

# Struktur der Energielandschaft und Relaxation von $\pm J$ Spinglas-Modellen

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades  
Doctor rerum naturalium  
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt  
der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
der Technischen Universität Dresden.

von  
Mgr. Phys. Jarosław Krawczyk  
geboren am 01. Juni 1974 in Poddebice

Gutachter: .....

Eingereicht am: .....

Tag der Verteidigung: .....



*So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig;  
(man muß sie für fertig erklären, wenn  
man nach Zeit und Umständen das mögli-  
che getan hat).*

Johann Wolfgang Goethe, 1787



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das Modell</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>Die Energielandschaft</b>	<b>9</b>
3.1	Einleitung . . . . .	9
3.2	Überblick über Methoden . . . . .	10
3.3	Charakterisierung der energetisch tiefsten Zustände. . . . .	14
3.4	Aufbau und Definition der exakten Landschaft. . . . .	19
3.5	Charakterisierung der exakten Landschaft . . . . .	22
3.6	Struktur der Sattelcluster . . . . .	25
3.7	Landschaft und Realraumbild . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Dynamische Eigenschaften</b>	<b>39</b>
4.1	Einleitung . . . . .	39
4.2	Numerische Methoden . . . . .	39
4.3	Relaxation der Korrelationsfunktion . . . . .	46
4.4	Die Tal- und Sattelcluster-Dynamik . . . . .	49
4.5	Einstellung des Gleichgewichts und Energierelaxation . . . . .	53
4.6	Ungeordnete Systeme . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>63</b>
<b>A</b>	<b>Bestimmung der Konfigurationen eines Clusters.</b>	<b>79</b>
<b>B</b>	<b>Die Grundzustandsstrukturen der freien Spins (BFS)</b>	<b>83</b>
<b>C</b>	<b>Übergang zwischen zwei Tälern</b>	<b>87</b>



# Kapitel 1

## Einführung

Die Untersuchung von Spingläsern [1, 2] gehört heute zu einem der aktuellen Probleme des Festkörpermagnetismus. Als eine neuartige Erscheinungsform magnetischer Festkörper nimmt die Spinglas-Phase nach dem Ferromagnetismus und Antiferromagnetismus den dritten Platz ein [3]. Spingläser sind Systeme mit Unordnung und Frustration infolge von Konkurrenz der Wechselwirkung zwischen den Spins. Als deren Konsequenz entsteht eine komplizierte Energielandschaft mit Tälern, die durch energetische Barrieren getrennt werden.

Ein Aspekt der aktuellen Diskussion betrifft die Charakterisierung der Spinglasphase [4]. Es werden hauptsächlich zwei Szenarien diskutiert, die *droplet theory* von Fisher und Huse [5] und die *replica symmetry breaking theory* von Parisi [6, 7]. Einer der Unterschiede zwischen den beiden hängt mit der Struktur des Grundzustands zusammen. Während man im *droplet* Bild von einer einfachen Struktur des Grundzustands ausgeht, die hauptsächlich aus zwei spiegelsymmetrischen Zuständen besteht, beschreibt die *replica symmetry breaking theory* eine viel kompliziertere Situation mit mehreren Tälern.

Ein weiterer Gegenstand der Untersuchungen betrifft die Einstellung des Gleichgewichts bei tiefen Temperaturen. Die Dynamik wird verlangsamt. Diese Besonderheit äußert sich bei der Untersuchung des Verhaltens der Spinkorrelationsfunktion, tritt aber auch bei der Relaxation der Energie in Erscheinung. Sie wird i.a. durch phänomenologische Gesetze beschrieben. Am bekanntesten ist das Kohlrausch-Wiliam-Watts-Gesetz (KWW), das in der Literatur wegen seiner typischen Zeitabhängigkeit auch als *stretched exponential law* bezeichnet wird. Dieses Gesetz beobachtet man bei ganz verschiedenen Relaxationsphänomenen in Gläsern und Spingläsern [8].

