

Man könnte die Verteilung verallgemeinernd eine beliebige Konzentration der (anti-)ferromagnetischen Kopplungen zulassen

$$P(J') = c \cdot \delta(J + J') + (1-c) \delta(J - J') . \quad (67)$$

In diesem Fall braucht man nur mit der Wahrscheinlichkeit, daß ein Cluster frustriert ist

$$P_f = \sum_{k=1,3,5,\dots} \binom{N}{k} c^k (1-c)^{N-k} \quad (68)$$

die Konfigurationen neu zu gewichten. Weil (68) bei $c = 1/2$ ein breites Plateau hat, ändern sich die obigen Resultate in dem Konzentrationsbereich 20-80% nur sehr geringfügig.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

3.2. $\pm J$ -Modell in äußerem Feld

Das Einschalten eines konstanten äußeren Feldes (20) zerstört die durch die Frustration entstandene Entartung. Das hat zur Folge, daß die Suszeptibilität in dem Limes $T \rightarrow 0$ nicht divergiert, weil die bisher losen Spins nicht mehr frei gedreht werden können. Abb. II.5. zeigt $\chi'(\omega, T, H_0)$ nach (31) berechnet. Die Konfigurationsmittelung wird numerisch exakt ausgeführt. Ein Cluster mit N Kopplungen kann 2^N Konfigurationen annehmen, über die summiert werden muß. Für $N < 10$ ist dies nur ein geringer Rechenaufwand.

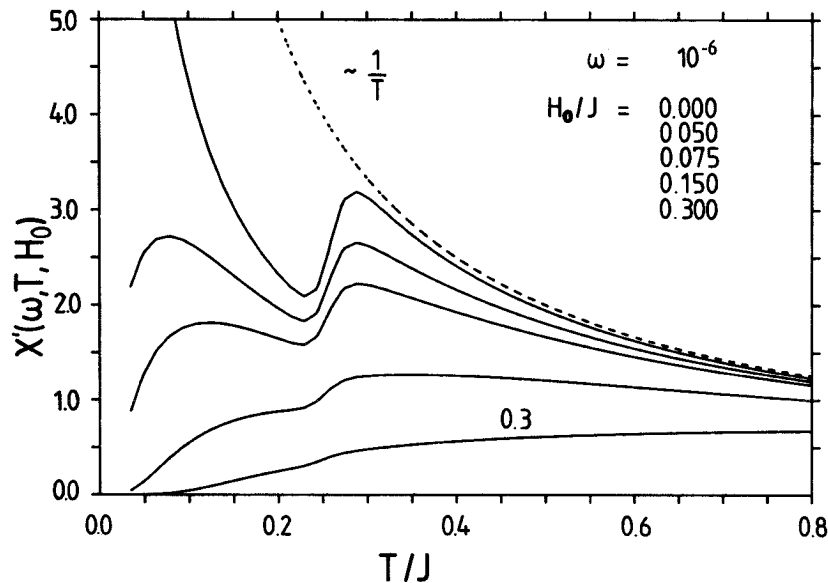


Abb. II.5.

Reeller Teil der dynamischen Suszeptibilität im $\pm J$ -Modell in konstantem äußeren Feld H_0 , für $N = 5$

Neben dem Maximum ohne Feld T_{M1} ist ein zweites bei T_{M2} zu finden. T_{M1} folgt demselben Arrhenius-Gesetz wie ohne Feld (63,64). T_{M2} hängt nur von H_0 ab nicht aber von ω (vergl. Abb. II.6a.). T_{M1} dagegen hängt nur von ω ab, nicht von H_0 (vergl. Abb. II.5.). Dieses Verhalten ist den experimentellen Befunden in sehr verdünnten $(Eu_xSr_{1-x})S$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

ähnlich /102/. **Abb. II.6b.** zeigt die gemessene Suszeptibilität. Sie wurde zwar ohne äußeres Feld gemessen, die zu diesem Experiment entwickelte Theorie hat jedoch unserem Modell ähnliche Annahmen getroffen.

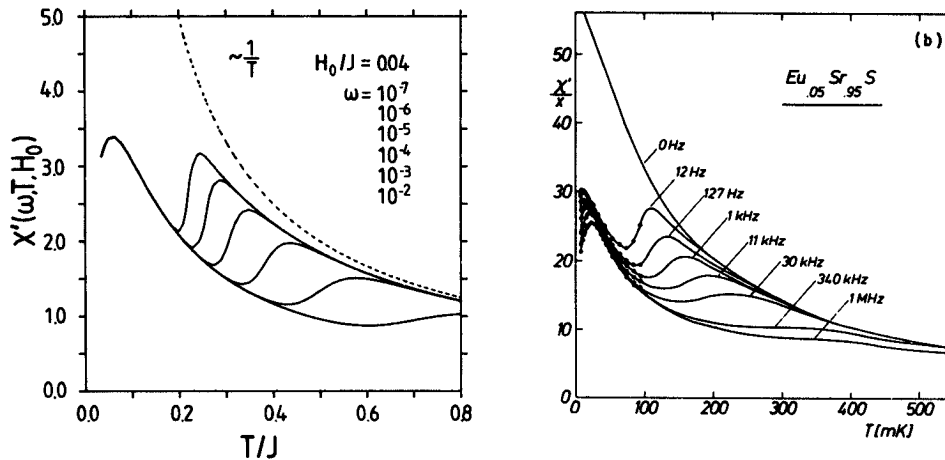


Abb. II.6.

Reeller Teil der dynamischen Suszeptibilität

(a) im $\pm J$ -Modell in konstantem äußeren Feld

$H_0 = 0.04$ für verschiedene Frequenzen
und $N = 5$.

(b) gemessen in $(Eu_xSr_{1-x})S$ /aus Ref. 102/.

Das theoretische Modell besteht aus **wechselwirkenden** Clustern, die Spins sind durch eine Dipol-Dipol Wechselwirkung gekoppelt. Ein Cluster befindet sich in dem dipolaren Feld der anderen. Dieses wird als eine Art Molekularfeld betrachtet und bringt einen Korrekturterm von $\cosh^{-2}(h_Q)$ in die Suszeptibilität. (21) zeigt, daß dieser Faktor für das ähnliche Verhalten verantwortlich ist, auch wenn das dipolare Feld in /102/ eine Verteilung hat und nicht konstant ist. Wegen dieser Korrektur kann T_{M2} in dem Bereich, wo ohne Feld (ohne Wechselwirkung zwischen Cluster) keine Frequenzabhängigkeit zu beobachten ist (sehr geringe Temperaturen) auch keine solche Abhängigkeit zeigen. Experimentell folgt sowohl T_{M1} als auch T_{M2} einem Arrhenius-Gesetz.

4. Gauß'sches Modell

Dieses Modell hat eine allgemeinere Verteilung der Wechselwirkungskonstanten

$$P(J) = (2\pi(\Delta J)^2)^{1/2} \exp \left\{ \frac{-J^2}{2(\Delta J)^2} \right\} . \quad (69)$$

In (69) variiert nicht nur das Vorzeichen, sondern auch die Stärke der Kopplungen. Damit stellt $P(J)$ eine realistischere Näherung realer Systeme dar.

4.1. Gauß'sches Modell ohne äußeres Feld

Die Spektralauflösung der Matrix Γ in (5) mit Gauß-verteilten Kopplungen für beliebige N kann nicht in geschlossener Form angegeben werden. Auch wenn dies der Fall wäre, könnte man wahrscheinlich die Mittelung über (69) nicht analytisch durchführen. Weil sie die Ausführung eines N -dimensionalen Integrals verlangt, ist die Mittelung auch numerisch ein Problem. Wir werden das mehrdimensionale Integral

$$[A] = \int dJ \, P(J) A(J) \quad (70)$$

mit der Monte Carlo Methode berechnen

$$[A]' = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M (P(J_k) A(J_k)) , \quad (71)$$

wobei die Koordinatenpunkte J_k zufällig gewählt werden. Für $M \rightarrow \infty$ für eine symmetrische Verteilung erwartungsgemäß $[A]' \rightarrow [A]$. Bei Werten von $M \approx 5 \cdot 10^4/N$ sind die statistischen Schwankungen kleiner als 0.5%. Die Eigenwerte und Ei-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

genvektoren von Γ werden ebenso numerisch bestimmt. Das diskrete Spektrum geht wegen (70) in ein kontinuierliches über. Dies ist der Unterschied zu dem $\pm J$ -Modell, und ist die Folge der kontinuierlichen Verteilung (69). Es wird erwartet, daß die genaue Form von $P(J)$ keine wichtige Rolle spielt, maßgebend ist nur, ob die Verteilung stetig ist.

Zunächst soll die thermoremanente Magnetisierung untersucht werden. Das System wird in starkem konstanten Feld abgekühlt, das Feld ausgeschaltet und die Magnetisierung als Funktion der Zeit gemessen. Dies entspricht einer Lösung der Bewegungsgleichungen mit der Anfangsbedingung $m_k=1$, für jedes k . **Abb. II.7a.** zeigt diese Lösung bei niedrigen Temperaturen. Nach der schnellen Relaxation für kurze Zeiten zerfällt die Magnetisierung über 8 Größenordnungen in der Zeit logarithmisch. Der abgebildete Fit ergibt

$$M(t) = 0.320 - 0.075 \cdot T \cdot \ln(t). \quad (72)$$

(72) ist mit dem Resultat einer Monte Carlo Simulation von Spinketten der Länge $N = 1000$ /93/

$$M(t) = 0.285 - 0.07 \cdot T \cdot \ln(t) \quad (73)$$

zu vergleichen.

Der Wert der Remanenz für eine unendliche Kette bei $T = 0$ kann leicht überlegt werden /93/; er ist $1/3$. (72) gilt für $N = 4$. Ein ähnlicher Fit für $N = 5, 6, 7, 8, 9, 10$ mit der asymptotischen Form

$$M(t) = M_N(t) \left(1 + \frac{p}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right), \quad (74)$$

wobei $M_N(t)$ die Magnetisierung des endlichen Clusters ist und p gefittet wird, ergibt

$$M(t) = 0.330 - 0.076 \cdot T \cdot \ln(t). \quad (75)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

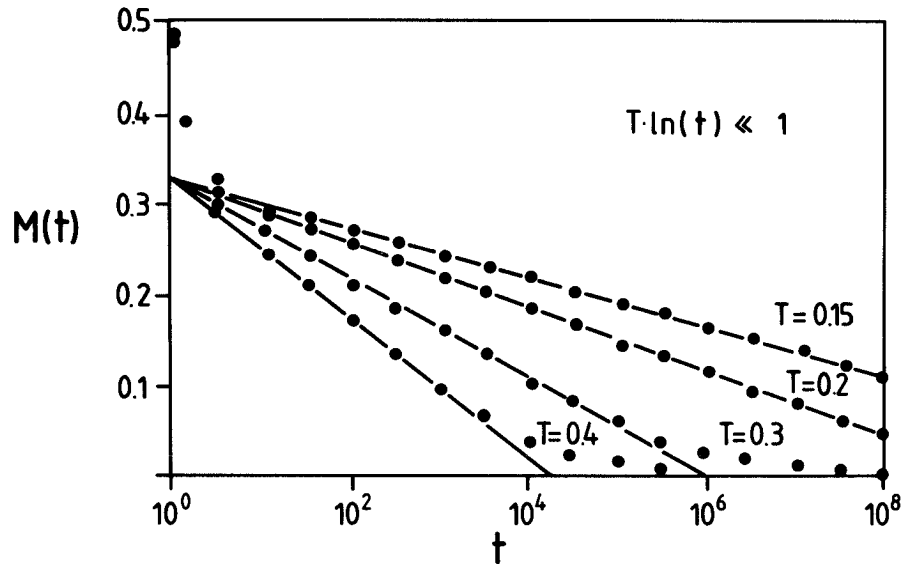


Abb. II.7a.

Remanenz in dem Gauß'schen Modell für $N = 4$.

Die funktionale Abhängigkeit der Magnetisierung von den Zeit- und Temperaturvariablen nur durch $W = (T/\Delta J) \cdot \ln(t)$ gilt nicht ausschließlich für niedrige Temperaturen. Wie in **Abb. II.7b.** dargestellt, skalt die Magnetisierung wie

$$m(t, T) = f(T \cdot \ln(t)) \quad (75a)$$

in dem gesamten untersuchten Temperatur- und Zeitbereich. Damit verhält sich dieses Modell wie diejenigen reale Systeme, deren experimentelle Daten auf die "master"-Kurve (75a) kondensiert werden können /118/. Ein wichtiger Unterschied besteht aber darin, daß in unserem Modell $T_c = 0$ ist, und daher (75a) ein Skalenverhalten **oberhalb** der kritischen Temperatur beschreibt. In /118/ wird die Universalität dieses Verhaltens **unterhalb** von T_c betont.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

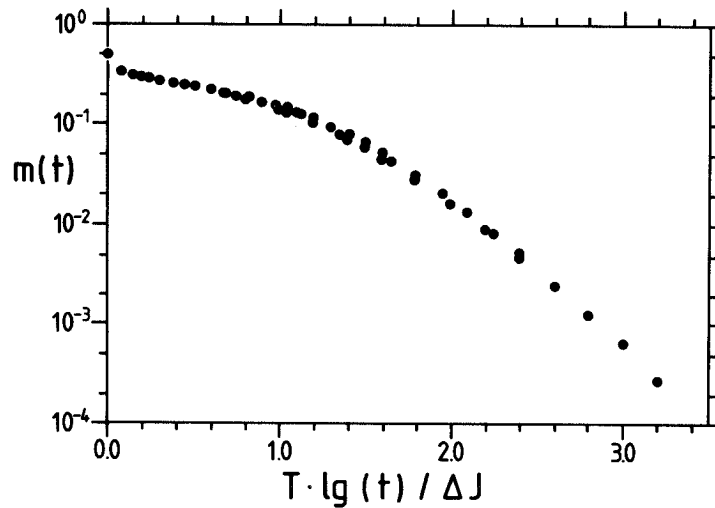


Abb. II.7b.

Skalenverhalten der Magnetisierung in dem Gauß'schen Modell für $N=4$. Aufgetragen wurden dieselben Daten wie in Abb. II.7a.

Dieses Modell zeigt also Remanenz und logarithmischen Zerfall der Magnetisierung. Es enthält keine Frustration, hat aber ein kontinuierliches Spektrum. Das $\pm J$ -Modell enthält Frustration, hat ein diskretes Spektrum, zeigt Remanenz, aber keinen logarithmischen Zerfall.

Im folgenden soll die dynamische Suszeptibilität beschrieben, und gezeigt werden, daß das Spektrum tatsächlich kontinuierlich ist. $\chi(\omega, T) = \chi'(\omega, T) + i \cdot \chi''(\omega, T)$ wird nach (19) und (71) berechnet. **Abb. II.8a.** zeigt χ' und χ'' , **Abb. II.8b.** das Ergebnis eines dynamischen Experimentes.

Wenn man die offensichtliche Frequenzabhängigkeit von T_f untersucht, findet man, daß für $\omega \leq 10^{-3}$ ein Arrhenius-Gesetz erfüllt wird.

$$J T_f^{-1} = 0.332 - 0.254 \ln(\omega) \quad (76)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

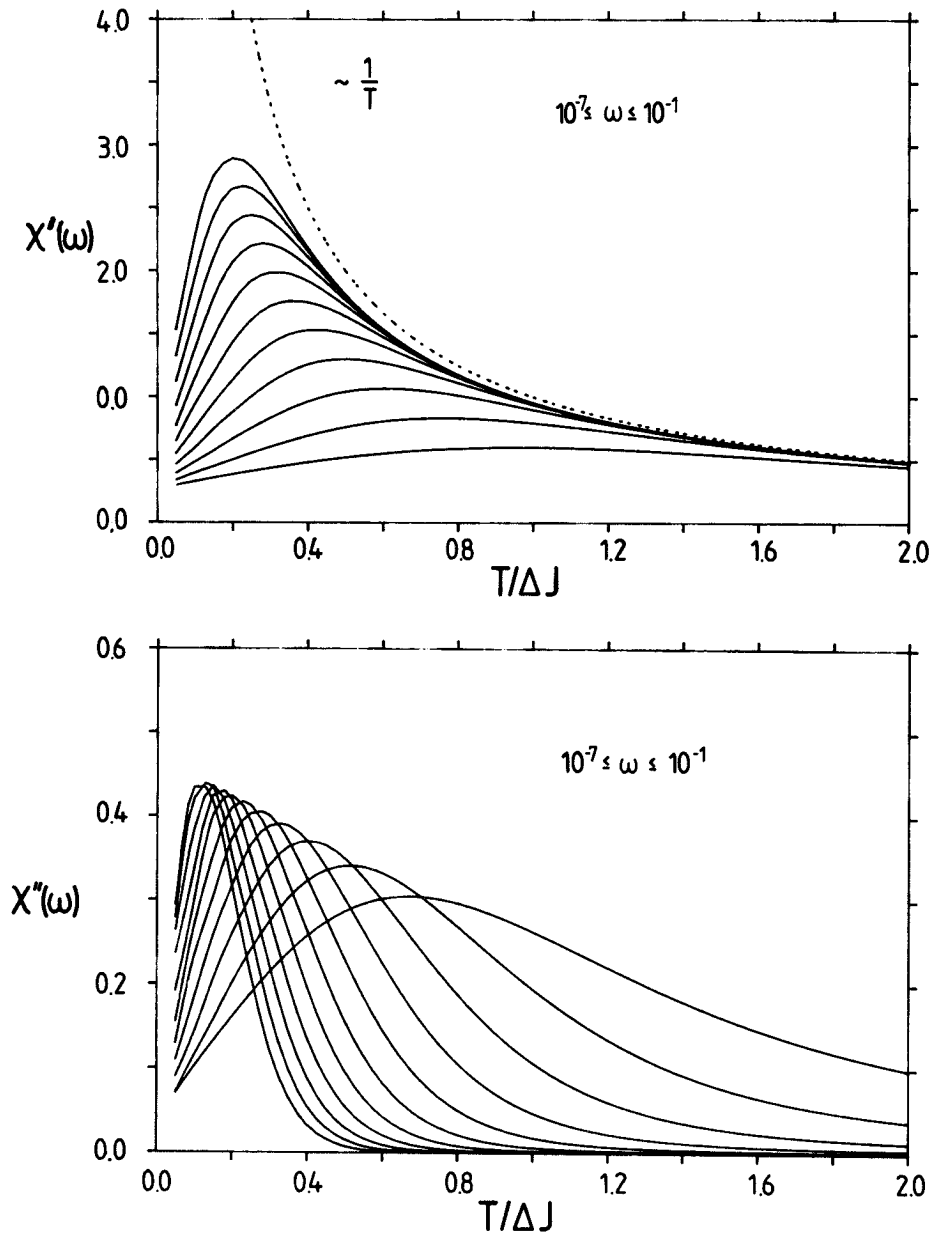


Abb. II.8a.

Reeller und imaginärer Teil der Dynamischen Suszeptibilität $\chi = \chi' + i \cdot \chi''$ für verschiedene Frequenzen. Gauß'sches Modell mit $N = 4$.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

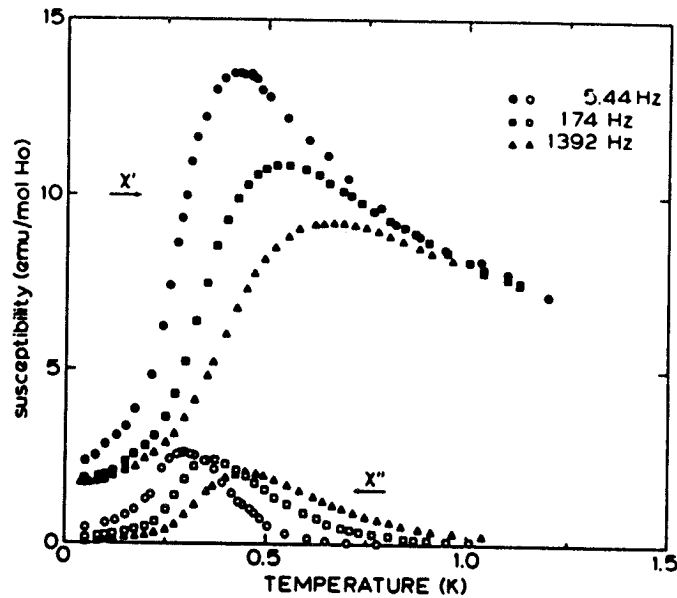


Abb. II.8b.

Reeller und imaginärer Teil der Dynamischen Suszeptibilität für verschiedene Frequenzen in $(\text{Ho}_2\text{O}_3)_{0.08}(\text{B}_2\text{O}_3)_{0.92}$ /aus 119/.

Sowohl das $\pm J$ - als auch das Gauß'sche Modell beschreiben also ein thermisch aktiviertes Hopping über Energiebarrieren von $E_0 \approx 4(\Delta J)$.

χ zeigt viele Eigenschaften, die in dynamischen Experimenten beobachtet wurden. Das Maximum in dem absorptiven Teil (χ'') fällt nicht mit dem Maximum in dem dispersiven Teil (χ') zusammen, sondern mit dessen erstem Wendepunkt. Umgekehrt hat χ' das Maximum bei derselben Temperatur, wo χ'' den zweiten Wendepunkt hat. Dieses Verhalten kann in dem Fall der einfachen magnetischen Relaxation durch die Casimir und du Pré-Gleichungen erklärt werden /120/.

$$\chi' = \chi_s + \frac{\chi_T - \chi_s}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad , \quad \chi'' = \omega \tau \frac{\chi_T - \chi_s}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (77)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

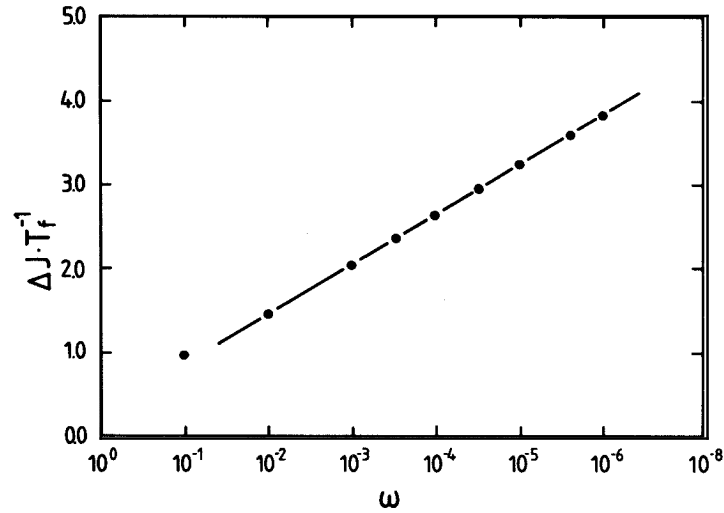


Abb. II.9.

Frequenzabhängigkeit der Einfriertemperatur im Gauß'schen Modell mit $N = 5$

Hierbei ist χ_T die isotherme Suszeptibilität im Grenzfall $\omega \rightarrow 0$, χ_S die adiabatische im Grenzfall $\omega \rightarrow \infty$, τ die (einzige) Relaxationszeit. Wenn es tatsächlich nur eine Relaxationszeit τ gäbe, würde χ'' einem sech ($\ln \omega \tau$) Gesetz folgen. **Abb. II.10.** zeigt, daß dies nicht der Fall ist, die Kurvenschar für $\chi''(\omega)$ ist viel breiter, besonders bei niedrigen Temperaturen.

Ein weiteres Argument für ein Relaxationszeit-Spektrum liefern die Argand-Diagramme (mit anderem Namen Cole-Cole Plots). Es wird dabei $\chi''(\omega)$ gegen $\chi'(\omega)$ aufgetragen für dieselbe Frequenz ω . Für den Fall einer einzigen Relaxationszeit folgt aus (77)

$$\left(\chi'(\omega) - \frac{\chi_T + \chi_S}{2} \right)^2 + \left(\chi''(\omega) \right)^2 = \left(\frac{\chi_T - \chi_S}{2} \right)^2 \quad (78)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

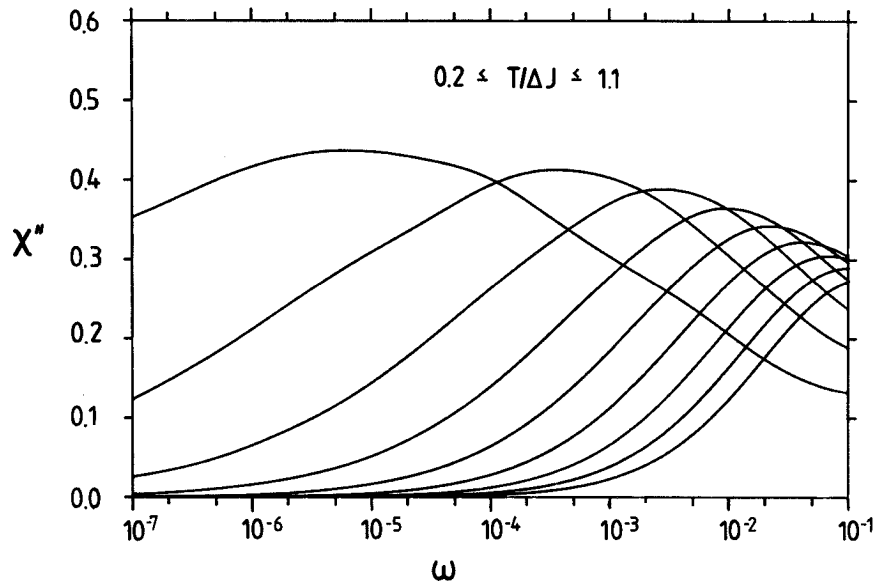


Abb. II.10.

Frequenzabhängigkeit der dynamischen Suszeptibilität im Gauß'schen Modell bei verschiedenen Temperaturen.

Das Argand-Diagramm ist also ein Halbkreis. Abweichungen von (78) sind Zeichen einer Verteilung von Relaxationszeiten.

Abb. II.11. zeigt an, daß es in dem Gauß'schen Modell eine breite Verteilung von τ gibt.

Es ist üblich, einen Parameter als Maß der Breite der Verteilung einzuführen /121/,

$$d = 1 - \frac{2 \chi''_{\max}}{\chi_T - \chi_S} \quad (79)$$

d ist gleich Null für eine einzige Relaxationszeit, und gleich 1 für eine unendlich breite Verteilung. Unter der Annahme, daß die Datenpunkte in **Abb. II.11.** auf Kreisbögen liegen, kann d aus den Fits (durchgezogene Linie) bestimmt werden. **Abb. II.12.** zeigt den Abweichungsparameter d als Funktion der Temperatur.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

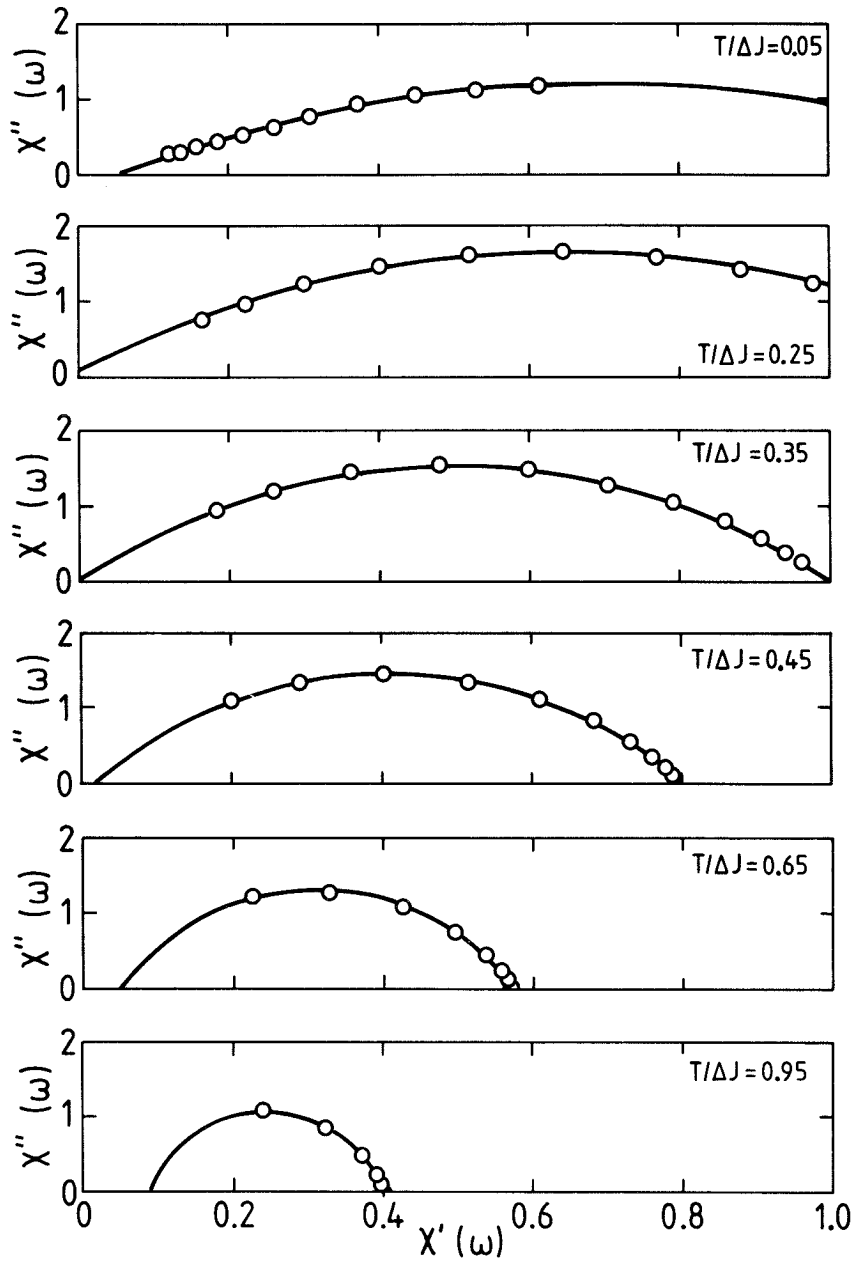


Abb. II.11.

Argand-Diagramme für die dynamische Suszeptibilität im Gauß'schen Modell für verschiedene Temperaturen und $N = 4$.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

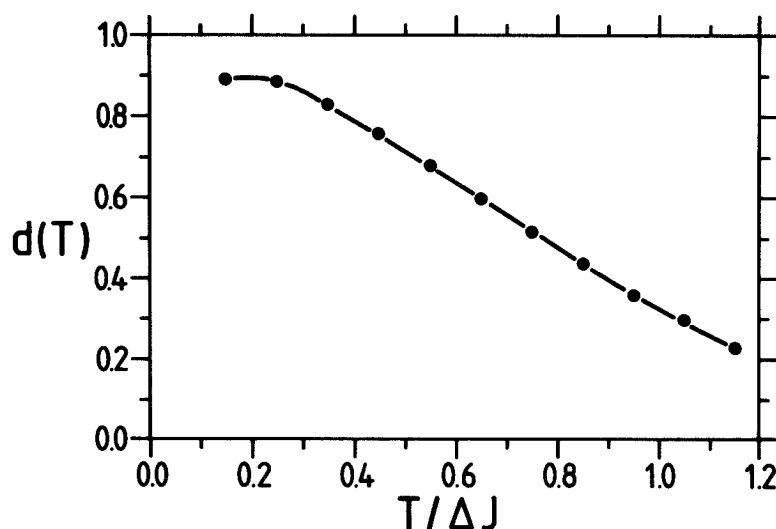


Abb. II.12.

Die Breite der Relaxationszeitverteilung
im Gauß'schen Modell mit $N = 4$

Die bei hohen Temperaturen relativ schmale Verteilung breitet sich mit sinkender T drastisch aus. Aus (77) ist es klar, daß auch für eine Verteilung von Relaxationszeiten $P(\tau)$, eine mittlere Relaxationszeit $\bar{\tau} \approx 1/\omega$ definiert werden kann. Sie kann leicht aus dem Maximum in $\chi''(\omega)$ bestimmt werden. **Abb. II.10.** zeigt, daß in dem untersuchten Temperaturbereich ein wohldefiniertes Maximum zu finden ist. Der absorptive Teil der dynamischen Suszeptibilität liefert also mehr Information über die Dynamik des Einfrierens als der dispersive Teil.

In **Abb. II.13.** wurde $\ln(\bar{\tau})$ gegen $1/T$ aufgetragen. Das lineare Verhalten bei niedrigen Temperaturen zeigt, daß auch $\bar{\tau}$ einem Arrhenius-Gesetz folgt

$$\bar{\tau} = 0.75 e^{2.45 \cdot \Delta J / T} \quad (80)$$

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

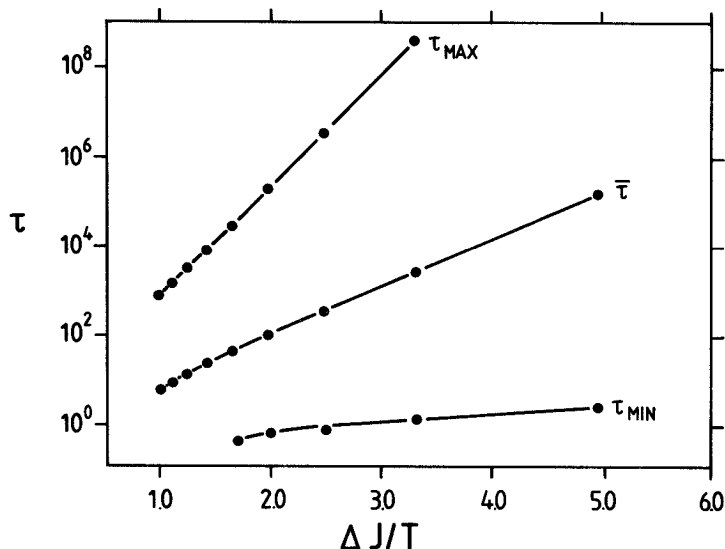


Abb. II.13.

Temperaturabhängigkeit der mittleren Relaxationszeit $\bar{\tau}$, wie auch von τ_{MIN} und τ_{MAX} .

Neben $\bar{\tau}$ kann man noch zwei weitere charakteristische Relaxationszeiten, τ_{MAX} und τ_{MIN} , aus $\chi''(\omega)$ bestimmen, und zwar aus den Frequenzen, für die $\chi''(\omega)$ verschwindet. Die unsymmetrische Form von $\chi''(\omega)$ deutet darauf hin, daß τ_{MAX} viel schneller als $\bar{\tau}$ oder τ_{MIN} zunimmt. Abb. II.13, in dem auch τ_{MAX} und τ_{MIN} aufgetragen sind, zeigt, daß dies tatsächlich der Fall ist. Es sind also zwei Effekte im Spektrum zu beobachten: einerseits breitet sich die Verteilung der Relaxationszeiten mit sinkender Temperatur stark aus und wird immer unsymmetrischer, andererseits wächst die mittlere Relaxationszeit exponentiell an. Obwohl wichtige Ingredienzen eines richtigen Néelschen Modells in unserem Cluster-Bild fehlen (alle Cluster sind von derselben Größe), zeigt das dynamische Verhalten eine gewisse Ähnlichkeit zu den Relaxations-Effekten in bestimmten Isolator-Spingläsers bei Temperaturen nahe der Einfriertemperatur /102/.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

4.2. Gauß'sches Modell in konstantem äußeren Feld

Es ist von Interesse zu untersuchen, wie sich die dynamische Suszeptibilität unter dem Einfluß eines äußeren Feldes verhält. Wenn man **Abb. II.8.** mit (21) vergleicht, wird man feststellen, daß das Feld H_0 den größten Einfluß durch den Faktor $\cosh^{-2}(H_0/T)$ bei niedrigen Temperaturen ausüben wird. Da die für das dynamische Verhalten relevanten Merkmale von $\chi(\omega)$ eine ziemlich starke Frequenzabhängigkeit aufweisen, ist es sinnvoll, das Feld H_0 auch an einer frequenzabhängigen Skala zu messen. Andererseits ist es klar, daß ein konstantes Feld das Maximum in $\chi'(\omega)$ stark abrundet, die Abweichung vom Curieschen Gesetz verstärkt und dadurch die Frequenzabhängigkeit mindert, wie in **Abb. II.14.** dargestellt.

In (an der erwähnten Skala) größeren Feldern ist das Maximum in $\chi'(\omega, T)$ sehr breit, T_f kann daher nur sehr ungenau bestimmt werden. Es ist aber üblich, T_f aus dem Maximum des absorptiven Teils zu bestimmen. Bei wachsendem H_0 verschiebt sich dieses T_f zunächst zu höheren Temperaturen, dann ab einem von logarithmisch abhängenden Wert, $H^*(\omega) \sim \ln(\omega)$, verschiebt sich das Maximum zu kleineren Temperaturen.

Demnach bestimmt man die Feldabhängigkeit

- a) für kleinere Felder bei größeren Frequenzen ($\omega \sim 10^{-1}$),
- b) für größere Felder bei kleineren Frequenzen ($\omega \leq 10^{-4}$).

$$\begin{aligned} \text{a) } T_f(\omega, H_0) &= T_f(\omega, 0) + c \cdot H_0^2 \\ \text{b) } T_f(\omega, H_0) &\sim H^x, \quad x < 1.0 \end{aligned} \quad (81)$$

Der Exponent x im Fall b) kann aus den wenigen Datenpunkten nicht genauer bestimmt werden. Berechnung des Einflusses von noch größeren Feldern ist aus numerischen Gründen nicht möglich (s. **Abb. II.15.a.**).

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

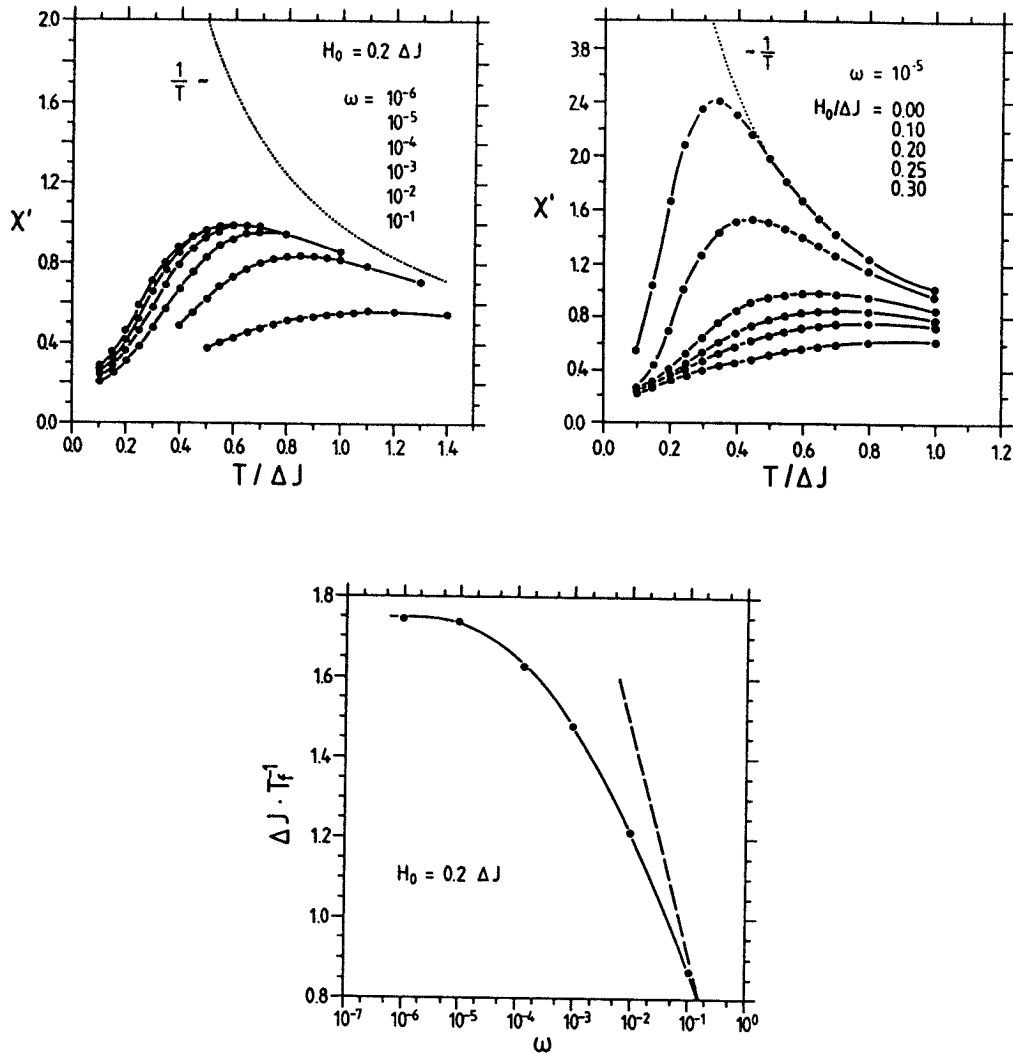


Abb. II.14.

Reeller Teil der Dynamischen Suszeptibilität als Funktion der Temperatur in konstantem äußeren Feld im Gauß'schen Modell mit $N = 6$,

- (a) für verschiedene Frequenzen bei gegebener Feldstärke,
- (b) für verschiedene Feldstärken bei gegebener Frequenz,
- (c) Abweichung vom Arrhenius-Gesetz (gestrichelte Linie) ohne Feld.

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

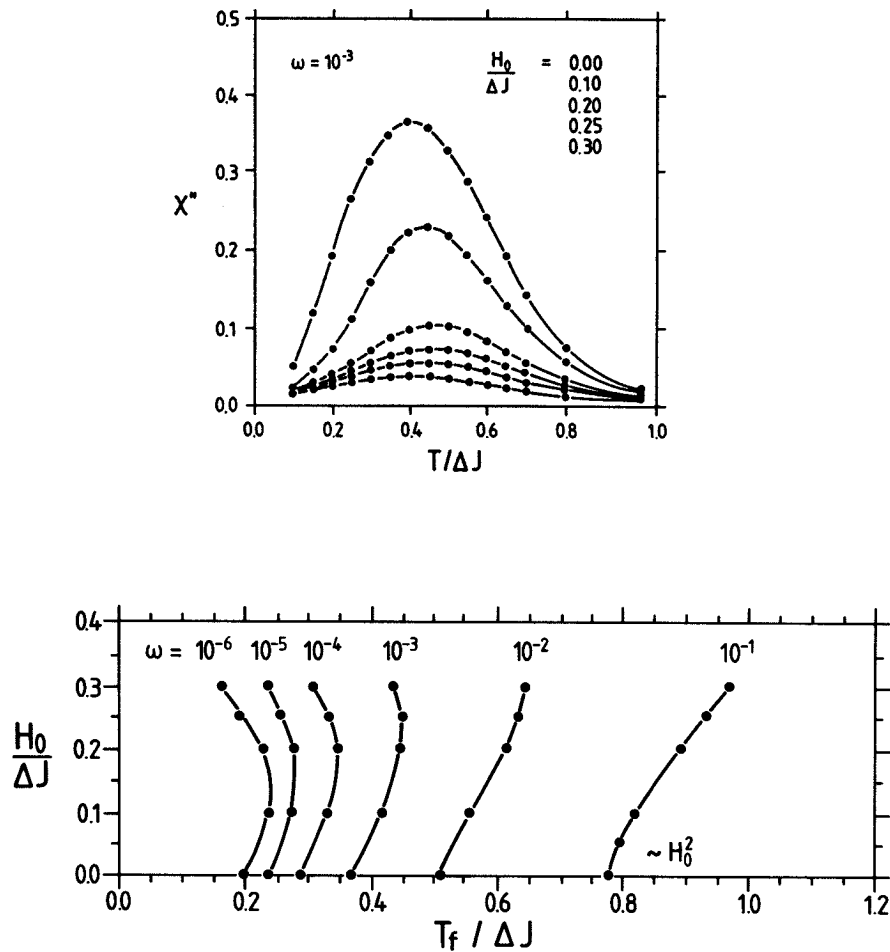


Abb. II.15.

- (a) Absorptiver Teil der dynamischen Suszeptibilität im Gauß'schen Modell im konstanten Feld mit $N = 6$,
- (b) Verschiebung des Maximums unter dem Einfluß des konstanten äußeren Feldes H_0 in $\chi''(\omega, T)$.

Das Verhalten von $T_f(\omega, H_0)$ hat einige den in Experimenten und Monte Carlo Simulationen beobachteten "kritischen Feldlinien" ähnliche Eigenschaften /122/. So zeigt H^* dieselbe Frequenzabhängigkeit, (81) ein im allgemeinen ähnliches Verhalten in großen und kleinen Feldern. Unter-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

schiede gibt es in der viel stärkeren Frequenzabhängigkeit, in der genauen Form der Kurven in **Abb. II.15b.** und in dem Wert des Exponenten x in (81), der in /122/ $2/3$ beträgt. Ein qualitativer Unterschied liegt darin, daß es in unserem Fall einen Feldbereich gibt, in dem T_f zu höheren Temperaturen verschoben wird. Erst in größeren Feldern kehrt diese Tendenz um. Es gibt sowohl dynamische als auch statische Experimente, die in gewissen Spingläsern solches Verhalten finden /123/. Der Grund hierfür im Falle eines dynamisch definierten $T_f(\omega, H)$ ist nicht klar. Bei tiefen Temperaturen und niedrigen Feldern wird die Relaxation durch Überwinden von Barrieren der freien Energie bestimmt. Da das äußere Feld die Anzahl und wahrscheinlich auch die Höhe dieser Barrieren vermindert, sollte T_f auch schon von kleinen Feldern zu kleineren Temperaturen verschoben werden.

Es gibt keinen Phasenübergang bei $T \neq 0$ in unserem Modell, daher sollte jede Größe in H_0 analytisch sein und (weil das Vorzeichen des Feldes keine Rolle spielt) die folgende Entwicklung haben

$$T_f(\omega, H_0) = T_f(\omega, 0) - H_0^2 \cdot f(T) + \mathcal{O}(H_0^4). \quad (82)$$

In unserem Fall hat $f(T)$ negative Werte.

Unsere Daten sind für jede Kopplungskonfiguration numerisch exakt. Nach der unexakt ausgeführten Konfigurationsmittelung haben sie eine statistische Ungenauigkeit von etwa 5% gegenüber den Daten ohne Feld, wo 0.5% erzielt werden konnte. Innerhalb dieser Genauigkeit ist es schwer, finite size Effekte zu analysieren, zumal wegen des Rechenaufwands der Invertierung von $2^N \times 2^N$ komplexen Matrizen nur kleine Cluster $3 \leq N \leq 7$ untersucht werden konnten. Die Invertierung von 128×128 ($N=7$) komplexen Matrizen ist bereits sehr aufwendig. Sie verlangt etwa 10^7 Gleitkomma Operationen für einen Wert der Frequenz, des äußeren Feldes H_0 und der Temperatur T . Auf einem Cray-X-MP Rechner, wo Teile des

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

Programms, insbesondere die Invertierungsroutine vektorisiert werden können, wird, um die oben genannte Genauigkeit der Konfigurationsmittelung zu erreichen, für $N = 7$ etwa 150 Stunden Rechenzeit benötigt. Aus diesem Grund war es nicht möglich, größere Systeme zu untersuchen, um eine finite-size Analyse durchführen zu können. Ohne quantitative Angaben sollen hier zumindest die Tendenzen festgehalten werden.

Im Hochtemperaturbereich (Curie-Verhalten) und bei niedrigen Temperaturen ($\chi \rightarrow 0$) treten natürlich keine finite size Effekte auf. Sie sind bei $T \approx T_f$ am stärksten zu beobachten und runden das Maximum mit wachsendem N etwas ab. Dies verschiebt die Maxima aber nur sehr geringfügig, so daß die Änderung in z.B. $T_f(\omega, H_0)$ bequem innerhalb der Konfigurationsfehlerbalken bleibt. $N = 6$ ist somit repräsentativ für den untersuchten Bereich.

5. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Dynamik in dem eindimensionalen Ising-Modell mit $\pm J$ - oder Gauß-verteilten Zufallskopplungen untersucht. Weil ein Ensemble von kleinen Ringen betrachtet wurde, hat man angenommen, daß das Modell dieser nicht-wechselwirkenden Cluster ein vereinfachtes "Néelsches Bild" von den dynamischen Vorgängen um T_f , auch von höherdimensionalen kurzreichweitigen Spinglas-Systemen, liefert.

In dem $\pm J$ -Modell ohne Feld kann durch die periodischen Randbedingungen Frustration auftreten. Dies ist der Grund dafür, daß die dynamischen Größen das gleiche Verhalten zeigen wie die in höheren Dimensionen.

In dem Gauß'schen Modell findet man viele charakteristische Eigenschaften realer Systeme, vor allem von Isolator-Spin-

II. Dynamik in 1-d Spinglas Modellen

gläsern. Man beobachtet einen langsamen (logarithmischen) Zerfall der Magnetisierung, frequenzabhängige Maxima (Arrhenius-Gesetz) in den reellen und imaginären Teilen der dynamischen Suszeptibilität. Der absorptive Teil liefert Beweis dafür, daß es in diesem Modell eine breite Verteilung von Relaxationszeiten gibt. Sie beitet sich mit sinkender Temperatur aus, und die mittlere Relaxationszeit divergiert exponentiell. Dieses Verhalten zeigt eine sehr starke Ähnlichkeit zur Dynamik in einem Holmium-Borat Glas.

Das Verhalten der dynamischen Suszeptibilität in konstantem äußeren Feld zeigt zu manchen realen Spingläsern ähnliches Verhalten. Das Maximum in dem absorptiven Teil der Suszeptibilität wird vom Feld zunächst zu höheren, dann aber zu niedrigeren Temperaturen verschoben.

Dynamische Experimente an einem quasi-eindimensionalen Spinglas /110/ können mit den obigen Resultaten verglichen werden; die Übereinstimmung ist gut, bis auf die relativ kleine Abweichung vom Arrhenius-Gesetz im Experiment. Obwohl nur Cluster mit eindimensionaler Struktur und von gegebener Größe betrachtet wurden, zeigen die untersuchten dynamischen Größen, daß die Cluster-Näherung der Dynamik gewisser Spinglas-Systeme gerechtfertigt ist. Die Ähnlichkeit zu realen Spingläsern weist darauf hin, daß viele charakteristische Spinglas-Eigenschaften rein dynamischen Ursprungs sind.

III.

ITERATIVE MOLEKULARFELD-METHODE

1. Problemstellung

Was auch immer die untere kritische Dimension d^* sein mag, es herrscht Einigkeit darüber, daß in $d = 2$ kein Phasenübergang stattfindet /49,124-126/. In thermischem Gleichgewicht folgt die magnetische Suszeptibilität dem Curieschen Gesetz, also

$$\lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_{eq}(T, H)}{H} = \frac{1}{T} \quad (1)$$

wobei M_{eq} die totale Gleichgewichtsmagnetisierung, H das äußere magnetische Feld bezeichnet und die Boltzmannsche Konstante $k_B = 1$ gesetzt wurde. Es ist zwar nicht bewiesen, man glaubt aber, daß die feldgeköhlte Magnetisierung, solange die Abkühlung langsam erfolgt, der Gleichgewichtsmagnetisierung gleich ist. Kinzel und Binder /49,126/ finden aber in ihren Monte Carlo Simulationen für das zweidimensionale Ising-Modell mit Gauß'scher Kopplungsverteilung starke Abweichungen vom Curieschen Gesetz in der feldgeköhlten Suszeptibilität. Insbesondere finden sie, daß bei niedrigen Temperaturen und kleinen Kühlraten die Magnetisierung einen konstanten Wert annimmt, die Höhe dieser Plateaus hängt von der Stärke des äußeren Feldes ab, nicht aber von den Kühlraten. Dieses Verhalten ist den experimentellen Befunden an reellen Spingläsern sehr ähnlich /126,127/.

In starkem Feld wird die Magnetisierung gesättigt, daher gilt $M/H \sim H^{-1}$ trivialerweise. Nicht-trivial ist dagegen das beobachtete Potenzgesetz

III. Iterative Molekularfeld-Methode

$$M_{eq}(T=0, H)/H \sim H^{-x} \quad (2)$$

für kleinere Felder, mit $x = 0.28 \pm 0.06$. (2) steht nicht im Widerspruch mit der Tatsache, daß die Nullfeld-Suszeptibilität bei $T = 0$ divergiert (Curiesches Gesetz, (1)). Die experimentellen Resultate für $M(T=0, H)$ können mit (2) gefittet werden, der Exponent x ist aber viel kleiner.

Wenn man annimmt, daß (2) Gleichgewichtseigenschaften widerspiegelt, kann man durch die Bestimmung von x als Funktion der Dimension, die untere kritische Dimension d^* finden, weil der Exponent x für $H \rightarrow 0$ genau gleich Null sein muß für die Dimensionen $d \geq d^*$ (Phasenübergang), während $x \neq 0$ für $d < d^*$ (kein Phasenübergang).

Man möchte also (2) in $d = 2, 3, 4, 5$ für kleinere Felder untersuchen. Es müßten dabei folgende Bedingungen erfüllt werden:

1. Die Abkühlrate muß klein genug sein, um sicher zu stellen, daß man die Gleichgewichtsmagnetisierung erhält;
2. Die Systemgröße muß groß genug sein, weil die Korrelationslänge mit kleinem H divergiert;
3. Die Konfigurationsmittelung über die Kopplungsverteilung muß über viele Konfigurationen ausgeführt werden, um eine gute statistische Genauigkeit für $M(T=0, H)$ zu erhalten.

Aus 1. -2. -3. folgt: Mangels analytischer Lösung braucht man ein numerisches Verfahren, das ausreichend schnell ist, so daß man den Exponenten x in (2) mit guter Genauigkeit bestimmen kann.