Unser Verständnis von Spingläsern basiert neben den Erkenntnissen aus experimentellen und theoretischen Untersuchungen auf Computersimulationen. In dieser Arbeit sind Ergebnisse zusammengefasst, die durch Compu-

tersimulationen erhalten wurden. Der Schwerpunkt der Arbeit besteht in der Untersuchung des Zusammenhangs zwischen der Energielandschaft und der Dynamik. Dabei wird der mikroskopische Aspekt der Dynamik genauer studiert. Als Gegenstand der Untersuchungen wurde das  $\pm J$  Spinglas-Modell ausgewählt, das im Kapitel 2 besprochen wird.

Die Dynamik von Spingläsern hängt eng mit der niederenergetischen Struktur des Konfigurationsraums (Energielandschaft) zusammen. Zur Bestimmung der Energielandschaft müssen alle niederenergetischen Zustände berechnet werden. Die Berechnung der Zustände setzt das Auffinden des Grundzustandes voraus. Mit der *branch-and-bound* Methode - einem Verfahren der diskreten nichtlinearen Optimierung - werden alle Zustände einschließlich der Anregungen berechnet. Das Verfahren *branch-and-bound* beruht darauf, den Baum aller möglichen Zustände eines gegebenen Systems nach dem globalen Minimum des Hamiltonians (der Gütefunktion) zu durchsuchen. Mit der Methode können zwar nur kleine Systeme simuliert werden, sie hat aber den Vorteil, dass auch alle postoptimalen Zustände bestimmt werden können. Danach werden alle energetisch tiefliegenden Zustände bezüglich ihrer Verbindungen im Konfigurationsraum klassifiziert. Es gibt verschiedene Ansätze, die Energielandschaft zu charakterisieren. Einige davon werden im Kapitel 3 vorgestellt. Aus den energetisch tiefliegenden Zuständen wird eine schematische Energielandschaft aufgebaut. Alle physikalisch relevanten Komponenten wie Cluster, Sattelcluster und Täler werden definiert und dargestellt. Besonders interessant ist die Struktur des Sattelcluster, die verschiedene Täler verbindet. Sattelpunkte in Energielandschaften werden oft auch bei glasförmigen Systemen untersucht [9].

Zur Charakterisierung der Spinglasphase unterhalb einer kritischen Temperatur wird in der Literatur häufig die Verteilung des Overlaps benutzt. Der Overlap zwischen zwei Zuständen ist ein Maß für die Übereinstimmung der Orientierung der einzelnen Spins in beiden Zuständen. Die Idee der Verteilung des Overlaps nutzen wir auch zur Charakteristik der inneren Clusterstruktur. Ausserdem wird die Veränderung der Verteilung des Overlaps mit der Veränderung der Grundzustandsenergie untersucht.

Um die Dynamik aus einem mikroskopischen Gesichtspunkt zu verstehen, wird die Zeitentwicklung des Systems in der Energielandschaft Schritt für Schritt verfolgt (Kapitel 4). Dabei wird der Monte Carlo Metropolis Algorithmus und die *waiting time method* benutzt. Bei tiefen Temperaturen wird die Dynamik unter Benutzung der Kenntnis aller Zustände als Flucht aus einem Tal anschaulich gemacht. Der Zusammenhang von der Größe und der Struktur der Täler mit der Dynamik wird verdeutlicht [10]. Wir zeigen, dass nicht nur die zahlreichen energetischen Barrieren einen Einfluss auf die Dynamik ausüben, sondern auch die strukturspezifischen Eigenschaften wichtig sind.

Schließlich wird die Einstellung des Gleichgewichts bei Spinglas-Systemen untersucht. Ein Vergleich mit geordneten antiferromagnetischen Systemen lässt Rückschlüsse auf den Zusammenhang von komplexer Energielandschaft und Dynamik zu.