III. Iterative Molekularfeld-Methode

2. Numerisches Verfahren, Resultate

Eine neue numerische Methode, die den oben genannten Bedingungen entspricht, wurde vor kurzem von Soukoulis, Levin und Grest in einer Reihe von Artikeln vorgeschlagen /128-133/. Hierin untersucht man das freie Energie Funktional im Raum der mittleren lokalen Magnetisierungsvariablen

$$m_i = \langle s_i \rangle, \quad i = 1, \dots, N.$$

Das freie Energie Funktional soll in zwei Terme wie folgt zerlegt werden:

$$F(m_1, \dots, m_N) = F_{MF}(m_1, \dots, m_N) + F_R(m_1, \dots, m_N) \quad (3)$$

Der erste Term auf der rechten Seite stellt die freie Energie in Molekularfeld-Näherung berechnet dar (auch Weiss'scher Term genannt)

$$F_{MF} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} m_i m_j - \frac{T}{2} \sum_i \left\{ (1+m_i) \ln \frac{1+m_i}{2} + (1-m_i) \ln \frac{1-m_i}{2} \right\} \quad (4)$$

Der zweite ist der sogenannte Onsagersche Term. Dieser kompensiert den in F_{MF} mitgerechneten Beitrag eines lokalen Momentes m_i zu seinem eigenen lokalen Feld. Ein mittleres Moment m_i erzeugt nämlich ein mittleres Feld $h_j^* = J_{ij} m_i$ am Gitterplatz j . Dieses Feld induziert wiederum ein mittleres Moment $m_j^* = J_{ij} \chi_{jj} m_i$. (Hierbei ist die lokale Suszeptibilität $\chi_{jj} = \partial m_j / \partial h_j$.) Das Moment m_j^* erzeugt wiederum ein mittleres Feld $h_i^* = J_{ij}^2 \chi_{jj} m_i$ am Gitterplatz i . Dieses lokale Feld muß von dem Molekularfeld h_i abgezogen werden, weil h_i per definitionem das mittlere Feld am Gitterplatz i ist, in Abwesenheit des Spins s_i . In einem Ferromagneten ist $F_R(\underline{m})$ zu vernachlässigen im Vergleich zu

III. Iterative Molekularfeld-Methode

$F_{MF}(\underline{m})$. In einem Spinglas, wo die Austauschwechselwirkungen J_{ij} Zufallsvariablen sind, haben die beiden Terme einen vergleichbaren Betrag.

Der gekoppelte Satz der selbstkonsistenten Bewegungsgleichungen für die Variablen m_i wird von den Variationsgleichungen

$$\frac{\partial F}{\partial m_i} = 0 \quad (5)$$

abgeleitet, mit dem Resultat:

$$m_i = \tanh \left\{ \frac{1}{T} \left(\sum_j J_{ij} m_j + H - \frac{\partial F_R}{\partial m_i} \right) \right\}. \quad (6)$$

Für das unendlich langreichweitige Ising-Modell wurde $F_R(\underline{m})$ von Thouless, Anderson und Palmer (TAP) im Rahmen einer linearen Antwort Theorie berechnet /42/. Die Gleichungen (6) können numerisch iterativ gelöst werden /134,135/. Die Mitberücksichtigung des Termes $F_R(\underline{m})$ führt aber zu Konvergenzschwierigkeiten, die sich nicht einmal mit präziseren Iterationsverfahren /134/, die rechenintensive Matrixalgebra verwenden, überwinden lassen. Mit den TAP-Gleichungen erhält man in 90% der Fälle entweder keine Konvergenz oder unphysikalische Resultate. Auch die gefundenen Minima sind im besten Fall nur stückweise stetige Funktionen der Temperatur. Es ist noch weitgehend ungeklärt, ob dies eine Eigenschaft der TAP-Gleichungen für endliche Systemgrößen ist /137/ oder nur die Unzulänglichkeit des numerischen Verfahrens widerspiegelt /134/.

Soukoulis und Mitarbeiter vernachlässigen daher den Onsager-schen Term ganz. Das ist exakt bei $T = 0$ (weil $m_i = \pm 1$, für alle m_i) und bei sehr hohen Temperaturen ($F_{MF} \sim \Theta(T)$, während $F_R \sim \Theta(T^{-1})$). Die verbleibenden Molekularfeld-Gleichungen können ohne Konvergenzprobleme gelöst werden. Auf diese Weise findet man in jedem Fall Minima auf der freien Energie Oberfläche. Weil die Gleichungen von einfa-

III. Iterative Molekularfeld-Methode

cher Struktur sind, ist das Iterationsverfahren schnell. Es wird daher möglich, vergleichsweise große Systeme (10^4 Spins) zu untersuchen.

Zu diesem Zweck nimmt man ein endliches System mit periodischen Randbedingungen von der Größe L^d in d Dimensionen und löst den gekoppelten Satz der einfachen Molekularfeld-Gleichungen in konstantem äußeren Feld bei einer sehr hohen Temperatur in der paramagnetischen Phase, wo die Lösung eindeutig ist und die Iteration sehr schnell konvergiert. Dann kühlt man das System langsam ab, bis zu $T = 0$. Schließlich mittelt man über die Verteilung der stochastischen Variablen J_{ij} .

Soukoulis und Mitarbeiter behaupten, daß die auf diese Weise erzeugten "Grundzustände" viel schneller gefunden werden können und zudem etwas tiefer liegen als die mit der Monte Carlo Methode gewonnenen. Insbesondere in $d = 2$ Dimensionen finden sie, daß ihre Schätzung für die innere Energie per Spin $U(T=0, H=0)$ innerhalb der Fehlerbalken der Transfermatrix Rechnungen liegt /64b/ und besser ist als der Monte Carlo Wert, der auch von ihnen berechnet wurde. In $d = 3$ Dimensionen liefert die iterative Molekularfeld-Methode einen Wert für $U(T=0, H=0)$ der mehrere Prozente höher liegt als das entsprechende Monte Carlo Resultat. Von den Autoren wird die Verlässlichkeit des letzteren in Frage gestellt.

Falls die oben beschriebene Methode tatsächlich die exakten Grundzustände in kurzreichweitigen Spinglasmodellen findet, würde ihre vergleichsweise große Rechengeschwindigkeit (10-100mal schneller als Monte Carlo) sie zum idealen Werkzeug für die Untersuchung des Gesetzes (2) machen. Für solch eine Anwendung aber ist es unentbehrlich, die quantitative Genauigkeit der Methode exakt festzustellen. Die Autoren halten es für möglich, daß die Methode, weil sie der Entwicklung des eindeutigen Hochtemperaturminimums folgt, immer

III. Iterative Molekularfeld-Methode

die besten Grundzustände findet. Es ist nicht klar, auf welche physikalischen Eigenschaft diese Behauptung gegründet wird: Die Gleichungen (5) werden von jedem metastabilen Zustand bei $T = 0$ genauso erfüllt, und die Anzahl dieser metastabilen Zustände ist außerordentlich groß, für die TAP-Gleichungen von der Größenordnung $e^{0.2N}$ bei $T = 0$ /44,136/. Es ist daher nicht auszuschließen, daß die Iteration in einen der metastabilen Zustände führt, anstatt in einen wahren Grundzustand.

Im folgenden soll gezeigt werden, daß dies tatsächlich der Fall ist. Die Methode liefert metastabile Minima der freien Energie Oberfläche, die typischerweise höher liegen als die, die man mit der Monte Carlo Methode erhält /49,125/. Die Aussagen der Methode sind daher nur von **qualitativer** Gültigkeit.

Das ursprüngliche Ziel dieser Untersuchungen war die Bestimmung des Exponenten x in (2). $M(T=0, H)$ wurde wie folgt bestimmt: Ein Wert des äußeren Feldes wurde festgelegt und die Ausgangstemperatur T_S in der paramagnetischen Phase gewählt: $T_S > 2T_C$. Um sicher zu stellen, daß die Konvergenz zu von T_S unabhängigen Werten erfolgt, wurden verschiedene Werte $2T_C < T_S < 4T_C$ ausprobiert. Die Gleichungen (6) wurden bei T_S gelöst, d.h. iteriert bis Konvergenz erfolgte. Als Konvergenzkriterium diente

$$\frac{\sum_i (m_i^{(n-1)} - m_i^{(n)})^2}{\sum_i (m_i^{(n)})^2} \leq \epsilon = 10^{-6} \quad (7)$$

$m_i^{(n)}$ bezeichnet hierbei den Wert des lokalen Momentes in dem n -ten Iterationsschritt. Andere Kriterien wurden auch probiert: größere Werte von ϵ reichen nicht, kleinere führen zu denselben Werten wie (7).

Der als Lösung erhaltene Satz $(m_1, \dots, m_N)$ wurde als Aus-

III. Iterative Molekularfeld-Methode

gangswert bei einer niedrigeren Temperatur $T = T_g - \Delta T$ eingesetzt (die Temperatur wird in Einheiten der Varianz der Gauß'schen Verteilung ΔJ gemessen). Werte von $0.05 < \Delta T < 0.1$ wurden benutzt; auf diese Weise war die Abkühlungsrate klein genug, so daß sie nicht größere Schwankungen als ϵ in den konvergierten Werten bei niedrigen Temperaturen verursachte. Bei $T \approx T_c$ konnte eine ausgeprägte Verlangsamung der Iteration beobachtet werden. Aus diesem Grund wurden in diesem Bereich noch kleinere Abkühlungsraten gewählt; dies hatte aber keinen Einfluß auf $(m_1, \dots, m_N)$. Weil die Iteration bei $T = T_g$ mit einer Zufallskonfiguration der lokalen Momente gestartet wurde, war es notwendig, den Einfluß dieses Anfangszustandes zu untersuchen. Es konnte festgestellt werden, daß das System sehr schnell das Gedächtnis verliert, und nach ein paar Iterationsschritten einen von den Anfangswerten unabhängigen Zustand (im Sinne von (7)) erreicht.

Es verbleibt noch die Frage, in welcher Reihenfolge die Gleichungen (6) innerhalb eines Iterationsschrittes gelöst werden, d.h. in welcher Reihenfolge die verschiedenen Gitterpunkte besucht werden. Es wurden mehrere Möglichkeiten ausprobiert. Streng gesehen müßte man folgendermaßen vorgehen: Mit dem k-ten Satz von $(m_1^{(k)}, \dots, m_N^{(k)})$ berechnet man den (k+1) -ten Satz $(m_1^{(k+1)}, \dots, m_N^{(k+1)})$. Dann werden alle Momente auf einmal aktualisiert, d.h. jedes $m_i^{(k)}$ durch $m_i^{(k+1)}$ ersetzt. Es ist jedoch in Iterationsverfahren üblich, daß man die eben neu berechneten Werte sofort einsetzt, um die Konvergenz zu beschleunigen. Ein Vergleich mit der strengeren Methode ist aber notwendig. Bei langsamer Abkühlung, so konnte festgestellt werden, ist es erlaubt, mit sofortiger Aktualisierung zu rechnen. Auch die Reihenfolge, in der man die nacheinanderfolgenden Gitterplätze wählt, bleibt ohne Einfluß auf die Konvergenz. Die verschiedenen Sequenzen haben natürlich eine unterschiedliche Konvergenzgeschwindigkeit, die dann am größten ist, wenn das Gitter reihen- oder spaltenweise durchsucht wird, und die aktuali-

III. Iterative Molekularfeld-Methode

sierten Werte der benachbarten Plätze benutzt werden.

Weil man nur ein endliches System untersuchen kann, ist es wichtig, die Abhängigkeit von der Systemgröße zu studieren. In $d = 2$ Dimensionen haben wir zum Beispiel 30×30 , 60×60 und 100×100 große Gitter genommen. Der Einfluß der endlichen Größe ("finite size effects") ist aber schwer festzustellen, weil noch eine Mittelung über die Verteilung der Austauschwechselwirkungen J_{ij} erfolgen muß. Innerhalb der Genauigkeit dieser Mittelung konnten keine Abhängigkeiten von der Systemgröße festgestellt werden.

Wir haben einen breiten Bereich des äußeren Feldes untersucht: von $H/\Delta J = 5$ bis $H/\Delta J = 0.001$. Für eine gegebene Konfiguration von J_{ij} war die Konvergenz in starken Feldern viel schneller als in schwächeren Feldern. Außerdem war die Variation zwischen verschiedenen Konfigurationen auch klein, typischerweise kleiner als 1%. Aus diesem Grund wurde die Konfigurationsmittelung für $0.05 \leq H/\Delta J \leq 2.0$ mit 60 Konfigurationen, für $0.001 \leq H/\Delta J \leq 0.05$ mit 95 Konfigurationen durchgeführt. In dem letzteren Bereich konnte trotzdem nur eine Genauigkeit von einigen Prozent erreicht werden. Obwohl aus der geschätzten Divergenz der Korrelationslänge /49,127/

$$\xi(T=0, H) \sim H^{-2/3} \quad (8)$$

in diesem Bereich starke finite size Effekte zu erwarten sind, haben wir sie wegen der großen statistischen Schwankungen zwischen den verschiedenen Konfigurationen nicht systematisch analysieren können.

Diese Variationen sind erheblich größer als die in den entsprechenden Monte Carlo Simulationen /49/. Dies bedeutet, daß, um in dieser iterativen Molekularfeld-Theorie eine gute Statistik zu erhalten, eine viel größere Anzahl von Konfigurationen untersucht werden muß. Auf diese Weise kann ein

III. Iterative Molekularfeld-Methode

erheblicher Teil oder der ganze Vorteil der höheren Geschwindigkeit verloren gehen. Diese Tatsache relativiert die Behauptungen von Soukoulis und Mitarbeiter.

Abb. III.1. zeigt unsere Resultate für $M(T=0, H)$ zusammen mit den Resultaten der Monte Carlo Methode von Binder und Kinzel /49,125/.

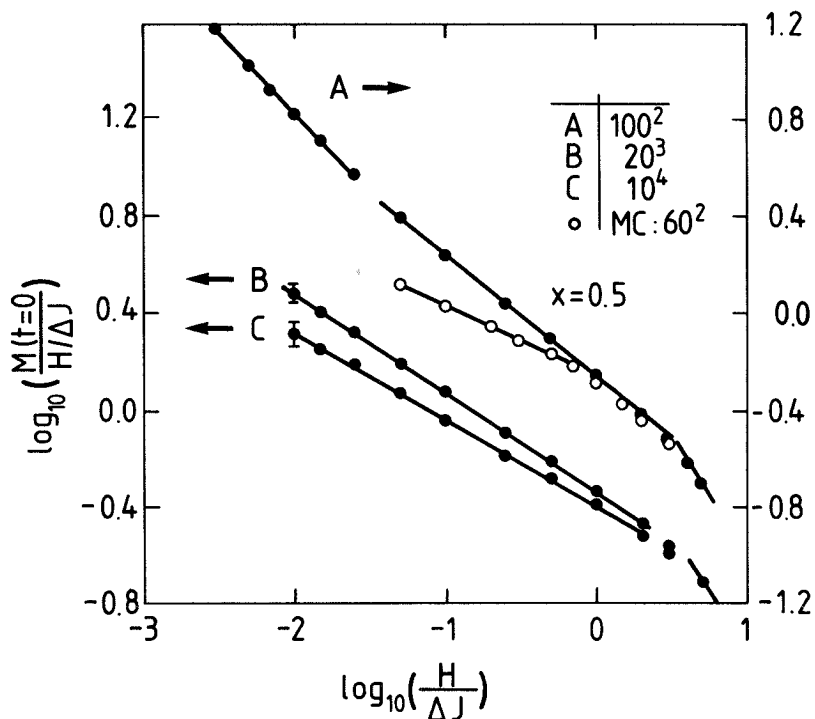


Abb. III.1.

Log - log - Darstellung von $M(T=0, H)/H$ gegen $H/\Delta J$ für

- (A) $d = 2$
- (B) $d = 3$
- (C) $d = 4$

Für Fall (A) sind die Monte Carlo Resultate von Kinzel und Binder /125/ auch abgebildet (offene Kreise).

III. Iterative Molekularfeld-Methode

Während in größeren äußeren Feldern die Übereinstimmung gut ist, findet man für kleinere Felder $H/\Delta J < 1$ große Unterschiede: Die iterative Molekularfeld-Methode ergibt größere Werte für die Magnetisierung, so findet man für den charakteristischen Exponenten in (2) den Wert $x \approx 0.5$, und das sogar annähernd unabhängig von der Dimension. Das steht in klarem Widerspruch zu den Überlegungen zu Beginn dieses Kapitels.

Um den Vergleich zu den Monte Carlo Daten zu erleichtern, haben wir dieselben Kopplungskonfigurationen wie Kinzel und Binder benutzt. Der Vergleich der einzelnen Konfigurationen zeigte, daß die iterative Methode in **jedem** Fall höher liegende metastabile Zustände bei $T = 0$ lieferte. Daß Soukoulis und Mitarbeiter den umgekehrten Fall finden /127/, mag daran liegen, daß sie in Monte Carlo allzu große Abkühlraten benutzt haben, und auf diese Weise die Genauigkeit ihrer Daten nicht so gut ist wie sie sein könnte.

Die praktische Erfahrung zeigt, daß die Molekularfeld-Theorie die Magnetisierung in Feld im allgemeinen überschätzt. Bei $T = 0$ kann die (freie) Energie in einen Wechselwirkungs- und einen magnetischen Term zerlegt werden

$$U(H) = U_W(H) - HM$$

wobei M die totale Magnetisierung ist. Die iterative Methode überschätzt sowohl $U(H)$ als auch M . Dies bedeutet, daß die Abschätzung für die Wechselwirkungsenergie zu hoch ist: Das äußere Feld beschleunigt die Konvergenz indem es versucht, die Momente auszurichten. Dieser Effekt ist offenbar zu stark in dieser Iteration. Ohne äußeres Feld tritt dieser Effekt nicht auf, daher sollte die Methode bessere Werte für die Grundzustandsenergie liefern, was tatsächlich der Fall ist. Andererseits ist es klar, daß bei kleinen Feldern eine große Ungenauigkeit in der Magnetisierung auch dann möglich ist, wenn der Fehler für die Energie relativ

III. Iterative Molekularfeld-Methode

klein bleibt:

$$U_{MF}(H) = U_{MF}(H=0) - HM_{MF}$$

$$U_{EX}(H) = U_{EX}(H=0) - HM_{EX}$$

Dabei bezeichnet der Index MF (EX) die Molekular-Feld (EXakte) Energie bzw. totale Magnetisierung. Weil

$$U_{MF}(H) > U_{EX}(H)$$

gilt

$$M_{MF} - M_{EX} \leq (U_{MF}(0) - U_{EX}(0)) / H$$

Daher ist der höhere gemessene Wert der totalen Magnetisierung für die metastabilen Zustände charakteristisch. In verschiedenen Konfigurationen der Zufallskopplungen führt dann diese Iteration in höher oder niedriger liegende metastabile Zustände. Es ist daher plausibel, daß die gemessenen Größen eine größere Fluktuation zeigen als in dem Fall, wo in jeder Konfiguration die wahren Grundzustände erreicht werden.

3. Zusammenfassung

In diesem Kapitel unternahmen wir den Versuch, die untere kritische Dimension von kurzreichweitigen Ising-Spiongläsern indirekt, durch das Skalenverhalten der Grundzustandsmagnetisierung in konstantem äußeren Feld, zu bestimmen. Um den Grundzustand zu finden, haben wir eine vor kurzem entwickelte numerische Methode benutzt. In dieser Methode werden die einfachen Molekularfeld-Gleichungen (d.h. ohne Onsagerschen Term) iterativ gelöst, indem das System (der lokalen mittleren Momente) langsam abgekühlt wird.

III. Iterative Molekularfeld-Methode

Wir finden, daß diese für verschiedene Systeme schon angewendete und in der Literatur stark propagierte Methode leider keine quantitativ verlässlichen Grundzustandseigenschaften liefert und sich daher nur für die Untersuchungen der **qualitativen** Effekte verschiedener Parameter (wie ferromagnetische Komponente der Wechselwirkungen, Vektor-Spins, Anisotropie usw.) eignet. Insbesondere überschätzt diese Methode die innere Energie und sehr stark die totale Magnetisierung in äußerem Feld. Ohne äußeres Feld ($H=0$) sind die relativen Fehler zwar klein, jedoch statistisch signifikant. Auf jeden Fall sind die Konfigurations-Fluktuationen während der Abkühlung so groß, daß man über viel mehr Kopplungskonfigurationen mitteln muß, um die gleiche statistische Genauigkeit zu erreichen wie mit Monte Carlo. Damit ist der relative Geschwindigkeitsvorteil (10-100mal schneller) verloren. Die folgende Tabelle gibt den Rechenzeitbedarf auf einem IBM 3081 Computer für das zwei- und dreidimensionale Modell an. Bei jeder Feldstärke wird die Gesamtzeit angegeben, die die Mittelung über die Konfigurationen verbraucht hat.

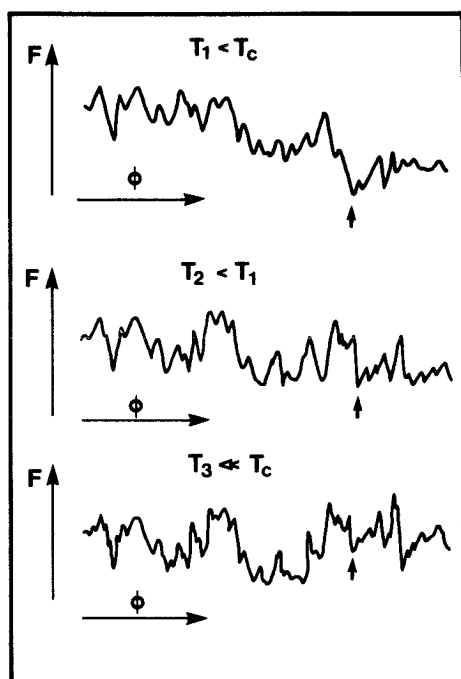
Feldstärke H/ J	Rechenzeit (Std:Min)	
	(100x100)	(20x20x20)
2.0	1:10	1:29
1.0	1:42	2:09
0.5	2:11	2:45
0.25	2:41	2:50
0.10	3:23	3:22
0.05	3:56	3:50
0.01	7:28	7:06
0.005	9:49	-
0.002	11:06	-
0.001	11:50	-

Daß diese Methode Energie und Magnetisierung systematisch überschätzt, kann durch die folgende Modifikation des Verfahrens bewiesen werden. Bei einer Zwischentemperatur während des Abkühlens wird das äußere Feld verringert, das Gleichungssystem bis zur Konvergenz iteriert. Diese konvergierten Werte ($m_1, \dots, m_N$) werden als Startwerte in dem

III. Iterative Molekularfeld-Methode

nächsten Temperaturschritt, aber in dem ursprünglichen Feld, eingesetzt. Auf diese Weise findet man 10-20% tiefer liegende Energiewerte. Auch dann sind die Energiewerte etwas größer als die mit Monte Carlo, so daß den Magnetisierungen $M(T=0, H)$ nicht getraut werden kann.

Die Schwierigkeit in einer jeden solchen Methode wird in **Abb. III.2.** schematisch dargestellt. Während des Abkühlens ändert sich die freie Energie Oberfläche in einer sehr komplizierten Weise. Um in jedem Temperaturschritt in dem tiefstliegenden (globalen) Minimum zu bleiben, muß das System große Energiebarrieren überwinden und in entfernte Gebiete des Phasenraums wandern können, wie mit Monte Carlo.



Die iterative Molekularfeld-Methode von Soukoulis, Levin und Grest verfolgt dagegen lokal die Entwicklung des paramagnetischen Minimums auf der freien Energie Oberfläche und ist nicht imstande, globale Minima zu finden. Sie findet daher metastabile Zustände, anstatt der wahren Grundzustände.

Abb. III.2.

Schematische Darstellung der freien Energie Oberfläche gegen eine (symbolische) Phasenraumkoordinate bei verschiedenen Temperaturen.

Das von der iterativen Molekularfeld-Methode gefundene Minimum ist durch einen Pfeil angezeigt.

IV.

HOCHTEMPERATURENTWICKLUNG FÜR DIE DYNAMIK VON SPINGLÄSERN

1. Problemstellung

Wie in der Einleitung schon diskutiert wurde, ist die Frage der unteren kritischen Dimension in kurzreichweitigen Ising-Spinalgas Modellen noch nicht geklärt. In diesem Kapitel wird eine Methode vorgestellt, die zum ersten Mal ermöglicht, neben den statischen auch dynamische Korrelationen in einer systematischen $1/T$ Entwicklung für das Ising-Modell mit Zufallskopplungen zu berechnen. Die Methode ist im Prinzip in jeder Dimension anwendbar, aber so beschaffen, daß die Berechnungen in jeder Dimension explizit ausgeführt werden müssen. Die Frage nach der unteren kritischen Dimension kann also nur nach einer systematischen Untersuchung des Modells in 2,3 und 4 Dimensionen gestellt werden. Im folgenden werden Ergebnisse für $d = 2$ beschrieben. Das zweidimensionale Modell hat einen Phasenübergang bei $T = 0$, es dient daher als Test für die Methode: für eine spätere Anwendung für das dreidimensionale Modell ist es unentbehrlich zu wissen, wie die Eigenschaften des kritischen Verhaltens bei $T = 0$ im Rahmen dieser Methode sich auswirken. Andererseits blieb der Fragenkomplex des kritischen Verhaltens trotz intensiver Forschung bisher in $d = 2$ kontrovers.

Zunächst soll eine Zusammenfassung der Erkenntnisse über das zweidimensionale Ising-Modell mit Zufallskopplungen gegeben werden. Mit Hilfe der Transfermatrix-Methode wurde gezeigt, daß bei endlicher Temperatur kein Phasenübergang auftritt und sich bei $T = 0$ langreichweitige Korrelationen aufbauen

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

/64b/. In dem Gauß-Modell ist der Edwards-Anderson Ordnungsparameter q gleich Null bei $T > 0$ und $q(T=0) = 1$. In dem $\pm J$ -Modell dagegen ist $q = 0$ für jede Temperatur, aber die räumlichen Korrelationen zerfallen bei $T = 0$ nach einem Potenzgesetz

$$[\langle s_i s_j \rangle^2] \sim R_{ij}^{-\phi}$$

wobei R_{ij} den Abstand der Spins s_i und s_j bezeichnet und $\phi = 0.4 \pm 0.1$ ist. Diese Ergebnisse wurden in Monte Carlo Simulationen bestätigt /67a,125/, die desweiteren eine Divergenz gemäß einem Potenzgesetz in der Edwards-Anderson Korrelationslänge und Suszeptibilität aufgedeckt haben

$$\xi_{EA} \sim T^{-\nu}, \quad \chi_{EA} \sim T^{-\gamma} \quad (1)$$

Auf diese Befunde gegründet haben Kinzel und Binder ein Cluster-Modell vorgeschlagen, um die Monte Carlo Daten und insbesondere die beobachtete anomale kritische Verlangsamung zu erklären. Der Relaxationsprozeß in das Gleichgewicht verlangt die Reorientierung von Clustern von ξ_{EA}^d korrelierter Spins. Diese Reorientierung, die das Überwinden einer Energiebarriere bedeutet, geschieht dadurch, daß eine Domänenwand durch den Cluster bewegt wird. In einem Ferromagneten würde eine solche Wand zwischen den zwei möglichen Grundzuständen $\Delta F \sim \xi_{EA}^{d-1}$ freie Energie kosten. Die Simulationen für das Spinglas-Modell mit N Spins haben aber ergeben, daß die Projektion eines Grundzustandes auf einen anderen typischerweise in der Größenordnung $N^{-1/2}$ liegt. Bei $T = 0$ (wo $\xi_{EA}^d = N$ ist) unterscheiden sich zwei Grundzustände in etwa $N^{1/2}$ Spins. Die Abschätzung für die freie Energie der Domänenwand ist

$$\Delta F \sim \left(\xi_{EA}^{d-1} \right)^{1/2}$$

Die Relaxationszeit τ , die den thermisch aktivierten

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Prozeß über diese Barriere charakterisiert, divergiert dann wie

$$\ln \tau \sim \Delta F/T \sim T^{-1-\nu} \frac{d-1}{2} \quad (2)$$

oder allgemeiner gehalten ("dynamisches Skalen" /125/)

$$\ln \tau \sim T^{-\nu z} \quad (3)$$

wobei z der dynamische Exponent ist /138/.