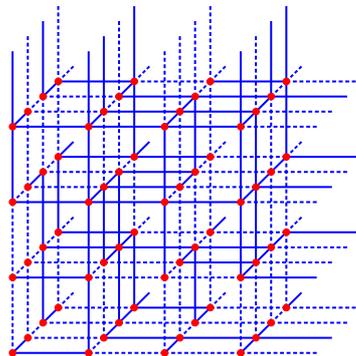
# Kapitel 2

## Das Modell

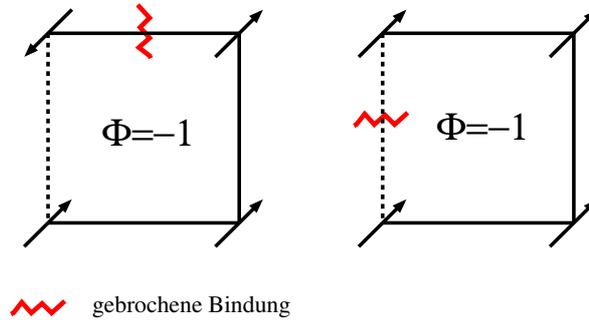
Modelle zur Beschreibung der magnetischen Eigenschaften von Spingläsern besitzen in der Regel die drei folgenden Eigenschaften: *randomness* bzgl. der Wechselwirkungen, *quenched disorder* und Frustration. Ein solches Modell wurde 1975 von S.F. Edwards und P.W. Anderson eingeführt [11]. In dieser Arbeit wird das Edwards-Anderson-Modell (EA) untersucht. Es wird durch den Hamiltonian

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum h S_i \quad (2.1)$$

beschrieben. Jedes einzelne System wird durch eine Verteilung der Wechselwirkung  $J_{ij}$  zwischen nächsten benachbarten Spins  $S_i$  charakterisiert. Wir beschränken uns auf den Fall, dass das äußere magnetische Feld  $h$  verschwindet.  $S = (S_1, S_2, \dots, S_N)$  gibt eine Konfiguration an, die die Einstellung von  $N$  Spins angibt. In dieser Arbeit werden durchweg für alle physikalischen Größen des Modells dimensionslose Einheiten verwendet.



**Abbildung 2.1:** Ein  $4 \times 4 \times 4$  System mit periodischen Randbedingungen. Die durchgezogenen Linien stellen die ferromagnetischen, die gestrichelten die antiferromagnetischen Wechselwirkungen dar.



**Abbildung 2.2:** Zwei Zustände mit jeweils einer gebrochenen Bindung.

Auf Grund der Symmetrie des Hamiltonians gibt es für jeden Zustand  $S$  einen spiegelsymmetrischen Zustand, bei dem alle Spins bzgl. ihrer Lage im Zustand  $S$  entgegengerichtet sind. Manchmal werden in der Literatur spiegelsymmetrische Konfigurationen als ein Zustand angesehen. Wir werden jedoch in der Regel solche Zustände immer als zwei getrennte ansehen. In den Fällen, bei denen sie als ein Zustand auftreten, werden wir dies deutlich betonen. Die Wechselwirkungen werden entsprechend der Verteilungsfunktion

$$p_{\pm J}(J) = 0.5 \delta(J - 1) + 0.5 \delta(J + 1)$$

zufällig gewählt und bleiben während der Simulationen konstant. Solche zufällige konstant gehaltene Zuordnung der Wechselwirkungen nennt man *quenched disorder*. Ein Modell mit auf diese Weise ausgewählten Wechselwirkungen nennt man  $\pm J$  Spinglas-Modell. Die Systeme, die in der Arbeit betrachtet werden, sind zwei- und dreidimensionale Gitter mit periodischen Randbedingungen. Die eckige Klammer  $\langle ij \rangle$  gibt an, dass sich die Summation in (2.1) nur über nächste Nachbarn erstreckt. Ein Beispiel eines dreidimensionalen Gitters der Größe  $4 \times 4 \times 4$  ist in der Abbildung (2.1) zu sehen. Die roten Punkten bezeichnen die Spins, die durchgezogenen Linien die ferromagnetischen und die gestrichelten die antiferromagnetischen Wechselwirkungen, deren Lage zufällig gewählt ist (*randomness* in den Wechselwirkung). Ein anderes Merkmal der Systeme ist die Frustration. Sie stellt ein grundlegendes Konzept zur Erklärung der interessanten Eigenschaften ungeordneter Systeme dar [12]. Frustration gehört zu den wichtigsten Charakteristika von Spingläsern und beeinflusst deren physikalische Eigenschaften wesentlich. Wir möchten an der Stelle den Begriff genauer erklären. Die Frustration eines Systems entsteht durch die Existenz sich prinzipiell widersprechender Forderungen, denen das System gleichzeitig gehorchen soll [13, 14]. In unserem Modell wird eine derartig widersprüchliche Restriktion durch das Auftreten sogenannter konkurrierender Wechselwirkungen erzeugt