Diese phänomenologische Skalentheorie wurde für die Analyse der Monte Carlo Daten für das $\pm J$ -Modell verwendet /67b,139/. Ein "best fit" wurde mit $\gamma = 4.1$, $\nu = 2.75$ und $\nu z = 2$ erhalten. Das letztere bedeutet divergierende Barrieren der (freien) Energie.

$$\Delta F \sim T^{-1}, \quad (T \rightarrow 0).$$

Die Daten sind aber auch mit einer großen, aber endlichen Energiebarriere $\Delta F/J \approx 18$ konsistent. Bei niedrigen Temperaturen sind die Monte Carlo Simulationen sehr problematisch im Hinblick auf die Frage ob thermisches Gleichgewicht erreicht wurde, so daß das kritische Verhalten bei $T = 0$ von einem Temperaturbereich $T/J \approx 1$ extrapoliert werden muß. So können diese Simulationen die Frage der Divergenz von ΔF nicht entscheiden.

Der erste Hinweis auf endliche Barrieren kam aus einer Berechnung mit der Transfer-Matrix Methode /140/, die $\Delta F/J \approx 13 \pm 1$ fand. Die Anwendung einer phänomenologischen Renormierungsgruppe /66/ fand ebenso endliche Energiebarrieren, in Übereinstimmung mit anderen Monte Carlo Daten, die $\Delta F/J \approx 14$ ergaben /65/.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Vor kurzem wurde die Energie von Defekten als Funktion der Systemgröße, bei $T = 0$ in dem Gauß'schen Modell untersucht /68,141/. In $d = 2$ verschwindet die Defekt-Energie in dem thermodynamischen Limes, wie

$$\Delta E_{\text{def}} \sim L^{-1/\nu} ,$$

mit $\nu = 3.56$ /141/ bzw. $\nu = 3.4$ /68/. In Systemen mit Frustration und makroskopischer Entartung des Grundzustandes ($\pm J$ -Modell) ist aber die Beschaffenheit dieser Domänenwände noch nicht gut verstanden.

Zusammenfassend kann man sagen, daß kein Zweifel besteht: das zweidimensionale Ising Spinglas hat keinen Phasenübergang bei $T \neq 0$. Für das kritische Verhalten bei $T = 0$ gibt es unterschiedliche Aussagen, die im Limes $T \rightarrow 0$ unendliche bzw. endliche Energiebarrieren finden.

In dem entsprechenden zweidimensionalen homogenen Ising-Modell, wo bei endlicher Temperatur $T = T_c$ ein ferromagnetischer Phasenübergang stattfindet, verhält sich die charakteristische, sogenannte lineare Relaxationszeit, wie

$$\tau \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\nu_z} \quad (4)$$

/142/. Der exakte Wert von ν_z ist nicht bekannt, Hochtemperaturentwicklungen ergeben 2.0 /143,144/ bzw. 2.125 /145/.

Die Dynamik von Ising-Modellen mit Zufallskopplungen wurde bisher (außer durch Monte Carlo Simulationen) systematisch nicht untersucht. Die bewährte Technik der Hochtemperaturentwicklung war auf die Berechnung von statischen Größen beschränkt /60-63,146/. Es war möglich, in allgemeiner Dimension d , Maximum 10 nicht-triviale Terme zu berechnen. Die Resultate für verschiedene Verteilungen der Zufallskopplungen sind in Übereinstimmung mit der Annahme,

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

daß die untere kritische Dimension $d^* = 4$ ist. Die zuerst für das symmetrische $\pm J$ -Modell entwickelte Technik /60/ wurde für beliebige symmetrische /61/ und später für unsymmetrische Verteilungen /62/ verallgemeinert, bzw. mit Verdünnung kombiniert und neu analysiert /63/. Das ferromagnetische Modell mit stochastisch verteilter Verdünnung in $d = 2,3$ wurde ebenfalls in Hochtemperaturentwicklung untersucht, aber die Exponenten zeigten physikalisch inplausibles Verhalten (s. Abschnitt IV.3.2.1.) /147/.

Andere Reihenentwicklungen wurden bei $T = 0$ für das unsymmetrische $\pm J$ -Modell in Potenzen der Konzentration der antiferromagnetischen Kopplungen durchgeführt, um zu studieren, wie die Einführung der Frustration die ferromagnetische Ordnung zerstört /148,149/. Die Anzahl der berechneten Terme ist zwar in beiden Fällen nicht groß, erlaubte aber die Schlußfolgerung, daß die ferromagnetische Ordnung über der kritischen Konzentration $1-p_c = 0.10 - 0.13$ nicht mehr existiert. Eine Verallgemeinerung durch die Einführung zusätzlicher Verdünnung hat es ermöglicht, das Phasendiagramm für die ferromagnetische, antiferromagnetische und Spinglas-Phase bei $T = 0$ zu konstruieren /150/.

Alle diese Reihenentwicklungen haben gemeinsam, daß die Anzahl der nicht-trivialen Terme relativ klein ist, die Reihen (insbesondere die der Hochtemperaturentwicklungen für $d < 4$) erratisches Verhalten zeigen und daher schwierig zu analysieren sind. Die Koeffizienten von Termen höherer Ordnung werden oft negativ, und das verhindert die Anwendung von "ratio plot"-Analysen. Die Padé-Approximanten konvergieren auch nicht so gleichmäßig wie in reinen Systemen und zeigen eine komplexe Singularitätsstruktur. Die Analyse dieser Reihen erfordert also einen großen Aufwand und kann nur selten klare Aussagen treffen.

Die erwartete starke Singularität in der Relaxationszeit bei $T = 0$ in Gl.(3) gegenüber der schwächeren Singularitäten

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

in den statischen Größen in Gl.(1) läßt hoffen, daß eine Hochtemperatur-Reihe für die Relaxationszeit sich regulärer verhält und leichter zu analysieren ist. Die praktische Erfahrung zeigt: je stärker die Singularität in einer Funktion ist, desto genauer wird sie von den Approximanten beschrieben.

2. Formulierung der Methode

Es soll das zweidimensionale nächste Nachbarn Ising-Modell ohne äußeres Feld untersucht werden. Die Hamilton-Funktion hat die Form

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j \quad (5)$$

wobei die Austauschwechselwirkungskonstanten stochastische Variablen sind, mit der Verteilung

$$P(J_{ij}) = p \cdot \delta(J_{ij} - J) + (1-p) \delta(J_{ij} + J) \quad (6)$$

die eine eingefrorene Unordnung darstellt. Das Modell ist symmetrisch um $p = 1/2$; wir können uns daher auf die Untersuchung des Konzentrationsbereichs $1/2 \leq p \leq 1$ beschränken. Um Dynamik einzuführen, wird angenommen, daß das System mit einem großen Wärmebad in Wechselwirkung steht, das ein spontanes Umdrehen der Spins verursacht. Dies geschieht mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_j(s_j) = \frac{\alpha}{2} \left(1 - s_j \tanh \frac{E_j}{k_B T} \right) \quad (7)$$

Dabei ist E_j das lokale Feld am Gitterplatz i , α die mikroskopische Relaxationsrate, die fortan ebenso wie die Boltzmann-Konstante gleich 1 gesetzt wird. w_j erfüllt die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (Glauber-Dynamik

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

/75/, s. auch Einleitung zum Kapitel II.). Im folgenden verwenden wir die Darstellung von Suzuki, Kubo, Abe und Yahata /79,80,142-144/.

Die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System zur Zeit t in der Konfiguration $(s_1, \dots, s_N)$ befindet, entwickelt sich nach der Master-Gleichung

$$\frac{d}{dt} P(s_1, \dots, s_N; t) = \Gamma P(s_1, \dots, s_N; t) \quad (8)$$

wobei der Operator wie folgt definiert ist:

$$\begin{aligned} \Gamma P(s_1, \dots, s_N; t) = & - \sum_j \omega_j(s_j) P(s_1, \dots, s_j, \dots, s_N; t) \\ & + \sum_j \omega_j(-s_j) P(s_1, \dots, -s_j, \dots, s_N; t). \end{aligned} \quad (9)$$

Die Relaxation erfolgt in das thermodynamische Gleichgewicht mit der Verteilungsfunktion P_0

$$\Gamma P_0 = \Gamma P_0(s_1, \dots, s_N) = 0. \quad (10)$$

Wenn die Zeitabhängigkeit von $P(s_1, \dots, s_N; t)$ abgetrennt wird

$$P(s_1, \dots, s_N; t) = P_0 f(t) \quad (11)$$

folgt aus (8), (10) und (11) :

$$\frac{d}{dt} f(t) = -L f(t) \quad , \quad (12)$$

wobei L der Liouville-Operator ist,

$$L f = -P_0^{-1} \Gamma f P_0. \quad (13)$$

Die formale Lösung von (12) lautet

$$f(t) = e^{-Lt} f(0). \quad (14)$$

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Damit kann die zeitliche Entwicklung jeder physikalischen Größe beschrieben werden

$$\begin{aligned} A(t) &= \text{Spur } AP(t) = \text{Spur } Af(t)P_0 \\ &= \text{Spur } P_0 Af(t) = \langle Af(t) \rangle \\ &= \langle Ae^{-Lt} f(0) \rangle = \langle f(0)e^{-Lt} A \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ den thermischen Erwartungswert bezeichnet.

Wir interessieren uns für die nicht-lokalen Zeitkorrelationen der Spins

$$C_{ij}(t) = \langle s_i(0) s_j(t) \rangle, \quad (16)$$

die dann mit (15) in die folgende Form gebracht werden können

$$C_{ij}(t) = \langle s_i(0) e^{-Lt} s_j(0) \rangle. \quad (17)$$

Die linearen Antwortfunktionen werden durch den Fluktuation-Dissipations-Satz gegeben

$$\chi_{ij}(t) = - \frac{d}{dt} C_{ij}(t), \quad t > 0. \quad (18)$$

In Fourier-Raum sind sie von der Form

$$\chi_{ij}(\omega) = \int_0^\infty \chi_{ij}(t) e^{-i\omega t} dt = \left\langle s_i \frac{L}{L + i\omega} s_j \right\rangle. \quad (19)$$

Die folgenden dynamischen Größen sollen untersucht werden:

a) lokale Suszeptibilität

$$\chi(\omega) = \frac{1}{N} \sum_i [\chi_{ii}(\omega)] \quad (20a)$$

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

b) ferromagnetische Suszeptibilität

$$\chi_{FM}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{ij} [\chi_{ij}(\omega)] \quad (20b)$$

c) Edwards-Anderson Suszeptibilität

$$\chi_{EA}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{ijk} [\chi_{ij}(\omega) \chi_{ik}(\omega)] . \quad (20c)$$

Hierbei wurde die Konfigurationsmittelung über die Verteilung (6) durch [...] bezeichnet. Weil die Unordnung eingefroren ist, muß jede Observable für eine vorgegebene Verteilung der Kopplungskonstanten berechnet werden, und im letzten Schritt muß dann die Mittelung ausgeführt werden

$$[A(\{J_{ij}\})] = \int A(\{J_{ij}\}) P(J_{ij}) dJ_{ij} . \quad (21)$$

Die Form von χ_{EA} in (20c) wurde für unsymmetrische Verteilungen etwas verallgemeinert, für symmetrische Verteilungen (z.B. $p = 1/2$ in (6)) reduziert sie sich auf

$$\chi_{EA}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{ij} [\chi_{ij}^2(\omega)] .$$

Es wird erwartet, daß die dynamischen Größen ein breites Relaxations-Spektrum besitzen, wie es für Spingläser charakteristisch ist. Für solche Größen ist die Definition der "Relaxationszeit" etwas willkürlich, wir nehmen hier die einfache und oft verwendete Definition der "charakteristischen Zeit":

$$\tau_c = \int_0^{\infty} C(t) dt . \quad (22)$$

Diese Definition ist sowohl mathematisch sinnvoll (sie ergibt die einzige Relaxationszeit für ein Spektrum, das nur eine enthält), als auch physikalisch: in der paramagnetischen Phase (bei hohen Temperaturen) erwarten wir exponentiellen Zerfall.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Die zu den Suszeptibilitäten (20) gehörenden (charakteristischen) Relaxationszeiten sind also wie folgt definiert:

a) Relaxationszeit des Edwards-Anderson Ordnungsparameters

$$\tau_q = -i \left. \frac{\partial \chi^{-1}}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} = \frac{1}{N} \sum_i [\langle s_i L^{-1} s_i \rangle] \quad (23a)$$

b) ferromagnetische Relaxationszeit

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{FM} &= \frac{\tau_{FM}}{\chi_{FM}(0)} = -i \chi_{FM}(0) \left. \frac{\partial \chi_{FM}^{-1}}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \\ &= \chi_{FM}^{-1}(0) \frac{1}{N} \sum_{ij} [\langle s_i L^{-1} s_j \rangle] \end{aligned} \quad (23b)$$

c) Spinglas (o. Edwards-Anderson)-Relaxationszeit

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \tilde{\tau}_{EA} &= \frac{\tau_{EA}}{\chi_{EA}(0)} = -\frac{i}{2} \chi_{EA}(0) \left. \frac{\partial \chi_{EA}^{-1}}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \\ &= \chi_{EA}^{-1}(0) \frac{1}{N} \sum_{ijk} [\langle s_i L^{-1} s_j \rangle \langle s_i s_k \rangle] . \end{aligned} \quad (23c)$$

Die Definition von τ_q ist sinnvoll, auch wenn der Ordnungsparameter $q = [\langle s_i \rangle^2]$ bei jeder Temperatur gleich Null ist. Die Relaxationszeiten τ_q, τ_{FM} und τ_{EA} , sowie die nicht-trivialen statischen Suszeptibilitäten $\chi_{FM} = \chi_{FM}(0)$, $\chi_{EA} = \chi_{EA}(0)$ ($\chi(0) \equiv 1$) sollen im Rahmen einer Hochtemperaturentwicklung berechnet werden.

Um dies zu bewerkstelligen, betrachten wir eine geeignete Darstellung des Liouville-Operators. Wenn die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (s. Gl.(10))

$$w_j(s_i) P_0(s_j) = w_j(-s_j) P_0(-s_j) \quad (24)$$

und (9) in (13) eingesetzt werden, sieht man, daß der Liouville-Operator auch in der Form

$$L = \sum_k w_k(s_k) (1 - P_k) \quad (25)$$

geschrieben werden kann, wobei P_k ein Operator ist, der

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

den Spin s_k umdreht

$$P_k f(s_1, \dots, s_k, \dots, s_N) = f(s_1, \dots, -s_k, \dots, s_N). \quad (26)$$

Die Summe in dem Ausdruck des lokalen Feldes

$$E_j = \sum_k' J_{jk} s_k \quad (27)$$

in (7) erstreckt sich auf nächste Nachbarn. Weil $(J_{ij} s_j)^2 = 1$ für alle i, j gilt, ist die folgende Taylor-Entwicklung exakt

$$\begin{aligned} \tanh\left(\frac{1}{T} \sum_k' J_{jk} s_k\right) &= c_1 \sum_{\ell}' \epsilon_{j\ell} s_{\ell} \\ &+ c_3 \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3} \epsilon_{j\ell_1} \epsilon_{j\ell_2} \epsilon_{j\ell_3} s_{\ell_1} s_{\ell_2} s_{\ell_3}. \end{aligned} \quad (28)$$

Dabei erstrecken sich die Summen über (verschiedene) Nachbarn von j , ϵ_{ik} ist das Vorzeichen von J_{ik} , und die Koeffizienten c_1 und c_3 sind Funktionen der Temperatur

$$\begin{aligned} c_1 &= (\tanh(4J/T) + 2 \tanh(2J/T)) / 8 = O(T^{-1}) \\ c_3 &= (\tanh(4J/T) - 2 \tanh(2J/T)) / 8 = O(T^{-3}) \end{aligned} \quad (29)$$

Für das dreidimensionale Modell würde noch ein 5-Spin Term in (28) auftreten.

Die Darstellung (28) ermöglicht die folgende Zerlegung des Liouville-Operators (25):

$$L = L_0 - L_1 - L_3 \quad (30)$$

mit

$$\begin{aligned} L_0 &= \frac{1}{2} \sum_k (1 - P_k) \\ L_1 &= \frac{c_1}{2} \sum_{\langle k, \ell \rangle} \epsilon_{k\ell} s_k s_{\ell} (1 - P_k) \end{aligned} \quad (31a)$$

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$L_3 = \frac{c_3}{2} \sum_{\langle k, l_1, l_2, l_3 \rangle} \epsilon_{kl_1} \epsilon_{kl_2} \epsilon_{kl_3} s_k s_{l_1} s_{l_2} s_{l_3} \quad (31a)$$

Wie diese Operatoren auf einen gegebenen Spin s_k wirken, kann graphisch so dargestellt werden:

$$L_0(\bullet) = \bullet$$

$$L_1(\bullet) = (\text{---}\bullet + \bullet\text{---} + \bullet\text{---}\bullet + \bullet) \times c_1$$

$$L_3(\bullet) = (\text{---}\bullet\text{---}\bullet + \bullet\text{---}\bullet\text{---} + \bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet + \bullet\text{---}\bullet) \times c_3$$

L_0 läßt den Spin unverändert. L_1 und L_3 vernichten ihn und erzeugen einen bzw. drei Nachbarn mit den zugehörigen Bindungen in allen möglichen Variationen. Die Anzahl der Bindungen entspricht der führenden Ordnung in den Koeffizienten c_1 und c_3 . Weil diese von Ordnung $O(T^{-1})$ bzw. $O(T^{-3})$ sind, bietet sich eine Entwicklung des inversen Liouville-Operators L^{-1} in den Korrelationen in (23) nach Potenzen von L_1 und L_3 an. Bis zu der gewünschten Ordnung N ($M = N/3$)

$$\begin{aligned} L^{-1} &= \sum_{n=0}^M \{ (L_0 - L_1)^{-1} L_3 \}^n (L_0 - L_1)^{-1} \\ &= \sum_{n=0}^M \left\{ \sum_{m=0}^N (L_0^{-1} L_1)^m (L_0^{-1} L_3) \right\}^n \sum_{h=0}^N (L_0^{-1} L_1)^h L_0^{-1} \end{aligned} \quad (32)$$

Um die Relaxationszeiten für eine gegebene Kopplungskonfiguration zu berechnen, setzen wir diese Entwicklung in (23) ein. Während L_1 die Anzahl der Spins in dem Cluster, auf den er angewendet wird, nicht erhöhen kann, wird L_3 dies in manchen Clustern tun. Auf diese Weise entstehen aus $L^{-1}s_j$ durch (32) Spincluster mit $(2k+1)$ Spins, die dann in $\langle s_i L^{-1}s_j \rangle$ statische $(2k)$ -Spin Korrelationen erzeugen. Diese können im Rahmen einer statischen Hochtemperaturent-

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

wicklung berechnet werden. Die Technik hierfür ist - zumindest für Kumulanten niedriger Ordnung - sehr gut ausgearbeitet /167-172/ (s. auch Abschnitt IV.4.).

Es gibt zwei Umstände in unserem Fall, die gegen die Verwendung dieser Methoden sprechen: Zum einen ist unser Modell inhomogen, die Mittelung über die Kopplungskonfigurationen ist der letzte Schritt der Berechnung. Dies verlangt, daß über die Bindungen, die einerseits in der Entwicklung des Liouville-Operators, andererseits in der Berechnung der statischen Kumulanten entstehen, bis zum letzten Schritt Buch geführt wird. (Die **Bindungen**, die aus der diagrammatischen Entwicklung stammen, entsprechen nicht direkt den **Kopplungen** auf dem Gitter.) Zum anderen wird durch sukzessive Anwendung von L_3 die Berechnung von Kumulanten höherer Ordnung (6-8) benötigt, deren Systematik relativ umständlich ist. Aus diesen Gründen bedienen wir uns in dieser Arbeit des Algorithmus von Yahata /144/, der ursprünglich für das homogene Modell ausgearbeitet wurde und hier für den inhomogenen Fall implementiert wird. Einzelheiten der technischen Aspekte mit Beispielen werden in Abschnitt IV.4. aufgeführt.

Die statischen Multi-Spin Korrelationen werden in dieser Methode durch Iteration der Gleichung des detaillierten Gleichgewichts (24) berechnet.

f_i sei eine Funktion aller Spinvariablen außer s_i . Wenn (24) mit $s_i f_i$ multipliziert und die Spur über alle Spinvariablen gebildet wird, erhalten wir

$$\langle f_i(s_1, \dots, s_{i-1}, s_{i+1}, \dots, s_N) s_i w_i(s_i) \rangle = 0. \quad (33)$$

Weil

$$L s_k = \sum_j w_j(s_j) (2\delta_{jk}) s_k = 2w_k(s_k) s_k \quad (34)$$

nach (25), gilt

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$\langle f_j L s_j \rangle = 0 , \quad (35)$$

und daher mit (30,31)

$$\langle f_j s_j \rangle = \sum_{m=1,3} \langle f_j L_m s_j \rangle . \quad (36)$$

Nach Einsetzen von $f_j = s_1 s_2 \dots s_{j-1} s_{j+1} \dots s_N$ und Umordnen

$$\langle s_1 \dots s_{n-1} s_n \rangle = \sum_{m=1,3} \langle s_1 \dots s_{n-1} L_m s_n \rangle . \quad (37)$$

Um eine Multi-Spin Korrelation (linke Seite) zu berechnen, kann man rekursiv vorgehen: auf der rechten Seite von (37) entstehen andere Multi-Spin Korrelationen, multipliziert durch $c_m = O(T^{-m})$. Sie werden ebenfalls mit Hilfe von (37) berechnet, bis nur solche Korrelationen entstehen, die wegen der angesammelten Faktoren von c_m -s, über die gewünschte Ordnung hinausgehen. Während dieser Iteration werden auch solche Korrelationen generiert, die keinen Spin enthalten (die beiden Cluster $(s_1 \dots s_{n-1})$ und $(L_m s_n)$ sind gleich, alle Spins werden vernichtet). Deren Vorfaktoren liefern die Hochtemperaturentwicklung in Potenzen von c_1 und c_3 , die dann nach (29) in Potenzen von z.B. T^{-1} umgerechnet werden können.

Dieser Algorithmus hat den Vorteil, daß sowohl die Dynamik als auch die Statik nach derselben Methode (Anwendung der Operatoren L_1 und L_3 auf Spincluster) berechnet werden und die Buchführung über die Bindungen auf einfache Weise gewährleistet ist. Weil die Übergangswahrscheinlichkeit $w_j(s_j)$ in das thermodynamische Gleichgewicht führt, ist das Resultat dieser Entwicklung von der genauen Form von $w_j(s_j)$ unabhängig. Die durch (23) definierten Relaxationszeiten werden also wie folgt berechnet: Die Anwendung von L^{-1} erzeugt dynamische **Cluster**, deren Spins in den Korrelationsfunktionen in (23) auftreten. Diese statischen **Korrelationen** werden in Hochtemperaturentwicklung berechnet. Die **Graphen** dieser Entwicklung werden in die Cluster eingebettet,

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

die außer den Spins noch die von dem Liouville-Operator stammenden Bindungen enthalten. So kommt ein **Diagramm** zustande. Die Relaxationszeit ist eine Summe dieser Diagramme, die daher einzeln der Konfigurationsmittelung unterzogen werden können. So erhalten wir **Terme** in der Hochtemperatur-Reihe.

3. Resultate

Die berechnete Größe entsteht also in Potenzen von c_1 und c_3 . Die "natürliche" Entwicklungsvariable des Ising-Modells ist $v(T) = \tanh(K)$ mit $K = J/T$. Um die Reihe in diesen Variablen zu erhalten, entwickeln wir c_1 und c_3 nach Potenzen von v bis zu der gewünschten Ordnung.

$$\begin{aligned} c_1 &= v - 3v^3 + 15v^5 + \dots \\ c_3 &= -2v^3 + 14v^5 + \dots \end{aligned} \quad (38)$$

Jedes Diagramm ist noch zusätzlich mit einem Produkt der Bindungsvariablen ϵ_{ik} aus (31) multipliziert. Diese genügen der Verteilung

$$P(\epsilon_{ij}) = p \delta(\epsilon_{ij} - 1) + (1-p) \delta(\epsilon_{ij} + 1) . \quad (39)$$

Weil $\epsilon_{ij}^2 = 1$, ist die Mittelung über (39) besonders einfach: Der gemittelte Vorfaktor der Diagramme ist

$$f_d = (2p-1)^j , \quad (40)$$

wobei j die Anzahl der einfachen (= einfach besetzten) Bindungen in dem Diagramm ist. Diese ist natürlich nie größer als die Gesamtzahl der Bindungen, daher hat jede berechnete Größe eine Entwicklung der Form

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$\tau = \sum_{k=0}^N \left(\sum_{\ell=0}^k a_{k\ell} (2p-1)^\ell \right) v^k. \quad (41)$$

Die Koeffizienten von v^k sind **exakte** Funktionen der Konzentration der ferromagnetischen Kopplungen p . Gl. (41) gilt daher in dem ganzen Konzentrationsbereich $1/2 \leq p \leq 1$.

Aus technischen Gründen (s. Abschnitt IV.4.) ist die Entwicklung für $p = 1/2$ (symmetrische Verteilung) und $p > 1/2$ (unsymmetrische Verteilung) unterschiedlich aufwendig, in dem letzteren Fall sind die Reihen bedeutend kürzer, daher sollen die beiden Fälle getrennt behandelt werden.

3.1. Analyse von Potenzreihen

In diesem Abschnitt sollen die Methoden, die wir für die Analyse der Reihen verwendet haben /151-155/, kurz, ohne allzu große mathematische Präzision, vorgestellt werden.

Wenn die Funktion $F(z)$ die folgende Entwicklung um $z = 0$ hat

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (42)$$

und

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{-1/n} = z_0, \quad (43)$$

gilt, dann konvergiert die Reihe (42) für $|z| < z_0$, und divergiert für $|z| > z_0$ auf der komplexen Ebene. Es gibt dann mindestens eine Singularität auf dem Konvergenzkreis $|z| = z_0$. Das Verhalten der Koeffizienten a_n wird von dieser Singularität bestimmt. Es wird angenommen, daß sie physikalisch dem gesuchten kritischen Punkt entspricht und die folgende allgemeine Form hat

$$F(z) \approx A (1-z/z_0)^{-(1+g)}. \quad (44)$$

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Dabei ist A die kritische Amplitude und $(1+g)$ der kritische Exponent. (44) beschreibt nur das asymptotische Verhalten für $z \rightarrow z_c$, alle Korrekturterme wurden weggelassen. Wenn die Reihe relativ kurz ist, sind sie aus der vorhandenen Information nicht zu bestimmen. Diese Art der Singularität wird **algebraisch** genannt und in Analysen von Potenzreihen meist angenommen.

Wenn diese Singularität sehr stark ist, kann sie die Vorzeichen aller Koeffizienten bestimmen, ansonsten nur die für großes n . Wenn die Singularität auf der positiven (negativen) reellen Achse liegt, sind die Vorzeichen positiv (alternierend). Wenn sie komplex ist (ein komplex konjugiertes Paar, da alle a_n reell sind), verhält sich das Vorzeichen unregelmäßig. Das ist der schwierigere Fall und zuerst soll eine Methode beschrieben werden, die in der Lage ist, die dominante Singularität auf der reellen Achse zu finden.

3.1.1. "Ratio method"

Aus (43) folgt, daß

$$a_n \approx f(n) \cdot \mu^n, \quad (45)$$

wobei $\mu = 1/z_c$. Die Funktion $f(n)$ muß die Bedingung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \{f(n)\}^{1/n} = 1 \quad (46)$$

erfüllen. Für $f(n)$ wird die Form

$$f(n) = A \frac{(q+1)(q+2) \cdots (q+n)}{n} \xrightarrow{(n \rightarrow \infty)} A n^q / \Gamma(q+1). \quad (47)$$

angenommen, wobei $\Gamma(x)$ die Gamma-Funktion bezeichnet. (47) impliziert das asymptotische Verhalten (45). Die Folge μ_n

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

die durch das Verhältnis aufeinanderfolgender Koeffizienten definiert ist

$$\mu_n = a_n/a_{n-1} \quad (48)$$

verhält sich nach (45) und (47) wie

$$\mu_n \approx \mu \left(1 + g/n + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \right), \quad n \rightarrow \infty. \quad (49)$$

Wenn die Folge μ_n gegen $1/n$ aufgetragen wird ("ratio plot"), können $1/z_c$ und g/z_c als Parameter einer Geraden bestimmt werden. Auf "loose packed" Gittern zeigt (49) eine überlagerte Oszillation, die gemindert, aber nicht gänzlich eliminiert werden kann, wenn man statt (48)

$$\varrho_n = (a_n/a_{n-2})^{1/2} \approx \mu(1+g/n), \quad n \rightarrow \infty. \quad (50)$$

aufträgt. Von uns wird (50) angewendet.

Für Reihen, deren dominante Singularität nicht auf der reellen Achse liegt, ist die obige Methode nicht anwendbar, für sie wird eine andere benötigt.

3.1.2. Padé Approximanten

Die Padé Approximanten sind in der Lage, eine Funktion über deren Konvergenzradius hinaus analytisch fortzusetzen. Sie sind der Quotient zweier Polynome

$$[L, M] = \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} = \frac{p_0 + p_1 z + \dots + p_L z^L}{1 + q_1 z + \dots + q_M z^M}. \quad (51)$$

Die Koeffizienten p_k , q_k werden so gewählt, daß die Taylor-Entwicklung von $[L, M]$ bis Ordnung $(L+M)$ mit der von $F(z)$ übereinstimmt. Zu einer Reihe mit N bekannten

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Termen können also die Approximanten $[L, M]$ mit $L+M \leq N$ gebildet werden. Die Padé Tabelle besteht aus diesen Approximanten, die in eine Matrix geordnet werden. Aus gewissen Gründen (die hier nicht erörtert werden sollen) konvergieren die Folgen aus den diagonalen und subdiagonalen Elementen der Tabelle schneller zu $F(z)$.

Die Approximanten können einfache Pole exakt darstellen, nicht aber Schnittsingularitäten. Es wird daher nicht $F(z)$ in (44) untersucht, sondern

$$D(z) = \frac{d}{dz} \ln F(z) \approx \frac{-(1+g)}{z - z_c} \quad (z \rightarrow z_c), (52)$$

Diese Funktion hat nur einen einfachen Pol bei $z = z_c$. Sollte $Q_M(z)$ in dem Approximanten $[L, M]$ in der Nähe von z_c eine Nullstelle haben, so ist sie ein Schätzwert für z_c und das zugehörige Residuum eine Approximation für den kritischen Exponenten. Die Berechnung der Nullstellen und der Residuen wird mit einem geeigneten Computer-Programm durchgeführt. Wenn der exakte oder ziemlich genaue Wert von z_c bekannt ist, bildet man die Approximanten zu der Funktion

$$\lambda^*(z) = (z_c - z) D(z) \approx (1+g) \quad , \quad z \rightarrow z_c \quad (53)$$

und berechnet ihren Wert bei $z = z_c$ ("biased" Padé Tabelle).

Es sollen noch die sogenannten "spurious" Pole erwähnt werden. Sie sind Nullstellen in $Q_M(z)$, nahe dem Ursprung mit einem sehr kleinen Residuum, da gleichzeitig eine Nullstelle in $P_L(z)$ in der unmittelbaren Nähe von der in $Q_M(z)$ auftritt. Der mathematische Grund für diese "Defekte" ist nicht bekannt. Weil sie in dem analytischen Bereich von $F(z)$ erscheinen, sind sie Anzeichen einer irregulären Konvergenz und werden in der Padé Tabelle mit (*) gekennzeichnet.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Nach dieser kurzen Einführung werden nun die Reihen mit den oben genannten Methoden analysiert; weitere Einzelheiten werden an den geeigneten Stellen gegeben.

3.2. Unsymmetrischer Fall

Bei $p = 1$ ist das Modell rein ferromagnetisch. Die Statik ist exakt gelöst /157/. Für die Dynamik gibt es approximative Rechnungen und der Wert des dynamischen Exponenten ist relativ genau bekannt /z.B. 143-145/. Mit wachsendem $(1-p)$ werden Verunreinigungen in das homogene System in Form von antiferromagnetischen Kopplungen (daher Frustration) eingeführt.

Auf Grund numerischer Berechnungen /64b/ und einer Störungsrechnung in $(1-p)$ /156/ erwartet man, daß die kritische Temperatur mit $(1-p)$ stetig sinkt, und die ferromagnetische Ordnung bei einer kritischen Konzentration vollkommen zerstört wird, $T_c(p=p_c) = 0$. Wie in der Einführung zu diesem Kapitel schon diskutiert wurde, erwartet man, daß für $p < p_c$ bei $T = 0$ ein Spinglaszustand existiert. Unsere Fragestellung ist daher in den beiden Konzentrationsbereichen verschieden:

Für $1 > p > p_c$ interessieren wir uns für den **ferromagnetischen Übergang**, den wir durch die Analyse der ferromagnetischen Größen: Relaxationszeit τ_{FM} und statische Suszeptibilität χ_{FM} untersuchen wollen.

Für $p_c > p$ interessieren wir uns für den **Spinglasübergang** bei $T = 0$. Er wird durch die Analyse der für das Spinglas charakteristischen Größen τ_q , τ_{EA} und χ_{EA} studiert.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

3.2.1. Der ferromagnetische Übergang

Die Koeffizienten der Hochtemperatur-Reihen für τ_{FM} und χ_{FM} sind aus den **Tabellen IV.1.-2.** zu entnehmen. Für beide Größen stehen 10 nicht-triviale Terme zur Verfügung. Sie können bei $p = 1$ mit den Resultaten für das ferromagnetische Modell verglichen werden /143-145,169/. **Abb. IV.1.** zeigt die "ratio plots" für beide Größen bei verschiedenen Konzentrationen.

Bei $p = 1$ sind beide "ratio plots" eine Gerade, die kritische Temperatur ($T_C^{\text{exakt}}/J = 2.2692$) und die Exponenten können mit guter Genauigkeit abgeschätzt werden. Wenn

$$\tau_{FM} \approx (T-T_C)^{-\Delta}, \quad \chi_{FM} \approx (T-T_C)^{-\gamma}, \quad T \rightarrow T_C, \quad (54)$$

erhält man $T_C = 2.26 \pm 0.01$ und $\Delta = 3.9 \pm 0.1$ aus τ_{FM} , und $T_C = 2.266 \pm 0.005$ und $\gamma = 1.7 \pm 0.1$ aus χ_{FM} . Aus der Definition von τ_{FM} folgt, daß

$$\Delta = \gamma + \nu z \quad (55)$$

gilt, wobei ν der Exponent der Korrelationslänge und z der dynamische Exponent ist /138/. Diese Abschätzungen sind relativ genau ($\gamma_{\text{exakt}} = 7/4$, $\Delta = 3.875 \pm 0.01$ /145/), vor allem die aus χ_{FM} . Mit wachsender Konzentration der anti-ferromagnetischen Kopplungen sinkt die Genauigkeit, wie aus der Krümmung in den "ratio plots" in **Abb. IV.1.** ersichtlich.

FERROMAGNETISCHE RELAXATIONSZEIT

	K= 1	K= 2	K= 3	K= 4	K= 5	K= 6	K= 7	K= 8	K= 9	K=10
L= 0		8		32		125 + 1/3		376 + 8/9		1135 + 41/81
L= 1	8		56		200		802 + 2/3		1956 + 4/9	
L= 2		36		240		824		3120		7321 + 229/243
L= 3			144		952		3048		11456 + 8/9	
L= 4				532		3456		10903 + 11/27		40295 + 107/243
L= 5					1832		11912		36485 + 17/27	
L= 6						6052		38864		115437 + 17/27
L= 7							19328		123382 + 2/9	
L= 8								60428		380780 + 4/9
L= 9									185032	
L=10										559002 + 14/27

Tabelle IV. 1.

STATISCHE FERROMAGNETISCHE SUSZEPTIBILITÄT

	K= 1	K= 2	K= 3	K= 4	K= 5	K= 6	K= 7	K= 8	K= 9	K=10
L= 0		0		0		0		0		0
L= 1	4		0		0		-8		8	
L= 2		12		0		-8		-32		16
L= 3			36		-8		-32		-152	
L= 4				100		-32		-152		-496
L= 5					284		-152		-560	
L= 6						780		-544		-2016
L= 7							2164		-1968	
L= 8								5900		-6448
L= 9									16164	
L=10										43820

Tabelle IV. 2.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

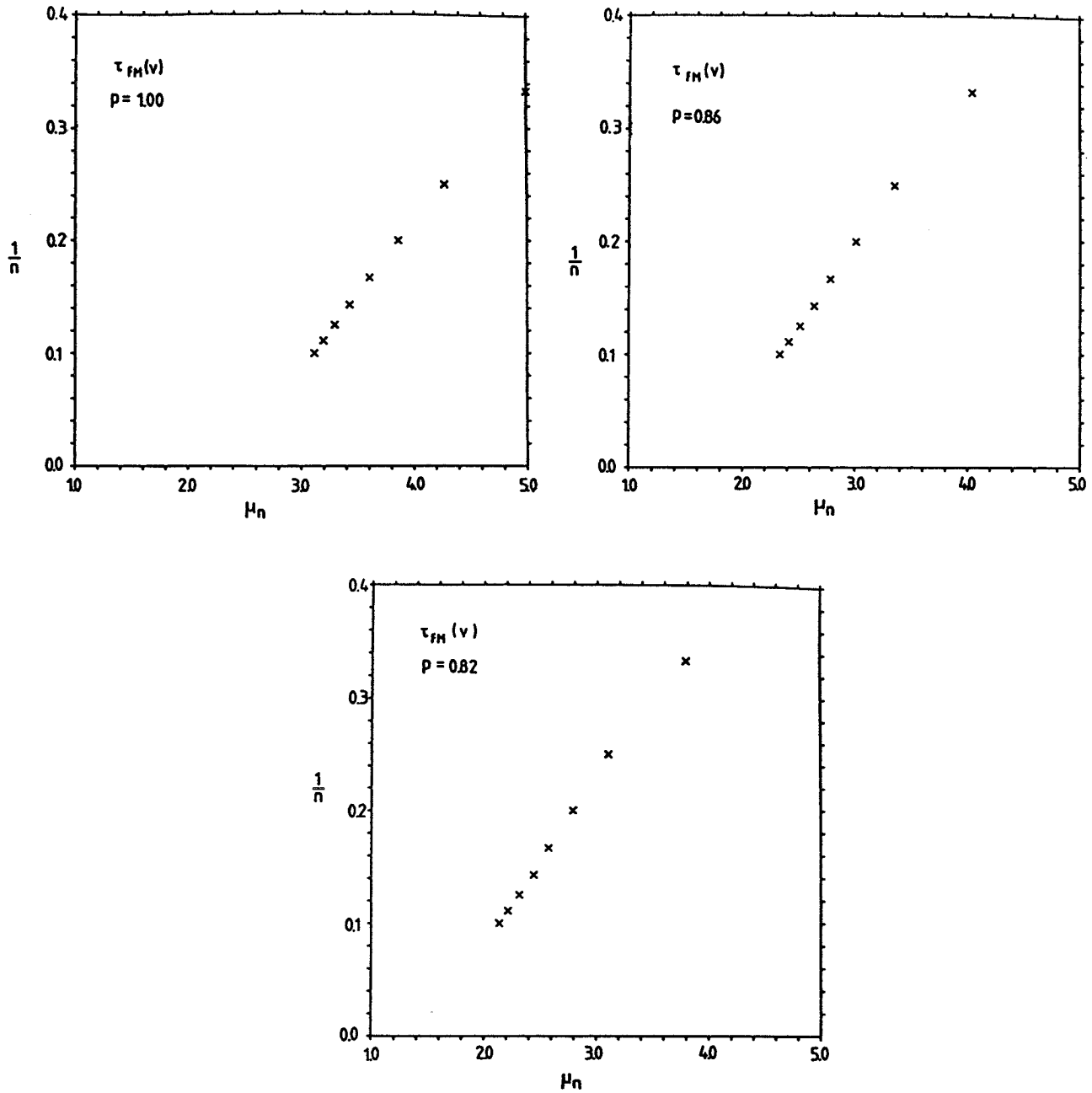


Abb.IV.1.a.

"Ratio plots" für die ferromagnetische Relaxationszeit bei verschiedenen Konzentrationen p .

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

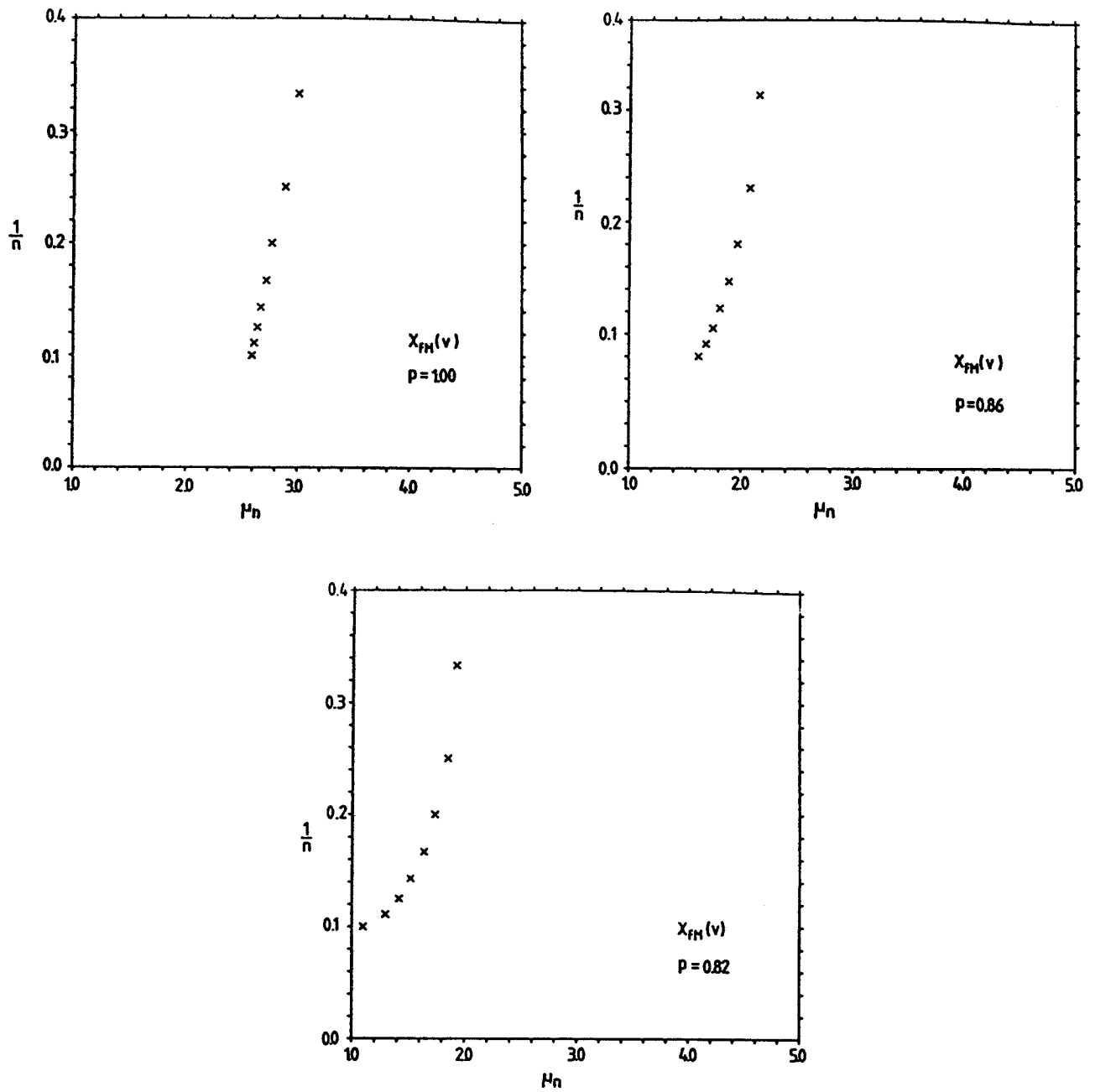


Abb. IV.1.b.

"Ratio plots" für die ferromagnetische Suszeptibilität bei verschiedenen Konzentrationen p .

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Zunächst soll die **statische Suszeptibilität** analysiert werden. Mit sinkendem p (Konzentration der ferromagnetischen Kopplungen) sinkt auch die kritische Temperatur. Die Steigung der $T_C(p)$ Kurve bei $p = 1$ ist ein Maß für den Einfluß der Verunreinigungen auf den ferromagnetischen Übergang:

$$T_C(p)/T_C(p=1) = 1 - S(1-p) + O((1-p)^2) \quad . \quad (56)$$

Unser Resultat $S = 3.13 \pm 0.15$ ist konsistent mit dem Wert aus einer Variationsrechnung im Rahmen der Replikamethode $S = 3.2091$ /158b/ und mit dem Wert aus der Störungsrechnung bis Ordnung $(1-p)^2$, $S = 3.208$. Mit beiden Methoden wurde diese Steigung auch für den Fall der Verdünnung $(+J,0)$ berechnet, sie ist $S = 1.329$. Der Einfluß der antiferromagnetischen Verunreinigungen ist also stärker als der der Verdünnung. Der Grund hierfür ist die Einführung von Frustration, die zu hoher Entartung und zu vielen metastabilen Zuständen führt.

In **Abb. IV.2.** wurde $T_C(p)$ gegen p aufgetragen. Die kritische Temperatur sinkt stetig mit sinkendem p und verschwindet bei einer kritischen Konzentration $p_C = 0.85 \pm 0.03$: $T_C(p_C) = 0$. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, existiert für $p < p_C$ bei $T = 0$ eine Spinglas-Phase. Die kritische Konzentration wurde unter der Annahme, daß die ferromagnetische Phase genau dann instabil wird, wenn die nicht-frustrierten Plaketten nicht mehr perkolieren /158b/, bereits berechnet. Das Resultat beträgt $p_C = 0.833$. Bisherige Reihenentwicklungen finden einen um etwa 10% höheren /148,149 s. auch die Einleitung zu diesem Kapitel/, eine Berechnung mit Grassmann Bahnintegralen einen um etwa 10% niedrigeren Wert /159/. Aus der plötzlichen Änderung der Steigung der paramagnetischen Phasengrenze wurde $p_C = 0.85$ gefolgert /160/. Monte Carlo Simulationen ergaben $0.8 < p_C < 0.85$ /117/, die Transfer-Matrix Methode $p_C = 0.88$ /64b/.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

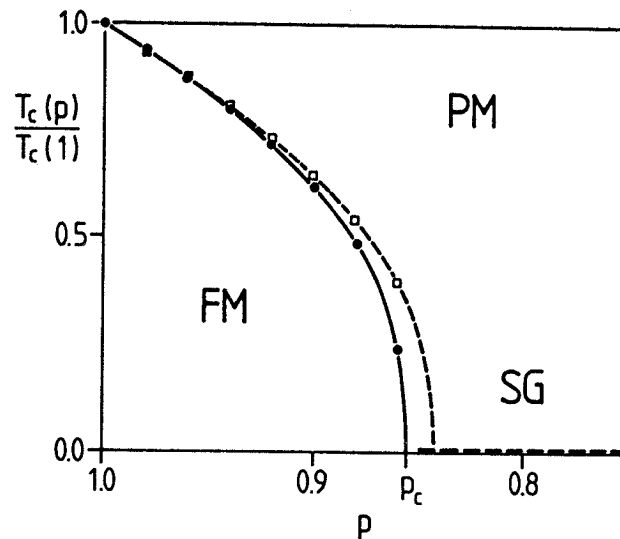


Abb. IV.2.

Phasendiagramm des zweidimensionalen Ising-Modells mit Zufallskopplungen aus 10 (durchgezogene Linie) bzw. 9 Termen (gestrichelte Linie).

$$p_c = 0.85 \pm 0.03 .$$

PM : paramagnetische Phase

FM : ferromagnetische Phase

SG : Spinglas-Phase

Aus Universalitätsgründen würde man erwarten, daß der kritische Exponent γ von der Konzentration nicht stetig abhängt. Dann gibt es drei Möglichkeiten für sein Verhalten.

1. $\gamma(p=1) \neq \gamma(1 > p > p_c) = \gamma(p_c)$
2. $\gamma(p=1) = \gamma(1 > p > p_c) \neq \gamma(p_c)$
3. $\gamma(p=1) \neq \gamma(1 > p > p_c) \neq \gamma(p_c)$

Das heuristische Kriterium von Harris besagt, daß der scharfe Phasenübergang zweiter Ordnung des reinen Systems auch unter dem Einfluß von Verunreinigungen bestehen bleibt, wenn der kritische Exponent der spezifischen Wärme α negativ ist. Für $\alpha > 0$ wird der Übergang in einer nicht bekannten

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Weise abgeändert /161/. Eine Renormierungs-Gruppe Behandlung hat dieses Argument bestätigt und aus einer Fixpunkt-Analyse gefolgert, daß die kritischen Exponenten von der Konzentration nicht stetig abhängen /162/. In dem zweidimensionalen Ising-Modell ist aber $\alpha = 0$, die obigen Voraussagen sind daher nicht anwendbar.

Eine Hochtemperaturentwicklung für Ising und Heisenberg Systeme fand dagegen von der Konzentration stetig abhängende Exponenten, sowohl in $d = 2$, als auch in $d = 3$ /147/. Von den Autoren wurde dieses Verhalten auf Grund der obigen Überlegungen als unphysikalisch bezeichnet. Die "Ratio method" Analyse unserer Reihe zeigt ein qualitativ ähnliches Verhalten. Jede endliche Reihe wird jedoch Variation von $\gamma(p)$ zeigen. Mann kann nur hoffen, daß aus einer wachsenden Anzahl der Terme das asymptotische Verhalten extrapoliert werden kann.

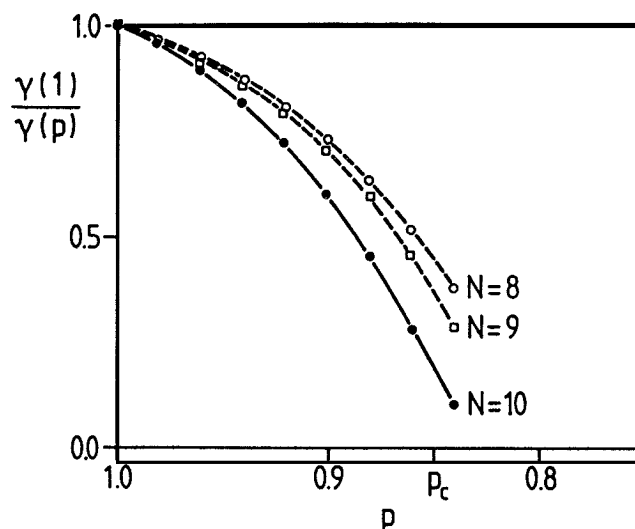


Abb. IV.3.

Der kritische Exponent γ mit der "ratio method" für die Hochtemperaturentwicklung mit wachsender Anzahl von Termen.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Um die mit der Analyse verbundenen Fehler niedriger zu halten, wurde eine Kritischer-Punkt Renormierung eingeführt. Statt der einfachen Quotienten (48) oder (50) kann man nämlich auch die Folge

$$\tilde{\mu}_n = \frac{\mu_n(p)}{\mu_n(1)} \quad \text{oder} \quad \tilde{\varrho}_n = \frac{\varrho_n(p)}{\varrho_n(1)} \quad (57)$$

bilden, die im Sinne von (49,50) zu

$$\tilde{z}_c = \frac{z_c(1)}{z_c(p)} \quad , \quad (1+\tilde{\gamma}) = (1+\gamma(p)) - (1-\gamma(1)) \quad (58)$$

zu extrapolieren sind.

Die Kurven haben zwar eine relativ kleine Steigung bei $p = 1$, was Möglichkeit 2. von oben nahe legen würde, es ist aber schwierig, angesichts der starken N -Abhängigkeit, den Verlauf der Kurven für $N \gg 1$ vorausszusagen. Der Wert des kritischen Exponenten bei dem multikritischen Punkt $T_c(p_c) = 0$ scheint sehr groß zu sein (letzte Schätzung $\gamma(p_c) \approx 10 \cdot \gamma(1)$). Eine Aussage über γ in dem Bereich $1 > p > p_c$ wird erst dann möglich sein, wenn $\gamma(p_c)$ mit besserer Genauigkeit bekannt sein wird.

Die Padé Analyse mit der Kritischer-Punkt Renormierung in (57,58) kombiniert liefert nicht-konvergierende Werte. Wenn man mehr und mehr Terme berücksichtigt, werden die Approximanten immer weniger brauchbar. Die Erklärung für dieses Verhalten mag in der unterschiedlichen Natur der beiden angewendeten Methoden zu finden sein. Die "ratio method" konzentriert sich auf die dominierende Singularität und gibt sie mit wachsender Anzahl der Terme genauer wieder. Die Padé Methode versucht dagegen alle Singularitäten auf einmal darzustellen. Mit mehr Termen können auch weniger dominante Singularitäten mitberücksichtigt werden, und so kann die Konvergenz letztendlich verlangsamen. Die obigen Befunde interpretieren wir dadurch, daß die Struktur der Singularitäten in dem verunreinigten System sehr komplex ist.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Die Padé Approximanten, die zu verwenden sind, liefern einen von den Verunreinigungen unveränderten kritischen Exponenten. Es sind die Approximanten $[2,2]$, $[2,3]$, $[3,2]$, $[3,3]$ und gelegentlich $[4,3]$. Außer $[2,2]$ und $[3,2]$ haben alle einen "spurious" Pol. Abgesehen davon, daß sie von ziemlich niedriger Ordnung sind, liefern sie für alle Konzentrationen $\chi(p)/\chi(1) = 1.000 \pm 0.006$. Das, zusammen mit der kleinen Anfangssteigung in **Abb. IV.3.**, spricht dafür, daß die Exponenten des reinen Systems von Verunreinigungen nicht verändert werden. Die obigen Approximanten liefern, da sie nur von niedriger Ordnung sind, für die kritische Temperatur einen im Vergleich mit dem Ergebnis aus der "ratio method" zu großen Wert. Es ist bekannt, daß im allgemeinen eine Korrelation zwischen der Genauigkeit von T_c und χ besteht /155/, daher kann hier keine überzeugende Aussage getroffen werden.

In dem ferromagnetischen Fall divergieren die statische Suszeptibilität und die Relaxationszeit bei derselben kritischen Temperatur, da der fundamentale Mechanismus des Übergangs in der Divergenz der Korrelationslänge bei T_c zu finden ist. Dies sollte auch für $p < 1$ so bleiben. Wie aus **Abb. IV.1.** ersichtlich, wird T_c in τ_{FM} durch die sinkende Konzentration viel weniger beeinflusst als T_c in χ_{FM} . Während das Verhalten von $T_c(p)$ aus χ_{FM} bestimmt mit den Resultaten anderer Methoden gut übereinstimmt, ist die Analyse des ferromagnetischen Übergangs an Hand von τ_{FM} schwierig, da τ_{FM} den Beitrag der lokalen Korrelationen (τ_q) enthält, der auch in der Spinglas-Phase ($p < p_c$) bei $T = 0$ divergiert. Dadurch wären alle Abschätzungen aus den vorhandenen Termen für den kritischen Exponenten von τ_{FM} unzuverlässig.

Eine exakte Grenze kann man auf jeden Fall für Δ angeben. Die folgende Herleitung ist eine direkte Verallgemeinerung der exakten Ungleichung von Halperin für das ferromagnetische Modell /163/.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Es sei $P(J_{ij})$ die Verteilung der Zufallskopplungen in einem ungeordneten System, in dem eine Dynamik, die die totale Magnetisierung nicht erhält, definiert ist. Es sei $f(t)$ eine Funktion der Spinvariablen, deren Gleichgewichtswert $[<f>_0]$ verschwindet. Die Autokorrelationsfunktion für eine gegebene Kopplungskonfiguration hat die folgende Spektraldarstellung für $t > 0$:

$$C(J_{ij}, t) = \langle f(0)f(t) \rangle = \int_0^\infty \alpha(\lambda, J_{ij}) e^{-\lambda t} d\lambda, \quad (57)$$

mit $\alpha(\lambda, J_{ij}) \geq 0$ für alle λ -s. Die konfigurationsgemittelte Funktion (Observable) ist

$$C(t) = [\langle f(0)f(t) \rangle] = \int dJ_{ij} P(J_{ij}) C(J_{ij}, t). \quad (58)$$

Es sei $\tilde{\tau}$ die normierte "charakteristische" Relaxationszeit

$$\tilde{\tau} = \frac{\int_0^\infty C(t) dt}{C(t=0)} \quad (59)$$

und $\tilde{\rho}$ die Anfangsrelaxations-Rate

$$\tilde{\rho} = - \left. \frac{d}{dt} \frac{C(t)}{C(0)} \right|_{t=0}. \quad (60)$$

Mit der Norm

$$\|X\| = \frac{\int dJ_{ij} P(J_{ij}) \int_0^\infty \alpha(\lambda, J_{ij}) e^{-\lambda t} X d\lambda}{\int dJ_{ij} P(J_{ij}) \int_0^\infty \alpha(\lambda, J_{ij}) e^{-\lambda t} d\lambda} \quad (61)$$

erhalten wir aus (59) und (60)

$$\tilde{\tau} = \left\| \frac{1}{\lambda} \right\|, \quad \tilde{\rho} = \|\lambda\|. \quad (62)$$

Die Schwarzsche Ungleichung (anwendbar, da $P(J_{ij}) \cdot \alpha(\lambda, J_{ij}) > 0$)

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$|(f_1, f_2)| \leq \|f_1\| \cdot \|f_2\| \quad (63)$$

auf (62) angewandt, ergibt

$$\tilde{\tau} \cdot \tilde{\nu} = \left\| \frac{1}{\lambda} \right\| \|\lambda\| \geq 1. \quad (64)$$

Wenn $f(t)$ die totale Magnetisierung bezeichnet, haben wir

$$C(0) = T \cdot \chi, \quad (65)$$

wobei χ die statische Suszeptibilität ist. Nach Abe /80/ können wir $\tilde{\nu}$ berechnen:

$$\tilde{\nu} = R(T)/C(0) = \frac{2}{C(0)} [\langle w_j \rangle], \quad (66)$$

wobei w_j die Übergangswahrscheinlichkeit ist. $R(T)$ ist eine endliche, stetige und positive Funktion, daher gilt

$$\frac{\tilde{\tau}}{T} \geq \frac{C(0)}{R} = \frac{T \cdot \chi}{R}. \quad (67)$$

Mit unserer Definition der Relaxationszeit (s. Gl. (23))

$$\tau = \tilde{\tau} \cdot C(0) \quad (68)$$

$$\tau \geq T^2 \chi^2 / R(T). \quad (69)$$

Bei jedem **endlichen** T_c gilt daher

$$\Delta \geq 2\chi. \quad (70)$$

Das ist eine exakte untere Grenze für die Spin-Relaxationsfunktion in jedem ungeordneten System, solange $T_c > 0$.

Die Analyse der Reihen für die ferromagnetischen Größen hat es ermöglicht, ein relativ genaues Phasendiagramm aufzuzeichnen (s. **Abb. IV.2.**). Die Analyse legt nahe, daß die

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Exponenten des reinen Systems das kritische Verhalten für kleines $(1-p)$ bestimmen. Da die Reihen das asymptotische Verhalten aber noch nicht erreicht haben, zeigen die Exponenten effektive Konzentrationsabhängigkeit. Um diese Frage näher untersuchen zu können, braucht man zumindest 3-4 Terme mehr. Die exakte Ungleichung zwischen den Exponenten der statischen Suszeptibilität und der Relaxationszeit dient als Test für das asymptotische Verhalten.

3.2.2. Der Spinglasübergang

Die Spinglasgrößen, die diesen Übergang beschreiben, sind den **Tabellen IV.3.-5.** zu entnehmen. Die Entwicklung ist von der Form (41). Für die Relaxationszeit des Edwards-Anderson Ordnungsparameters τ_q ist die Reihe gerade (wie auch in einem Ferromagneten), $a_{l,2k+1} = 0$. Für τ_q stehen bei jeder Konzentration 5, für τ_{EA} und χ_{EA} 10 nicht-triviale Terme zur Verfügung. Eine Analyse von τ_q im Spinglasbereich wird erst im symmetrischen Fall versucht (Abschnitt IV. 3.3.1.), wo mehr Terme zur Verfügung stehen.

Wir haben in dem vorangegangenen Abschnitt gesehen, daß die kritische Temperatur mit wachsender Konzentration der antiferromagnetischen Kopplungen zu Null geht: $T_c(p_c) = 0$. In dem Konzentrationsbereich $p_c > p_{1/2}$ erwarten wir daher einen Spinglas-Übergang bei $T = 0$.

Wie in Abschnitt IV.2. erklärt wurde, entsteht die Reihe für die zu entwickelnde Größe aus technischen Gründen in Potenzen von c_1 und c_3 in (38), sie sind die "natürlichen" Variablen der Entwicklung. Die Koeffizienten in den Tabellen beziehen sich auf die Variable $v(T) = \tanh(J/T)$, weil sie die "natürliche" Variable der statischen Entwicklung ist und so die Vergleiche erleichtert werden. "Natürlich" bedeutet

Tabelle IV. 3.

EDWARDS-ANDERSON RELAXATIONSZEIT

	K= 1	K= 2	K= 3	K= 4	K= 5	K= 6	K= 7	K= 8	K= 9	K=10
L= 0		16		124		709 + 1/3		3383 + 5/9		13331 + 77/81
L= 1	12		148		988		5316		23020	
L= 2		72		792		4904		24872		101417 + 157/243
L= 3			360		3780		21900		106211 + 19/27	
L= 4				1604		16272		91735 + 11/27		436736 + 80/243
L= 5					6492		65068		357944 + 4/9	
L= 6						24704		243176		1306824
L= 7							89424		872330 + 2/9	
L= 8								312908		3017098 + 2/3
L= 9									1061068	
L=10										3518446 + 14/27

RELAXATIONSZEIT DES EDWARDS-ANDERSON ORDNUNGSPARAMETERS

	K= 1	K= 2	K= 3	K= 4	K= 5	K= 6	K= 7	K= 8	K= 9	K=10
L= 0		8		32		$125 + 1/3$		$376 + 8/9$		$1135 + 41/81$
L= 1	0		0		0		0		0	
L= 2		0		0		0		0		0
L= 3			0		0		0		0	
L= 4				32		224		$943 + 11/27$		$4233 + 53/243$
L= 5					0		0		0	
L= 6						144		992		$3654 + 14/243$
L= 7							0		0	
L= 8								1088		8032
L= 9									0	
L=10										6816

Tabelle IV. 4.

STATISCHE EDWARDS-ANDERSON SUSZEPTIBILITÄT

	K= 1	K= 2	K= 3	K= 4	K= 5	K= 6	K= 7	K= 8	K= 9	K=10
L= 0		4		12		36		52		116
L= 1	8		24		72		152		264	
L= 2		36		96		248		448		592
L= 3			144		344		808		1000	
L= 4				524		1184		2552		1648
L= 5					1800		3880		7048	
L= 6						5916		11888		18560
L= 7							18848		36072	
L= 8								58812		104608
L= 9									179784	
L=10										542452

Tabelle IV. 5.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

hier, daß die angewendete Methode die Reihe in dieser Variablen liefert. Sie muß bei hohen Temperaturen in $K = J/T$ zu entwickeln sein, aber ansonsten ist man an keine besondere Wahl beschränkt, so könnte auch $K(T) = J/T$ genommen werden. Wenn aber der Phasenübergang bei sehr niedrigen Temperaturen auftritt, ist es angenehmer, den physikalischen Bereich $0 \leq T \leq \infty$ auf ein endliches Intervall, z.B. $1 \geq v \geq 0$ abzubilden. Die Umkehrung erfolgt bei hohen Temperaturen, wo diese Transformation auf jeden Fall analytisch sind. Es ist nun wichtig zu erkennen, daß durch Variablentransformationen, die bei $T = 0$ nicht analytisch sind, die Art der Singularität bei $T = 0$ u.U. geändert wird. Die statische "natürliche" Variable $v(T) = \tanh(K)$ ist z.B. analytisch in T für $T > 0$. Die Analyse von Potenzreihen basiert auf der Annahme, daß die Singularität in der thermodynamischen Funktion algebraisch ist (s. G. (44)). Diese Forderung schränkt die Wahl der Entwicklungsvariablen ein. Die Transformation $v = v(T)$ bildet bei **endlichen** Temperaturen eine algebraische Singularität in $(T-T_c)$ in eine **algebraische** in (v_c-v) ab. $v = v(T)$ ist aber bei $T = 0$ singular, und eine algebraische Singularität in (v_c-v) entspricht einer **wesentlichen** Singularität in $(T-T_c)$.

$$\begin{aligned} (v_c-v)^{-\phi} &= (1-v)^{-\phi} = (1-1+2e^{-2K})^{-\phi} \\ &\approx e^{2K\phi} = e^{2J\phi/T} = e^{2J\phi/(T-T_c)} \end{aligned} \quad (71)$$

Es ist daher sehr wichtig, für den Phasenübergang bei $T = 0$ die **richtige Variable** zu wählen. Wir werden in dem Konzentrationsbereich $p_c < p < 1/2$ die folgenden Variablentransformationen betrachten:

$$v_M(T) = \tanh \left(\sum_{m=1}^M K^m \right) \xrightarrow{(T \rightarrow 0)} 1 - 2e^{-2K^M} \quad (72)$$

$$x(T) = 1/(1+T/J) \xrightarrow{} 1 - T/J \quad (73)$$

Für die Spinglas-Relaxationszeit τ_{EA} erwartet man eine we-

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

sentliche Singularität (s. Problemstellung zu diesem Kapitel)

$$\tau_{EA} = \tau_0 e^{\Delta E/T} . \quad (74)$$

Dabei ist ΔE die Energiebarriere, die möglicherweise divergiert im Grundzustand

$$\Delta E/T \approx T^{-\nu_z} . \quad (75)$$

Falls die Energiebarrieren **endlich** sind ($\nu_z = 1$), entspricht (74) einer algebraischen Singularität in $v = v_{M=1}$:

$$\tau_{EA} = \tilde{\tau}_0 (1 - v_1)^{\Delta E/2} \quad (76)$$

Falls sie **divergieren** wie $\Delta E \sim b/T$ ($\nu_z = 2$), entspricht (74) einer algebraischen Singularität in $v_{M=2}$:

$$\tau_{EA} = \tilde{\tau}_0 (1 - v_2)^{-b/2} , \quad (77)$$

Wir analysieren unsere Daten sowohl mit Hilfe der "ratio method" als auch mit Hilfe der Padé Approximanten. Wir finden, daß die Relaxationszeit τ_{EA} für $p < p_c$ bei $T = 0$ divergiert. Im folgenden wird die Bestimmung von ΔE beschrieben werden.

Abb. IV.4. zeigt ein "ratio plot" in der Variable $v(T)$ bei einer Konzentration in der Mitte des Spinglas-Bereiches. Die Quotienten

$$\mu_n = \left(\frac{a_n}{a_{n-2}} \right)^{1/2} \approx v_1^* \left(1 + \frac{\Delta E}{2n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \right) \quad (78)$$

verhalten sich regulär für $n > 3$, sie können zu $v_1^* = 1$ ($T_c = 0$) extrapoliert werden, mit der Steigung $\Delta E/2$.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

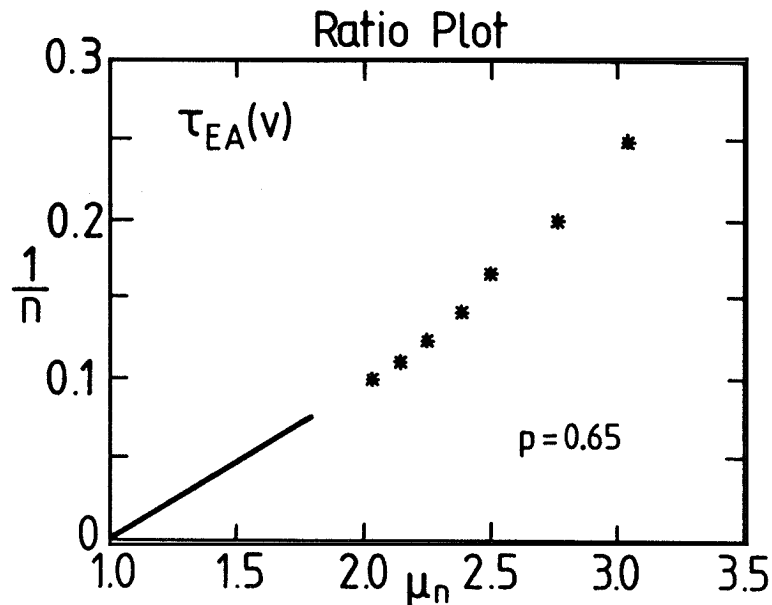


Abb. IV.4.

"Ratio plot" für die "Spinglas-Relaxationszeit" $\tau_{EA}(v)$, bei Konzentration $p = 0.65$. Die durchgezogene Linie zeigt das extrapolierte kritische Verhalten.

Die 10 verfügbaren Terme ermöglichen die genaue Bestimmung von ΔE leider nicht, die Daten zeigen noch eine leichte Krümmung. Unsere Schätzung für die Energiebarriere aus dem "ratio plot" beträgt $\Delta E/J \approx 20$. Dieser Wert liegt höher als andere Schätzungen von $\Delta E/J \approx 13-14$ /65,66,140/, ist aber nicht weit von $\Delta E/J \approx 18$, dem Wert, den ein Fit zu den Monte Carlo Daten unter Annahme endlicher Energiebarrieren ergab /67b/. (Diese Daten werden von dem Autor durch divergierende Barrieren interpretiert!)

Variablentransformationen mit $v_{M>1}$ nach (72) ergeben erratische, mit dieser Methode nicht analysierbare Reihen. Die Koeffizienten bleiben dabei positiv, was bedeutet, daß sich die dominierende Singularität auf der positiven reellen Achse befindet. Die "ratio method" sollte daher anwendbar

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

sein. Daß dies nicht der Fall ist, kann nur dadurch interpretiert werden, daß in diesen Variablen die Annahme (44) für das kritische Verhalten und somit die angenommene Form der Singularität falsch ist. Dies impliziert wiederum $\nu z < 2$. Insbesondere kann eine Divergenz der Form $\Delta E \sim b/T$ ausgeschlossen werden.

Die Singularität in τ_{EA} muß aus physikalischen Gründen eine wesentliche sein, die Transformation $x(T)$ aus (73) ist also ungeeignet für τ_{EA} (weil sie eine algebraische Singularität liefert). Der Vollständigkeit halber erwähnen wir, daß die "ratio plots" zu $\tau_{EA}(x)$ bei jeder Konzentration zu einer endlichen kritischen Temperatur extrapolieren mit $T_c \approx T_c(p=1)$; ein offensichtlich unphysikalisches Resultat.

Wir finden also, daß die "ratio plots" für einen Phasenübergang bei $T = 0$ sehr empfindlich bezüglich der richtigen Wahl der Entwicklungsvariable sind. Sie unterscheiden daher scharf zwischen den verschiedenen Arten der Singularitäten.

Es reicht natürlich keineswegs aus, nur eine Methode der Analyse anzuwenden, deshalb untersuchen wir die Reihe auch mit Hilfe von Padé Approximanten. Als erster Schritt wird die Aussage, daß die Energiebarrieren endlich bleiben, getestet. Dazu bildet man die Funktion

$$\begin{aligned} G(x) &= \frac{d}{dx} \ln \ln \tau_{EA}(x) \\ &= \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} \xrightarrow{x \rightarrow x^*} \frac{-\nu z}{(x^* - x)} \end{aligned} \quad (79)$$

Wobei die Variable $x(T)$ durch (73) definiert wurde. Bei dem kritischen Punkt $x^* = 1$ ($T_c=0$) sollte die Funktion $G(x)$ einen einfachen Pol mit Residuum $-\nu z$ besitzen. Die Padé Approximanten für $G(x)$ bei $p = 0.55$ werden in **Tabelle IV.6.** gezeigt. Bevor die logarithmische Ableitung in (79) gebildet wurde, haben wir in der Funktion $F(x) = \ln(\tau_{EA})$ die Euler-Transformation (s. Abschnitt

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

IV.4.)

$$x \rightarrow \frac{x}{1+9x} \quad (80)$$

durchgeführt, wodurch der kritische Punkt verschoben wurde
 $x^* = 1.0$ $x^* = 0.1$.

$\begin{smallmatrix} M \\ L \end{smallmatrix}$	2	3	4	5
2	0.105 1.05	0.105 1.05	0.098* 0.96*	0.097 0.95
3	0.105 1.03	0.105* 1.06*	0.097 0.95	—
4	0.104 0.97	0.106* 1.10*	0.095 0.92	
5	—	0.109* 1.17*		

Tabelle IV.6.

Padé Approximanten für die Edwards-Anderson Relaxationszeit bei $p = 0.55$ in der Variable $x(T) = 1/(1+T/J)$. Ein Asterix (*) weist auf einen "spurious" Pol in dem Approximanten hin, ein Strich bedeutet, daß ein unphysikalischer Pol näher am Ursprung liegt. Die obere Angabe ist für den kritischen Punkt, die untere für den Wert des Exponenten ν_z .

Man kann aus dieser Tabelle folgern, daß die kritische Temperatur gleich Null und der Exponent $\nu_z \approx 1$ ist. Wenn T_c exakt oder mit guter Genauigkeit bekannt ist, kann man durch Einsetzen dieses Wertes bessere Schätzungen für den Exponenten gewinnen ("biased" Padé Analysis). Die so gewonnenen Padé Approximanten zu (53) mit $G(x)$ aus (79) sind in **Tabelle IV.7.** gezeigt. Man beachte, daß in (79) zwei Transformationen durchgeführt werden, ehe die logarithmische Ableitung gebildet wird:

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$\begin{aligned} 1. \quad v &\rightarrow x(v) && : \mathbf{X} \\ 2. \quad \tau_{EA} &\rightarrow \ln \tau_{EA} && : \mathbf{L} \end{aligned} \quad (80a)$$

Die Transformationen $\mathbf{XL}$ und $\mathbf{LX}$ bedeuten unterschiedliche Aufsummationen der Reihen (s. Abschnitt IV.4.). Das Resultat ändert sich im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ nicht, für kürzere Reihen liefert der Unterschied eine Abschätzung der auftretenden Fehlerbalken.

$\begin{smallmatrix} M \\ L \end{smallmatrix}$	2	3	4	5
2	$\frac{—}{1.15}$	$\frac{0.95}{1.13}$	$\frac{0.96}{1.15}$	$\frac{0.98}{1.15}$
3	$\frac{—}{1.15}$	$\frac{0.96}{1.15}$	$\frac{0.92^*}{—}$	$\frac{—}{—}$
4	$\frac{—}{1.14}$	$\frac{0.98}{1.15}$	$\frac{—}{—}$	
5	$\frac{0.79}{1.15}$	$\frac{1.01}{1.16}$		

Tabelle IV.7.

Padé Approximanten für $\tau_{EA}(x)$ bei $p = 0.55$, unter Annahme von $T_C = 0$. Die obere Angabe bezieht sich auf die Transformations-Reihenfolge $\mathbf{XL}$, die untere auf $\mathbf{LX}$. Zeichenerklärung wie in Tabelle IV.6.

Unabhängig von der Reihenfolge der Transformationen finden wir $\rho_z = 1$ (nicht-divergierende Energiebarrieren). Wenn man diesen Wert als exakt annimmt, kann man eine Schätzung für die Höhe der Energiebarrieren $\Delta E/J$ erhalten, indem man Padé Approximanten zu der Funktion

$$F(x) = \ln \tau_{EA}(x) \xrightarrow{x \rightarrow x^*} \frac{\Delta E}{(x^* - x)} \quad (81)$$

bildet und das Residuum bestimmt. Das Resultat der Padé-Analyse ohne Vorgabe von $T_C = 0$ wird in **Tabelle IV.8.** gezeigt, wobei die Euler-Transformation (80) wieder angewen-

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

det wurde.

L \ M	2	3	4	5	6
2	—	0.105 18.8	0.104 18.0	0.104 17.9	0.105 [*] 18.1
3	0.105 18.8	0.100 15.5	0.100 15.5	0.099 15.4	0.099 15.2
4	0.104 17.9	0.100 15.5	—	—	
5	0.104 17.8	0.099 15.4	—		
6	0.104 [*] 18.1	0.099 15.2			

Tabelle IV.8.

Padé Approximanten zu $F(x) = \ln \tau_{EA}(x)$ bei $p = 0.55$. Die obere Angabe ist für die kritische Temperatur ($x^* = x(T_C) = 0.1$), die untere für die Energiebarriere $\Delta E/J$. Zeichenerklärung wie in Tabelle IV.6.

Die mit dieser Padé-Analyse gewonnene Energiebarriere liegt etwas niedriger, ist aber noch konsistent mit dem Wert aus der "ratio method", $\Delta E/J = 16 \pm 2$.

Durch die Kombination von "ratio method" und Padé-Analyse haben wir ein konsistentes Bild für das kritische Verhalten der Spinglas-Relaxationszeit τ_{EA} erhalten. Demnach hat τ_{EA} eine wesentliche Singularität bei $T = 0$, mit nicht-divergierenden Energiebarrieren. Deren Höhe kann mit der zur Verfügung stehenden Anzahl von Termen nur approximativ bestimmt werden. Dies ist der Grund dafür, daß wir die mögliche Konzentrationsabhängigkeit von $\Delta E = \Delta E(p)$ nicht genauer untersuchen konnten. Für $p < 0.7$ ist die Variation von $\Delta E(p)$ auf jeden Fall gering.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Die starke Singularität hat es ermöglicht, τ_{EA} aus zehn nicht-trivialen Termen relativ erfolgreich zu analysieren. Die statische Suszeptibilität χ_{EA} hat dagegen eine schwächere Singularität. Monte Carlo Simulationen /64,67/ finden

$$\chi_{EA} \sim T^{-\gamma}, \quad \gamma \approx 4, \quad (82)$$

also eine algebraische Singularität. Demnach wäre $x(T)$ die geeignete Entwicklungsvariable.

Wir beginnen die Analyse mit der "ratio method". Die "ratio plots" zeigen keine Singularität in dem Spinglas-Bereich für $T \geq 0$ in der Variable $v(T)$, in Übereinstimmung mit der Erwartung, daß die Singularität algebraisch ist.

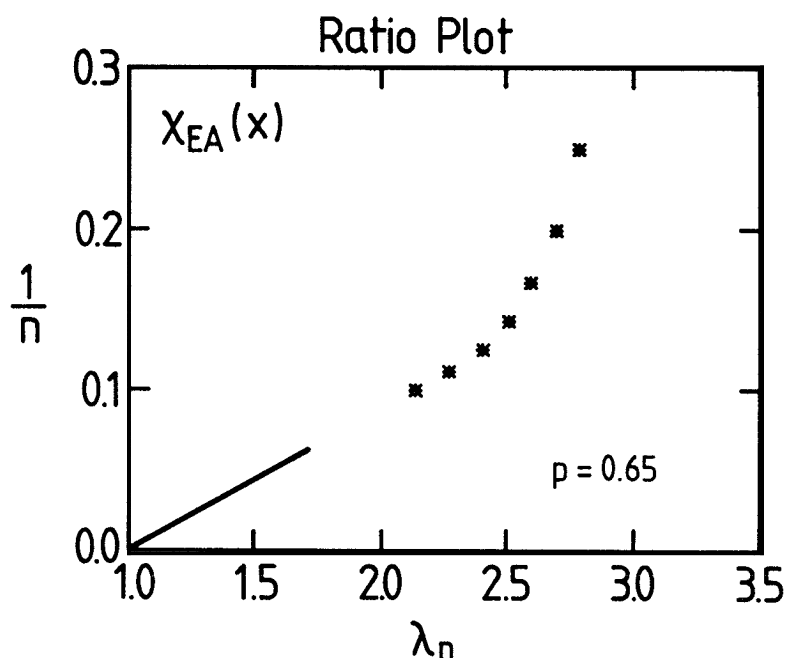


Abb. IV.5.

"Ratio plot" für die statische Edwards-Anderson Suszeptibilität in der Variable $x(T)$, bei $p = 0.65$ mit $\lambda_n = (a_n/a_{n-2})^{1/2}$. Die durchgezogene Linie zeigt das extrapolierte asymptotische Verhalten an.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Dies ist zuerst einmal auch der Beweis dafür, daß es keinen Phasenübergang bei $T \neq 0$ gibt. Die entsprechenden "plots" in der Variable $x(T)$ verhalten sich regulär, zeigen cross-over zum Spinglas-Verhalten bei $p = p_c$ und erreichen $T_c = 0$ für $p < p_c$. Ein Beispiel ist in **Abb. IV.5.** gezeigt. Der geschätzte Wert für den kritischen Exponenten bei $p = 0.65$ ist sehr groß: $\gamma \approx 12$.

Bei niedrigeren Konzentrationen als $p = 0.65$ ist χ_{EA} schwierig zu analysieren. Wir können nur feststellen, daß die Daten mit einer algebraischen Singularität konsistent sind.

Versuche, γ aus einer Padé-Analyse genauer zu bestimmen, scheitern, da die verschiedenen Approximanten nicht konvergieren. Dies ist nicht allzu überraschend: die Analyse der statischen Suszeptibilität in zwei Dimensionen aus 10 nicht-trivialen Termen konnte bisher nicht erfolgreich durchgeführt werden. Im Gegensatz zu höheren ($d > 4$) Dimensionen zeigt die Reihe ein sehr irreguläres Verhalten /60,63/. Daher ist eine quantitative Analyse bislang nicht gelungen.

3.2.3. Bemerkungen zu dem Exponenten der Autokorrelations-Funktion in dem Ferromagneten

Aus **Tabelle IV.1.** kann man die ersten 5 Koeffizienten der Entwicklung der Autokorrelations-Funktion in dem Ferromagneten ($p = 1$) ablesen. Es ist von Interesse, den kritischen Exponenten dieser Größe zu bestimmen. Bisher standen nur 3 nicht-triviale Terme zur Verfügung /143/, jetzt können 2 weitere "ratios" berechnet werden. Wir bilden $\mu_n = (a_n/a_{n-1})$ zu der Reihe

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$\tau_q(p=1) = 1 + 8 v^2 + 64 v^4 + 1480/3 v^6 + 91808/27 v^8 + 5800600/243 v^{10} \dots, \quad (83)$$

und setzen die exakte kritische Temperatur $v_c = \sqrt{2} - 1$ ein, um eine Abschätzung für den Exponenten zu bekommen:

$$\Delta_q = 1.37, 1.75, 1.97, | 1.73, 2.02 \dots \quad (84)$$

Um die Oszillation zu mindern, bilden wir auch

$$\rho_n = (a_n/a_{n-2})^{1/2}$$

$$\Delta_q = \dots, 2.04, | 2.00, 1.97, \dots \quad (85)$$

Diese Reihe ist natürlich immer noch zu kurz, um Δ_q genau zu bestimmen, aber der vorgeschlagene Wert $\Delta_q = 1.75$ /143/ scheint mit den zwei neuen Termen unwahrscheinlicher geworden zu sein. Das Skalenargument /143/

$$\Delta_q = -\nu(\eta - 2 - z + d) \quad (86)$$

ergibt für den zweidimensionalen Ising Ferromagneten $\Delta_q = z - 1/4$. $\Delta_q = 1.75$ würde dann $z \approx 2.00$ implizieren, wie aus einer früheren Hochtemperaturentwicklung auch gefolgert wurde /143,144/, in Übereinstimmung mit der Hypothese /164/ $z_{\text{exakt}} = 2 + (\text{logarithmische Korrekturen})$. Eine spätere Hochtemperaturentwicklung ergab $z = 2.125$ /145/, in Übereinstimmung mit dem bisher besten Monte Carlo Renormierungswert $z = 2.14 \pm 0.02$ /165/. Die letzteren Werte würden $\Delta_q = 1.88 - 1.89$ implizieren; ein Wert, der eher mit (84,85) verträglich ist als $\Delta_q = 1.75$.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

3.3. Symmetrischer Fall

Bei der Konzentration $p = 1/2$ werden nach der Konfigurationsmittelung nur Diagramme behalten, deren Bindungen alle gerade (2-, 4-, ..., -fach) besetzt sind. Wie in Abschnitt "Technische Aspekte" (IV.4.) erklärt wird, ist für diesen Fall die Entwicklung bis zu derselben Anzahl der nicht-trivialen Terme viel aufwendiger, da die Reihe gerade ist:

$$\tau(v) = \sum_{N=0}^M a_N v^{2N} . \quad (87)$$

N	$\tau_q(v^{2N})$	$\tau_{EA}(v^{2N})$
1	8	16
2	32	124
3	$\frac{376}{3}$	$\frac{2128}{3}$
4	$\frac{3392}{9}$	$\frac{30452}{9}$
5	$\frac{91976}{81}$	$\frac{1079888}{81}$
6	$\frac{3595936}{1215}$	$\frac{59777356}{1215}$
7	$\frac{131126104}{19683}$	$\frac{73606232656}{492075}$

Tabelle IV.9.

Koeffizienten der Relaxationszeiten τ_q und τ_{EA} in dem symmetrischen Fall ($p = 1/2$).

Bisher haben wir 7 Terme berechnen können. Die Koeffizien-

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

ten für τ_q und τ_{EA} sind in **Tabelle IV.9.** zu finden. Sie exakt (als Bruch) zu bekommen, stellt eine der Schwierigkeiten bei $p = 1/2$ dar. 7 nicht-triviale Terme erlauben, vor allem in einem ungeordneten System, nur eine qualitative Analyse und einen qualitativen Vergleich mit dem unsymmetrischen Fall.

Die neue Entwicklungsvariable $w(T) = v^2(T)$ verhält sich wie

$$w(T) \rightarrow 1/T^2 \quad (T \rightarrow \infty) . \quad (88)$$

Deshalb müssen alle Variablentransformationen, die angewendet werden sollen, für $T \rightarrow \infty$ in $(1/T^2)$ zu entwickeln sein. Bei tiefen Temperaturen gilt

$$w(T) \approx 1 - 4e^{-2K} . \quad (89)$$

Wenn die Energiebarrieren endlich bleiben, dann ist $w(T)$ die geeignete Variable für die "ratio plots". Sie werden in **Abb. IV.6.** gezeigt, wobei die Oszillationen durch die Auftragung von $\varrho_n = (a_n/a_{n-2})^{1/2}$ gemindert wurden.

Das Verhalten ist zwar nicht sehr regulär (vor allem in τ_q immer noch eine Oszillation erkennbar), aber auf jeden Fall konsistent mit einer algebraischen Singularität in $w(T)$, also mit endlichen Energiebarrieren.

Die Abschätzung für diese ist sehr groß, man kann aber aus dem Verlauf der "ratio" Punkte vermuten, daß sie, aus mehr Termen bestimmt, niedriger wird. Die jetzigen Werte sind $\Delta E_q/J \approx 22$ und $\Delta E_{EA}/J \approx 35$ aus τ_q bzw. τ_{EA} bestimmt. Die beiden Werte sind also innerhalb dieser Genauigkeit nicht gleich. Uns ist kein Argument über Molekularfeld-Theorie /51,166/ hinausgehend bekannt, das die Singularitäten der beiden dynamischen Größen verbinden würde.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

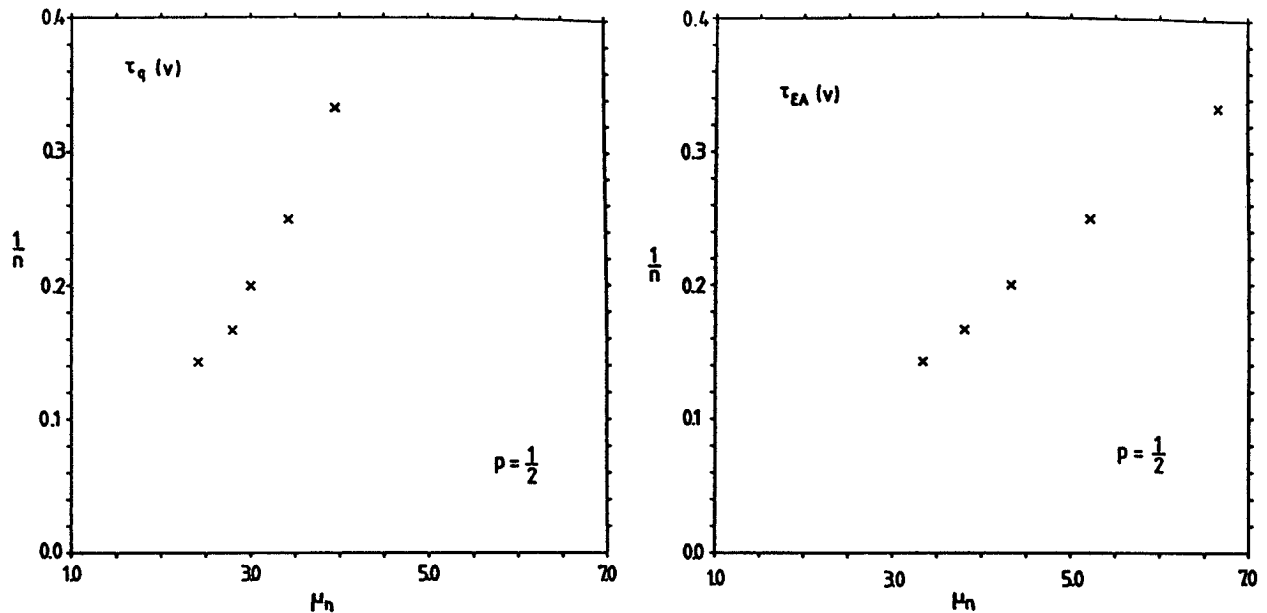


Abb. IV.6.

"Ratio plots" für die Relaxationszeiten τ_q und τ_{EA} in dem symmetrischen Fall ($p = 1/2$). Die Entwicklungsvariable ist $w(T) = \tanh^2(K)$.

In Analogie zu dem unsymmetrischen Fall haben wir auch die Transformationen $w_M(T) = v_M^2(T)$ (s. (72)) betrachtet. Die entsprechenden "ratio plots" sind inkonsistent mit einer algebraischen Singularität in $w_{M>1}(T)$ (d.h. divergierenden Energiebarrieren).

Im nächsten Schritt wird die Padé Analyse durchgeführt. Die Variable $x(T)$ aus (73) ist bei hohen Temperaturen in $(1/T^2)$ nicht zu entwickeln, wir definieren daher eine geeignete Variable

$$y(T) = 1/(1 + (T/J)^2) \quad . \quad (90)$$

Um ρz zu bestimmen, würde man, ähnlich wie in (79), Padé Approximanten zu der Funktion

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$G(y) = \frac{d}{dy} \ln \ln \tau(y) \xrightarrow{(y \rightarrow y^*)} \frac{-\mu \pm 12}{(y^* - y)} \quad (91)$$

bilden. (Dabei steht τ für τ_q oder τ_{EA} .) $G(y)$ enthält aber nur 5 nicht-triviale Terme nach Anwendung des doppelten Logarithmus; so wenig, daß eine vernünftige Analyse unmöglich wird. Das Analogon von (81) hat einen Term mehr, was die Berechnung von zwei diagonalen Elementen in der Padé Tabelle ermöglicht. Weil

$$(y^* - y) \rightarrow T^2, \quad (T \rightarrow 0) \quad (92)$$

und die Annahme in (81) $\ln \tau \sim \Delta E/T$ ist, bilden wir die Approximation zu der Funktion

$$F(y) = (\ln \tau(y))^2 \rightarrow \frac{(\Delta E)^2}{(y^* - y)} \quad (y \rightarrow y^*). \quad (93)$$

Mit der Euler-Transformation (80) ergibt sich für τ_{EA} die folgende Padé Tabelle ($y^*(T=0) = 0.1$)

	M = 2	M = 3	M = 4
L = 2	0.114 36.41	0.102 23.07	0.101 22.30
L = 3	0.102 23.13	0.101 22.19	
L = 4	0.101 22.33		

Die oberen Angaben beziehen sich wieder auf den kritischen Punkt, die unteren auf $\Delta E/J$, das aus dem Residuum berechnet wurde.

Eine wie b/T divergierende Energiebarriere wäre aus der Padé Tabelle zu der Funktion

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$H(y) = \ln \tau(y) \rightarrow \frac{b}{(y^* - y)}, (y \rightarrow y^*) \quad (94)$$

zu bestimmen. Diese Tabelle zeigt keine Konvergenz zu einem kritischen Punkt in dem physikalischen Temperaturbereich ($T \geq 0$).

Die "Ratio method" und Padé Analyse liefern also übereinstimmende Aussagen über die Art der Singularität der Relaxationszeiten: wie auch in dem unsymmetrischen Fall folgt die Spinglas-Relaxationszeit τ_{EA} einem Arrhenius-Gesetz

$$\tau_{EA} \sim e^{\Delta E/T}$$

mit endlicher Energiebarriere. Die letztere kann wegen der niedrigen Anzahl der berechneten Terme nicht genau bestimmt werden. τ_q zeigt ein ähnliches Verhalten, möglicherweise mit verschiedenem ΔE .

4. Technische Aspekte

In diesem Abschnitt werden Einzelheiten über die Technik und den Aufwand der Methode gegeben, sowie Zwischenergebnisse für Vergleichszwecke.

4.1. Die Methode

Die Technik der Hochtemperaturentwicklung mit Anwendungen vor allem für Ising-Modelle ist in der Literatur gut dokumentiert /167-172/. Die erfolgreichste Variante ist die Kumulanten-Entwicklung, in der Information nur über zusam-

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

menhängende ("connected") Graphen verlangt wird.

Wenn die thermodynamische Funktion F auf dem Gitter G berechnet werden soll, muß man zum einen die Gitterkonstante $n(g_i, F)$ für (im Prinzip) jeden Graph g_i kennen. Sie ist die Anzahl der möglichen Einbettungen von g_i in G . Zum anderen braucht man den Kumulanten-Gewichtsfaktor $W(g_i, F)$. Dann ist die Funktion durch

$$F(G) = \sum_{g_i} n(g_i, G) W(g_i, F) \quad (95)$$

gegeben. Die Leistungsfähigkeit dieser Methode liegt darin, daß n unabhängig von F und W unabhängig von G ist. Für homogene, kurzreichweitige Modelle tritt eine weitere Vereinfachung auf: die Gitterkonstanten $n(g_i, G)$ hängen nur von den topologischen Eigenschaften des Graphen g_i ab, nicht aber von dessen Geometrie.

Nun enthält $W(g_i, F)$ alle Information über die Bindungen in g_i . Hat g_i m Bindungen, so ist der führende Term in W von Ordnung z^m , wobei die Entwicklungsvariable z eine Funktion der Wechselwirkungsstärke ist. Die Dimension des Gitters ändert nur $n(g_i, G)$. Man kann daher den Satz von n für alle Graphen bis zu einer bestimmten Ordnung (= Anzahl der Bindungen im Graph) für alle Dimensionen einmal berechnen (ein kombinatorisches Problem) und tabellieren /172/. Dann braucht man nur $W(g_i, F)$ für die gewünschte Funktion und die möglichen Topologien (nicht: Graphen) zu berechnen.

Die Eigenschaften der Gewichtsfunktionen ermöglichen oft weitere Vereinfachungen. So haben z.B. in der Entwicklung der Zustandssumme nur solche Graphen nicht-verschwindendes Gewicht, die nur gerade besetzte Vertizes und keine Artikulationspunkte enthalten (ein Artikulationspunkt ist ein Vertex, ohne den der Graph nicht zusammenhängend wäre). Das sind die sogenannten Stern-Graphen. Die Abzählung und Klassifizierung von Stern-Graphen ist gut ausgearbeitet /171/.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Allgemeiner: Zu dem thermischen Erwartungswert von $0,2,4,6\dots$ -Spin-Korrelationen tragen nur Graphen mit $0,2,4,6\dots$ ungeraden Vertizes bei. Sie können aus den Stern-Graphen durch $0,1,2,3\dots$ maliges Durchschneiden von Bindungen (auf jede mögliche Weise) erstellt werden.

Dies bedeutet eine enorme Reduzierung des rechnerischen Aufwandes. Bis Ordnung 10 gibt es nur 6 Topologien für die 0-Spin Korrelationsfunktionen (Zustandssumme) und 29 irreduzible Diagramme für die 2-Spin Korrelationen (Suszeptibilität). Allerdings wächst die Anzahl der Topologien sehr schnell an, wenn 6,8-Spin Korrelationen berechnet werden sollen. Das Schneiden von Stern-Graphen ist nur wenig zu automatisieren, es muß daher meistens per Hand gemacht werden. Das viermalige Schneiden (8-Spin Korrelationen) erfordert die Untersuchung von so vielen Stern-(Mutter-)Graphen, daß es praktisch nicht durchzuführen ist, von den zahlreichen Fehlerquellen ganz zu schweigen. Dies ist einer der Gründe, warum wir nicht diese Methode verwendet haben. Wie in Abschnitt IV.2. erklärt wurde, verlangt die Dynamik die Berechnung von u.U. sogar 8-Spin Korrelationen.

Das zweite Problem stellt die Unordnung dar. In dem symmetrischen Fall tragen z.B. nur Graphen mit gerade belegten Bindungen bei. In der statischen Suszeptibilität bedeutet dies nur eine kleine Schwierigkeit: die Gewichtsfunktionen müssen zwar bis zur doppelten Ordnung entwickelt werden, es müssen aber nur die Terme beibehalten werden, die ausschließlich doppelte Bindungen enthalten. Solche Taylor-Entwicklungen von Funktionen können mit Hilfe eines Computer-Algebra Programms (Maxima, Reduce, etc.) relativ leicht durchgeführt werden. Für eine vorgegebene Anzahl der nicht-trivialen Terme tragen dieselben Graphen g_i wie im homogenen Fall bei, nur die Bindungen müssen doppelt Belegt werden.

In der dynamischen Entwicklung erhalten die Graphen dagegen

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

zweierlei Beiträge: zum einen vom Liouville-Operator (Dynamik), zum anderen von der Entwicklung der statischen Multi-Spin Korrelationen (die vom Liouville-Operator erzeugt werden, s. Abschnitt IV.2.). Alle Bindungen zusammen bilden ein Diagramm, das gemittelt wird. Man kann daher die Gewichtsfunktion nicht getrennt mitteln. Man muß ferner diese Diagramme explizit herstellen, um die Bindungskonfiguration mitteln zu können. Das muß auf jedem Gitter (in jeder Dimension) durchgeführt werden.

Es gibt keine kanonische Wahl für die Übergangswahrscheinlichkeit $w_j(s_j)$ in der Definition der Dynamik. Auch die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts und die, daß $w_j(s_j)$ nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn enthält, lassen noch unendlich viele mögliche Formen für $w_j(s_j)$ zu. Weil sie alle in das thermodynamische Gleichgewicht führen, ist das Resultat der Berechnung einer statischen Korrelationsfunktion durch Iteration der Gleichung des detaillierten Gleichgewichts unabhängig von der Form der Übergangswahrscheinlichkeit. Es ist noch ein ausstehendes Problem, wie die berechneten dynamischen Größen von der Wahl von $w_j(s_j)$ abhängen. Die Reihen liegen in Potenzen von c_1 und c_3 vor, und nur deren funktionale Form bezüglich der Temperatur hängt von der Übergangswahrscheinlichkeit ab. Die Entwicklung muß daher nicht für jedes $w_j(s_j)$ wiederholt werden.

4.2. Implementierung der Methode

Der erste Schritt ist die Erzeugung der dynamischen Cluster. Wie L_0 , L_1 und L_3 auf ein Cluster wirken, ist in (31) definiert worden. Man beachte, daß die totale Magnetisierung in dem inhomogenen System keine Eigenfunktion mehr von L_1 ist. Die konfigurationsgemittelte Größe, z.B.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$$\tau_{FM} = (1/N) \sum_{ij} [\langle s_i s_j \rangle] \quad (96)$$

ist natürlich translations-invariant

$$\tau_{FM} = (1/N) \sum_i \langle s_i s_0 \rangle \quad (97)$$

daher reicht es aus, L^{-1} auf einen Spin wirken zu lassen. Aus $L^{-1}s_0$ entstehen Cluster mit $2k+1$ ($K = 0,1,2,\dots$) Spins. Diese Cluster wurden durch zumindest k -malige Anwendung von L_3 ($\sim O(T^{-3})$) erzeugt, sind daher von Mindestordnung $3k$. Aus $(2k+1)$ Spins in $L^{-1}s_0$ werden in (97) durch Multiplikation mit s_i $(2k+1) \pm 1$ Spins erzeugt; es müssen also $2k$ ($K = 0,1,\dots$) Spin Korrelationen berechnet werden. Die sind (wie man sich aus der Kumulanten-Entwicklung überlegen kann) von Mindestordnung k . Ein dynamischer Cluster mit $(2k+1)$ Spins erzeugt also Terme mit führender Ordnung $4k$. Das bedeutet, daß bis zur Gesamtordnung N nur die $(2k+1)$ -Spin Cluster erzeugt werden müssen, deren Ordnung nicht größer als $(N-4k)$ ist. In dem unsymmetrischen Fall bis $N = 10$ werden also 1,3,5-Spin dynamische Cluster auftreten, die die Berechnung von statischen 0,2,4,6-Spin Korrelationen verlangen.

In dem symmetrischen Fall ist man gezwungen, die Dynamik fast bis zur Ordnung $N' = 2N$ zu treiben, weil in diesem Schritt nur wenige Cluster aussortiert werden können, die solche Multi-Spin Korrelationen erzeugen, daß das Diagramm (dynamische und statische Bindungen) die Mittelung wegen einfach besetzter Bonds nicht überlebt. In bestimmten Fällen ist es möglich, dies schon in der Dynamik zu erkennen. Ein 1-Spin Cluster von Ordnung 9 mit 7 einfachen Bindungen liefert z.B. einen führenden Term aus 0-Spin Korrelationen von Ordnung 9 in dem unsymmetrischen Fall und von Ordnung 16 in dem symmetrischen. Erst bei der Berechnung der statischen Korrelationen wird es möglich, viele Diagramme, die weggemittelt werden, auszusortieren. In diesem Sinn erfordert eine Entwicklung bis Ordnung $2N$ ($= N$ nicht-triviale

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Terme) in dem symmetrischen Fall weniger Aufwand als eine Entwicklung bis Ordnung $2N$ in dem symmetrischen. So sind z.B. 10 Terme bei $p \neq 1/2$ und 7 Terme bei $p = 1/2$ etwa gleich aufwendig. Bei $p = 1/2$ müssen Cluster bis 7, Korrelationen bis 8 Spins berechnet werden, um 7 nicht-triviale Terme zu erhalten.

Die Methode, die statische Korrelationen durch Iteration der Gleichung des detaillierten Gleichgewichtes (s. Gl. (24, 37)) zu berechnen hat Vor- und Nachteile. Nachteil ist, daß durch (37) viel mehr Diagramme entstehen als in der Kumulanten-Entwicklung. Dazu ein Beispiel: Um die Korrelationsfunktion zweier benachbarter Spins bis zu $O(v^3)$ zu berechnen, braucht die Kumulanten-Entwicklung 3 Diagramme, die alle von derselben Topologie sind

$$\langle \bullet \bullet \rangle = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots = v + 2v^3 + O(v^5).$$

Durch (37) entstehen dagegen 6 Diagramme

$$\begin{aligned} \langle \bullet \bullet \rangle &= \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \\ &= c_1 + 5c_1^2 + \dots = v - 3v^3 + 5v^3 + \dots = v + 2v^3 + O(v^5). \end{aligned}$$

Von Vorteil ist auch für die statische Entwicklung, daß bei höheren Multi-Spin Korrelationen nicht immer neue Topologien berücksichtigt werden müssen. Wenn genügend Speicherplatz und Rechenzeit gegeben ist, kann das Verfahren bis zu beliebiger Ordnung voll automatisiert werden.

In Verbindung mit Dynamik ist es von weiterem Vorteil, daß die dynamischen Cluster und die statischen Graphen mit demselben Grundprogramm erstellt werden können. Dabei werden die Cluster, die Graphen und die Diagramme einheitlich dargestellt und klassifiziert, was die Konfigurationsmittelung erheblich erleichtert.

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

Von uns wurde dieser Algorithmus in FORTRAN implementiert. Dadurch hat man auf eine elegante, kompakte, rekursive Definition von (37) verzichtet, aber viel an Ausführungszeit gewonnen. Ein Arbeitsspeicher von mehreren Mbyte ist von Vorteil, aber nicht unbedingt nötig; ein Massenspeicher von über 100 Mbyte ist jedoch erforderlich. Je nach Zugriff auf den externen Speicher können die in dieser Arbeit angegebenen Daten in etwa 30-50 Stunden Rechenzeit auf einem IBM 3081 Computer erstellt werden.

Wir haben für die Cluster (Graphen, Diagramme) eine kanonische Darstellung definiert und mit deren Hilfe eine Klassifizierung eingeführt, um Speicherplatz zu sparen und Vergleiche von Cluster, Spins und Bindungen zu beschleunigen.

Um die Koeffizienten der Relaxationszeiten in dem symmetrischen Fall exakt als Brüche zu erhalten, benötigt man eine Darstellung der ganzen Zahlen mit mehr als 13 Dezimalstellen, die nicht auf jedem Rechner verfügbar ist. Das ganze Programm umfaßt etwa 10^3 Zeilen.

4.3. Testmöglichkeiten

Es ist wichtig, die Implementierung des Algorithmus in allen bekannten Spezialfällen zu testen. Weil Dynamik und Statik durch dieselbe Methode (Anwendung von L_1 , L_3 auf Spincluster) berechnet werden, sind Fehler schneller aufzufinden, und Vergleiche für die statischen Größen allein können in einem modular aufgebauten Programm fast alle Fehler der Dynamik finden. Für die statischen Suszeptibilitäten wiederum gibt es mehr Vergleichsmöglichkeiten.

Bei $p = 1$ (Ferromagnet) war τ_q bisher bis $O(w^3)$, ($w = v^2 = \tanh^2(K)$) bekannt. τ_{FM} und χ_{FM} sind über $O(v^{10})$ bekannt [143.169/]. Für die Spinglasgrößen gibt es

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

auch eine Testmöglichkeit, weil für $p = 1$ gilt $\chi_{EA} = \chi_{FM}^2$ und $\tau_{EA} = \tau_{FM} \chi_{FM}$.

Bei $p \neq 1$ sind die statischen Größen χ_{FM} und χ_{EA} bis $O(v^8)$ bzw. $O(v^6)$ berechnet worden /62/, wobei die Tabelle von /62/ für χ_{EA} in $O(v^5)$ einen Fehler enthält: der Koeffizient $a_{5,5} = 1800$, nicht 900 wie aus der Angabe in /62/ folgt.

Bei $p = 1/2$ muß $\tau_q = \tau_{FM}$, $\chi_{FM} = 0$ gelten. χ_{EA} ist in allen Dimensionen bis $O(w^{10})$ bekannt. Außerdem sind Beiträge von Diagrammen mit nur einfachen Bindungen relativ wenig aufwendig per Hand nachzurechnen.

4.4. Variablentransformationen

Einen wesentlichen Teil der Analyse bilden die Variablentransformationen. Weil sie Taylor-Entwicklungen von u.U. komplizierten Funktionen bis über 10 Terme erfordern, stellen sie, von dem Aufwand sie zu berechnen abgesehen, eine Fehlerquelle dar. Wir haben einen semi-numerischen Algorithmus hierfür verwendet, der es erlaubt, Funktionen von Funktionen einer Variablen schnell und bis zu sehr hohen Ordnungen exakt zu berechnen. Dazu wird nur die Kenntnis von Taylor-Reihen für elementare Funktionen benötigt /173/.

Eine Transformation, die sehr oft vorkommt, ist $v = v(x)$, wobei x und v in (72,73) definiert wurden. Zu Vergleichszwecken geben wir hier die ersten 10 Terme der Taylor-Entwicklung an.

$$v = x + x^2 + \frac{2}{3} x^3 - \frac{13}{15} x^5 - \frac{5}{3} x^6 - \frac{647}{315} x^7 \\ - \frac{77}{45} x^8 - \frac{1387}{2835} x^9 + \frac{461}{315} x^{10} + O(x^{11})$$

Es sei auch die Entwicklung von c_1 und c_3 (die in (38)

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

nur angedeutet wurde) bis zu $O(v^{16})$ angegeben.

$$c_1 = v - 3v^3 + 15v^5 - 85v^7 + 493v^9 - 2871v^{11} + 16731v^{13} - 97513v^{15} + O(v^{17})$$

$$c_3 = \sum_k (a_k - 1)v^{2k+1}, \text{ wobei } a_k \text{ die Koeffizienten in } c_1 = \sum_k a_k v^{2k+1} \text{ sind.}$$

Zu den Euler-Transformationen, die wir für (fast) jede Padé-Tabelle angewendet haben erscheint eine Bemerkung angebracht. Ziel dieser Transformation ist es, die physikalische Singularität in der untersuchten thermodynamischen Funktion am nächsten zum Ursprung zu transformieren, damit sie die Reihe dominiert. Die diagonalen Padé Approximanten zu einer Funktion sind zwar invariant unter diesen Transformationen, die Approximanten werden aber in der Regel zu der logarithmischen Ableitung der Funktion gebildet. Logarithmische Ableitung und Euler-Transformation vertauschen wiederum nicht. Es ist also durchaus sinnvoll, Euler-Transformationen zum Beschleunigen der Konvergenz anzuwenden.

Daß die in (80a) definierten Transformationen **XL** und **LX** tatsächlich eine unterschiedliche Aufsummation der Reihe bedeuten, soll hier am Beispiel der ferromagnetischen Relaxationszeit gezeigt werden. Dabei behalten wir am Ende nur den singulären Teil.

$$\tau(v) = 1 + 8v + 44v^2 + 200v^3 + \dots$$

$$\tau(x) = 1 + 8x + 52x^2 + 880/3 x^3 + \dots$$

$$\begin{aligned} \ln \tau(v) &= 8v (1 + 3/2 v + 7/3 v^2 + \dots) \\ &= 1 + 3/2 v + 7/3 v^2 + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln \tau(x) &= 8x (1 + 5/2 x + 6x^2 + \dots) \\ &= 1 + 5/2 x + 6x^2 + \dots \end{aligned}$$

$$\ln \tau(v=x) \neq \ln \tau(x) .$$

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

5. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Dynamik des zweidimensionalen Ising Modells mit Zufallskopplungen untersucht. Im Rahmen einer systematischen Hochtemperaturentwicklung wurde die charakteristische Relaxationszeit des Edwards-Anderson Ordnungsparameters, sowie die ferromagnetische und die Edwards-Anderson Relaxationszeit berechnet.

Um die von der Dynamik erzeugten statischen Multi-Spin Korrelationen zu berechnen, wurde statt der herkömmlichen Kumulanten-Entwicklung die Gleichung des detaillierten Gleichgewichtes iteriert. Die dadurch entstandenen Diagramme wurden im letzten Schritt der Berechnung der Konfigurationsmitteilung unterzogen.

Die Reihen wurden sowohl mit der "ratio" Methode, als auch mit Hilfe von Padé Approximanten systematisch analysiert, unter besonderer Berücksichtigung der geeigneten Entwicklungsvariablen.

Der ferromagnetische Phasenübergang wird bei einer kritischen Konzentration der ferromagnetischen Kopplungen $p_c = 0.85 \pm 0.03$ zerstört. In dem ferromagnetischen Bereich ($1 \gg p \gg p_c$) sinkt die kritische Temperatur stetig mit sinkender Konzentration. Ein relativ genaues Phasendiagramm kann konstruiert werden. Die kritischen Exponenten zeigen eine effektive Konzentrationsabhängigkeit, die auf das asymptotische Verhalten noch nicht schließen läßt.

Im Konzentrationsbereich $p_c > p \gg 1/2$ existiert ein Spinglasübergang bei $T = 0$. Die angewandten systematischen Variablentransformationen zeigen, daß die Spinglas-Relaxationszeit eine wesentliche Singularität besitzt:

IV. Dynamische Hochtemperaturentwicklung

$\tau_{EA} \sim \exp(\Delta E/T)$, mit nicht-divergierenden Energiebarrieren, $\Delta E/J = 16 \pm 2$. Die Daten sind konsistent mit einer algebraischen Singularität in der statischen Edwards-Anderson Suszeptibilität, $\chi_{EA} \sim T^{-\gamma}$.

Bei $p = 1/2$ stehen nur 7 nicht-triviale Terme zur Verfügung. Die Analyse zeigt ein qualitativ ähnliches Verhalten wie für $p_c > p > 1/2$. Die Relaxationszeit des Edwards-Anderson Ordnungsparameters τ_q und die Spinglas-Relaxationszeit ergeben möglicherweise unterschiedlich hohe Energiebarrieren.

Die starke Singularität in der Spinglas-Relaxationszeit hat ermöglicht, das kritische Verhalten bei $T = 0$ aus 10 nicht-trivialen Termen der Potenzreihe hinreichend verlässlich zu bestimmen.

LITERATURVERZEICHNIS

1. R. Brout,
Phys. Rev. **115**, 824 (1959).
2. Shang-Keng Ma,
Modern Theory of Critical Phenomena,
Benjamin, Reading, 1976, S. 361.
3. A.B. Harris,
J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
4. M.E. Fisher,
Phys. Rev. **176**, 257 (1968).
5. J.A. Mydosh,
in Lecture Notes in Physics **149**,
Springer, Berlin, 1981.
6. V. Canella und J.A. Mydosh,
Phys. Rev. B **6**, 4220 (1972).
7. C.N. Guy,
J. Phys. F **5**, L242 (1975),
J. Phys. F **7**, 1507 (1977).
8. A. Arrott,
J. Appl. Phys. **36**, 1093 (1965).
9. H. Maletta und W. Felsch,
Phys. Rev. B **20**, 1245 (1979).
10. J.L. Tholence und R.J. Tournier,
J. Physique **35**, c4:229 (1974).
11. J.L. Tholence und R.J. Tournier,
Physica **86-88B**, 880 (1977).
12. C.E. Violet und R.J. Borg,
Phys. Rev. **149**, 540 (1966).
13. B. Window,
Phys. Rev. B **6**, 2013 (1972).
14. K. Nagorny und F.P. Schimansky,
Z. Phys. Chem. **124**, 55 (1981).
15. D.E. Murnick, A.T. Fiony und W.J. Kossler,
Phys. Rev. Lett. **36**, 100 (1976).
16. S.P. McAlister und C.M. Hund,
Solid State Comm. **19**, 881 (1976).

Literaturverzeichnis

17. L.E. Wenger und P.H. Keesom,
Phys. Rev. B **11**, 3497 (1975),
Phys. Rev. B **13**, 4053 (1976).
18. D.L. Martin,
Phys. Rev. B **20**, 368 (1979),
Phys. Rev. B **21**, 1906 (1980).
19. P.W. Anderson, B.I. Halperin und C.M. Varma,
Phil. Mag. **25**, 1 (1972).
20. M.W. Klein und R. Brout,
Phys. Rev. **132**, 2412 (1963).
21. M.W. Klein,
Phys. Rev. **173**, 552 (1968).
22. K. Binder und K. Schröder,
Solid State Comm. **18**, 1361 (1976),
Phys. Rev. B **14**, 2142 (1976).
23. G. Toulouse,
Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
24. J. Stephenson,
J. Math. Phys. **11**, 420 (1970).
25. W.F. Wolff und J. Zittartz,
in Heidelberg Colloquium on Spin Glasses,
Lecture Notes in Physics, Vol. **192**,
ed. by J.L. van Hemmen and I. Morgenstern,
Springer, Berlin, 1983, S. 252.
26. J. Villain,
J. Phys. C **10**, 1717 (1977).
27. B. Derrida, Y. Pomeau, G. Toulouse and J. Vannimenus,
J. Physique **41**, 213 (1980).
28. D.C. Mattis,
Phys. Lett. **56A**, 421 (1976).
29. A.P. Murani,
Phys. Rev. Lett. **37**, 450 (1976).
30. A.P. Murani und B.R. Coles,
J. Phys. C: Metal. Phys. Suppl. **2**, 5159 (1970).
31. C. Violet und R. Borg,
Phys. Rev. **162**, 608 (1967).
32. G.J. Nieuwenhuys und J.A. Mydosh,
Physica **86-88B**, 880 (1977).

Literaturverzeichnis

33. J.L. Tholence,
Solid State Comm. 35, 113 (1980).
34. C.A.M. Mulder, A.J. Duynveldt und J.A. Mydosh,
Phys. Rev. B 23, 1384 (1981),
Phys. Rev. B 25, 515 (1982).
35. L. Néel,
Ann. Geophys. 5, 99 (1949).
36. S.F. Edwards und P.W. Anderson,
J. Phys. F 5, 965 (1975).
37. J.R. de Almeida und D.J. Thouless,
J. Phys. A 11, 983 (1978).
38. E. Pytte und J. Rudnick,
Phys. Rev. B 19, 3603 (1979).
39. D. Sherrington und S. Kirkpatrick,
Phys. Rev. Lett. 35, 1792 (1975).
40. S. Kirkpatrick und D. Sherrington,
Phys. Rev. B 17, 4384 (1978).
41. G. Parisi,
J. Phys. A 13, L115 (1970).
42. D.J. Thouless, P.W. Anderson und R.G. Palmer,
Phil. Mag. 35, 593 (1977).
43. A.J. Bray und M.A. Moore,
J. Phys. C 13, 469 (1980).
44. C. DeDominicis, M. Gabay, T. Garel and H.Orland,
J. Physique 41, 923 (1980).
45. H. Sompolinsky,
Phys. Rev. Lett. 47, 935 (1981).
46. H. Sompolinsky und A. Zippelius,
Phys. Rev. Lett. 47, 359 (1981),
Phys. Rev. B 25, 6860 (1982).
47. K. Binder,
in Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter
Systems, ed. by T. Riste,
Plenum Press, 1979, S. 423.

in Fundamental Problems in Statistical Mechanics V.,
ed. by E.D.G. Cohen,
North-Holland, Amsterdam, 1980, S. 21.

Literaturverzeichnis

48. K. Binder und W. Kinzel,
Lecture Notes in Physics **149**,
Springer, Berlin, 1981.
49. K. Binder und W. Kinzel,
in Heidelberg Colloquium on Spin Glasses,
Lecture Notes in Physics **192**,
ed. by J.L. van Hemmen and I. Morgenstern,
Springer, Berlin, 1983, S. 279.
50. I. Kondor und C. DeDominicis,
J. Phys. A **16**, 73 (1983).
51. H. Sompolinsky und A. Zippelius,
Phys. Rev. Lett. **50**, 1297 (1983).
52. A.B. Harris, T.C. Lubensky und J.H. Chen,
Phys. Rev. Lett. **36**, 415 (1976).
53. A.J. Bray und M.A. Moore,
J. Phys. C **13**, 419 (1980).
54. M. Wortis, C. Jayaprakas und E. Riedel,
J. Appl. Phys. **49**, 1335 (1978).
55. W. Kinzel und K.H. Fischer,
J. Phys. C **11**, 2115 (1978).
56. D. Stauffer und K. Binder,
Z. Phys. B **34**, 97 (1979).
57. P.W. Anderson und C.M. Pond,
Phys. Rev. Lett. **40**, 903 (1978).
58. P. Reed, M.A. Moore und A.J. Bray,
J. Phys. C **11**, L139 (1978).
59. A.J. Bray und M.A. Moore,
J. Phys. C **12**, 79 (1979).
60. R. Fisch und A.B. Harris,
Phys. Rev. Lett. **38**, 785 (1977),
Phys. Rev. Lett. **47**, 620 (1981).
61. R.V. Ditzian und L.P. Kadanoff,
Phys. Rev. B **19**, 4631 (1979).
62. V.T. Rajan und P.S. Riseborough,
Phys. Rev. B **27**, 532 (1983).
63. R.G. Palmer und F.T. Bantilan Jr.,
wird veröffentlicht.

Literaturverzeichnis

- 64. I. Morgenstern und K. Binder,
Phys. Rev. Lett. **43**, 1615 (1979),
Phys. Rev. B **22**, 288 (1980),
Z. Phys. B **39**, 227 (1980),
J. Appl. Phys. **52**, 1692 (1981).
- 65. W.L. McMillan,
Phys. Rev. B **28**, 5216 (1983),
J. Phys. C **17**, 3189 (1984).
- 66. W.L. McMillan,
J. Phys. C **17**, 3179 (1984).
- 67. A.P. Young,
Phys. Rev. Lett. **50**, 917 (1983),
J. Phys. C **18**, L517 (1984).
- 68. A.J. Bray und M.A. Moore,
J. Phys. C **17**, L463 (1984).
- 69. A.J. Bray und M.A. Moore,
wird veröffentlicht.
- 70. W.L. McMillan,
wird veröffentlicht.
- 71. R.N. Bhatt und A.P. Young,
wird veröffentlicht.
- 72. M.V. Feigel'man und L.B. Ioffe,
J. Physique Lett. **45**, L475 (1984).
- 73. A.T. Ogielski und I. Morgenstern,
wird veröffentlicht.
- 74. Physics in One Dimension,
ed. by Y. Bernasconi and T. Schneider,
Springer Verlag, Berlin, 1981.
- 75. R.J. Glauber,
J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- 76. B.U. Felderhof,
Rep. Math. Phys. **1**, 215 (1971).
- 77. H.W. Huang,
Phys. Rev. A **8**, 2553 (1973),
Phys. Lett. **48A**, 395 (1974).
- 78. A. Baumgärtner und K. Binder,
J. Stat. Phys. **18**, 423 (1978).
- 79. M.Suzuki und R.Kubo,
J. Phys. Soc. Japan **24**, 51 (1968).

Literaturverzeichnis

80. R. Abe,
Progr. Theor. Phys. **39**, 947 (1968).
81. N. Matsudaira,
Canad. J. Phys. **45**, 2091 (1966),
J. Phys. Soc. Japan **23**, 232 (1967).
82. A.K. Rajagopal und G.S. Grest,
J. Math. Phys. **15**, 583 (1973).
83. G.S. Grest und A.K. Rajagopal,
J. Math. Phys. **15**, 589 (1973).
84. R.B. Griffiths,
Phys. Rev. Lett. **23**, 17 (1969).
85. G. Grinstein, A.N. Berker, J. Chalupa und M. Wortis,
Phys. Rev. Lett. **36**, 1508 (1976).
86. J.F. Fernandez,
Phys. Rev. B **16**, 5125 (1977).
87. M. Puma und J.F. Fernandez,
Phys. Rev. B **18**, 1391 (1978).
88. B. Derrida, J. Vannimenus und Y. Pomeau,
J. Phys. C **11**, 4095 (1978).
89. J.K. Williams,
J. Phys. C **14**, 4095 (1981).
90. B.G.S. Doman and K. Williams,
J. Phys. C **15**, 1693 (1982).
91. T. Li,
Phys. Rev. B **24**, 6579 (1981).
92. H. Falk,
Physica **104A**, 475 (1980),
Physica **117A**, 561 (1983).
93. J.F. Fernandez and R. Medina,
Phys. Rev. B **19**, 3561 (1979).
94. D. Dhar und M. Barma,
J. Stat. Phys. **22**, 259 (1980).
95. D. Kumar und J. Stein,
J. Phys. C **13**, 3011 (1980).
96. H.G.E. Hentschel,
Z. Phys. B **37**, 243 (1980),
Z. Phys. B **37**, 351 (1980).

Literaturverzeichnis

97. J.V. Jose, M.J. Mehl und J.B. Sokoloff,
Phys. Rev. B **25**, 2026 (1982),
Phys. Rev. B **27**, 334 (1983).
98. H.-H. Chen und S.-K. Ma,
J. Stat. Phys. **29**, 717 (1982).
99. C.K. Harris,
J. Phys. A **17**, 673 (1984).
100. W. Kinzel,
Z. Phys. B **46**, 59 (1982).
101. W. Kinzel,
Phys. Rev. B **26**, 6303 (1982).
102. G. Eiselt, J. Kötzler, H. Maletta, D. Stauffer
und K. Binder, Phys. Rev. B **19**, 2664 (1979).
103. E.W. Montroll und N.S. Goel,
Biopolymers **4**, 855 (1966).
104. C.J. Thompson,
Biopolymers **6**, 1101 (1968).
105. R.T. Bush und C.J. Thompson,
Biopolymers **10**, 961 (1971),
Biopolymers **10**, 973 (1971).
106. J. Gulati und I.L. Reisin,
Science **176**, 1137 (1972),
Science **176**, 1139 (1972).
107. D.L. Njus und H.E. Stanley,
in Dynamical Aspects of Critical Phenomena,
ed. by J.I. Budnick und M.P. Kawatra,
Gordon and Breach, New York, 1972.
108. K. Binder und D. Stauffer,
in Monte Carlo Methods in Statistical Physics,
ed. by K. Binder, Springer, Berlin, 1979, S. 326.
109. L.C. Tippie und W.G. Clark,
Phys. Rev. B **23**, 5854 (1981).
110. A. Cheikhrouhou, C. Dupas und J.P. Renard,
J. Physique Lett. **44**, L-777 (1983).
111. J. Hori,
Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices,
Pergamon Press, Oxford, 1968.
112. E.H. Lieb und D.C. Mattis,
Mathematical Physics in One Dimension,
Academic Press, New York, 1966.

Literaturverzeichnis

113. F.J. Dyson,
Phys. Rev. **92**, 1331 (1953).
114. L.P. Kadanoff und J. Swift,
Phys. Rev. **165**, 310 (1968).
115. K. Kawasaki,
in Phase Transitions and Critical Phenomena Vol.2,
ed. by C. Domb and M.S. Green,
Academic Press, London, 1972, S. 443.
116. A.J. Bray, M.A. Moore und P. Reed,
J. Phys. C **11**, 1187 (1978).
117. S. Kirkpatrick,
Phys. Rev. B **16**, 4630 (1977).
118. R. Omari, J.J. Prejean und J. Souletie,
J. Physique **45**, 1809 (1984).
119. L.E. Wenger,
in Heidelberg Colloquium on Spin Glasses,
Lecture Notes in Physics, Vol. **192**,
ed. by J.L. van Hemmen and I. Morgenstern,
Springer, Berlin, 1983, S. 60.
120. H.B.G. Casimir und F.K. du Pré,
Physica **5**, 507 (1938).
121. D. Hüser, L.E. Wenger, A.J. van Duynveldt
und J.A. Mydosh, Phys. Rev. B **27**, 3100 (1983).
122. H. Maletta, S. 90,
K. Binder und W. Kinzel, S. 279,
in Heidelberg Colloquium on Spin Glasses,
Lecture Notes in Physics, Vol. **192**,
ed. by J.L. van Hemmen and I. Morgenstern,
Springer, Berlin, 1983.
123. B. Barbara, A.P. Malozemoff und S.E. Barnes,
J. Appl. Phys. **55**, 1655 (1984).
124. K. Binder,
Z. Phys. B **48**, 319 (1982).
125. W. Kinzel und K. Binder,
Phys. Rev. Lett. **50**, 1509 (1983),
Phys. Rev. B **29**, 1300 (1984).
126. A.P. Malozemoff und Y. Imry,
Phys. Rev. B **24**, 489 (1981).
127. P. Monod und H. Bouchiat,
J. Physique Lett. **43**, L45 (1982).

Literaturverzeichnis

128. C.M. Soukoulis, K. Levin and G.S. Grest,
Phys. Rev. Lett. **48**, 1756 (1982).
129. C.M. Soukoulis, K. Levin and G.S. Grest,
Phys. Rev. B **28**, 1495 (1983).
130. C.M. Soukoulis, G.S. Grest and K. Levin,
Phys. Rev. B **28**, 1510 (1983),
J. Appl. Phys. **53**, 7679 (1982),
Phys. Rev. Lett. **50**, 80 (1983).
131. G.S. Grest and C.H. Soukoulis,
Phys. Rev. B **28**, 2886 (1983).
132. G.S. Grest, C.H. Soukoulis and K. Levin,
J. Appl. Phys. **55**, 1634 (1984).
133. C.H. Soukoulis and G.S. Grest,
J. Appl. Phys. **55**, 1661 (1984).
134. D. Ling, D.R. Bowman and K. Levin,
Phys. Rev. B **28**, 262 (1983).
135. A.J. Bray and M.A. Moore,
J. Phys. C **12**, L441 (1979).
136. A.J. Bray and M.A. Moore,
J. Phys. C **13**, L469 (1980).
137. K. Nakanishi,
Phys. Rev. B **23**, 3514 (1981).
138. P.C. Hohenberg und B.I. Halperin,
Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
139. K. Binder und A.P. Young,
Phys. Rev. B **29**, 2864 (1984).
140. I. Morgenstern,
Phys. Rev. B **27**, 4522 (1983).
141. W.L. McMillan,
J. Phys. C **17**, 3179 (1984).
142. M. Suzuki,
Int. J. Magn. **1**, 123 (1971).
143. H. Yahata und M. Suzuki,
J. Phys. Soc. Japan **27**, 1421 (1969).
144. H. Yahata,
J. Phys. Soc. Japan **30**, 657 (1971).
145. Z. R  cz und M.F. Collins,
Phys. Rev. B **13**, 3074 (1976).

Literaturverzeichnis

146. J.R. Cherry und C. Domb,
J. Phys. A **11**, L5 (1978).
147. G.S. Rushbrook, R.A. Muse, R.L. Stephenson
und K. Pirnie, J. Phys. C **5**, 3371 (1972).
148. M. Gabay und T. Garel,
Phys. Lett. **65A**, 135 (1978).
149. G. Grinstein, C. Jayaprakash und M. Wortis,
Phys. Rev. B **19**, 260 (1979).
150. A. Aharony und K. Binder,
J. Phys. C **13**, 4091 (1980).
151. D.L. Hunter und G.A. Baker, Jr.,
Phys. Rev. B **7**, 3346, 3377 (1973).
152. D.S. Gaunt und A.J. Guttmann,,
in Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 3.,
ed. by C. Domb and M.S. Green,
Academic Press, London, 1974, S. 181.
153. G.A. Baker, Jr.,
Essentials of Padé Approximants,
Academic Press, New York, 1975.
154. Padé Approximants and Their Applications,
ed. by R. Graves-Morris,
Academic Press, London, 1973.
155. P.H.E. Meijer und R.A. Farell,
Phys. Rev. B **12**, 243 (1975).
156. W.F. Wolff und J. Zittartz,
Z. Phys. B **52**, 117 (1983).
157. L. Onsager,
Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
158. E. Domany,
J. Phys. C **11**, L337 (1978),
J. Phys. C **12**, L119 (1979).
159. G. Jug,
Phys. Rev. Lett. **53**, 9 (1984).
160. I. Ono,
J. Phys. Soc. Japan **41**, 345 (1976).
161. A.B. Harris,
J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
162. G. Grinstein und A. Luther,
Phys. Rev. B **13**, 1329 (1976).

Literaturverzeichnis

- 163. B.I. Halperin,
Phys. Rev. B **8**, 4437 (1973).
- 164. E. Domany,
Phys. Rev. Lett. **52**, 871 (1984).
- 165. C. Kalle,
J. Phys. A **17**, L801 (1984).
- 166. A. Zippelius,
Phys. Rev. B **29**, 2717 (1984).
- 167. C. Domb,
Adv. Phys. **9**, 149 (1960).
- 168. C. Domb,
J. Phys. C **3**, 256 (1970).
- 169. C. Domb,
in Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 3.,
ed. by C. Domb and M.S. Green,
Academic Press, London, 1974, S. 1 und S. 357.
- 170. M.F. Sykes und D.L. Hunter,
J. Phys. A **7**, 1589 (1974).
- 171. B.R. Heap,
J. Math. Phys. **7**, 1582 (1966).
- 172. G.A. Baker, H.E. Gilbert, J. Eve und G.S. Rushbrooke,
Brookhaven National Laboratory Report
BNL 50053 (T-460), Upton, N.Y., 1976.
- 173. C.J. Pearce,
Adv. Phys. **27**, 89 (1978).

Herrn Prof. Dr. **K. Binder** danke ich sehr herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für seine Diskussionsbereitschaft und Kritik während ihrer Anfertigung.

Frau Dr. **A. Zippelius** danke ich ebenso herzlich für viele sehr hilfreiche Diskussionen.