(unterschiedliche Vorzeichen der Wechselwirkungen). Dadurch steht die Minimierung der lokalen Energien der einzelnen Spins im Widerspruch zur Minimierung der Gesamtenergie. Der Einfachheit halber konzentrieren wir uns auf ein zweidimensionales Gitter. In Abb. 2.2; S. 6 ist eine frustrierte Plaquette dargestellt. In der Plaquette ist es unmöglich, die Spins so anzuordnen, dass alle Wechselwirkungen befriedigt bleiben. Der obere linke Spin kann entweder die antiferromagnetische oder die ferromagnetische Bindung befriedigen. Die verbleibende unbefriedigte Bindung nennt man "gebrochen". Mathematisch wird die Frustration in diesem Fall durch das Produkt der Wechselwirkungen entlang einer Kontur (c) erklärt:

$$\Phi = \prod_c J_{ij}.$$

Ist  $\Phi = -1$ , so nennt man eine Plakette frustriert. Das Konzept der Frustration hat auch Eingang und eine breite Anwendung auf anderen Gebieten der Physik, Informatik, Soziologie und Biologie gefunden.



# Kapitel 3

## Die Energielandschaft

### 3.1 Einleitung

Das Paradigma der Energielandschaft erweist sich als einheitliches Konzept für so unterschiedliche Gebiete wie Glas- und Spinglasphysik, molekulare Strukturen, Proteinfaltung, kombinatorische Optimierung und Entwicklungstheorie. Es wurde zum ersten Mal von S. Wright [15, 16] im Jahre 1930 im Zusammenhang mit biologischer Anpassung verwendet. Eine Konfiguration (oder ein Element)  $S$  des Systems betrachtet man im allgemeinen als einen Punkt, dessen Bewegung in der Landschaft durch eine Funktion  $f$  bestimmt wird. Die Funktion kann z.B. der Hamiltonian bzw. die Kosten- oder Anpassungsfunktion sein. Eine Konfiguration ist dann z.B. ein Molekül, eine Spinkonfiguration oder eine Route beim Traveling-Salesman-Problem. Die Dimension des Konfigurationsraum und demzufolge auch die Menge aller Konfigurationen ist gewöhnlich sehr groß. Oftmals interessiert man sich für zusätzliche Informationen über die Struktur dieser Menge wie z.B. Abstände, Ähnlichkeiten, Zugänglichkeiten und Konnektivitäten. Goldstein [17] führte das Konzept in die Glasphysik ein und benutzte die Landschaft der potentiellen Energie zu einer alternativen Beschreibung der Dynamik von viskosen Flüssigkeiten. Die Idee basierte ursprünglich darauf, dass das Fließen bei niedrigen Temperaturen durch die Potentialbarrieren dominiert wird, deren Höhe der thermischen Energie entspricht. Die Konfiguration des gesamten Systems wird als einzelner Punkt angesehen, der sich in einem hochdimensionalen Raum in einem zeitunabhängigen Potential bewegt. Die Energielandschaft wird durch ihre Topographie geprägt. Sie beinhaltet die Verteilung lokaler Energieminima: *inherent structure*. Die Schwierigkeit bei der Beschreibung der *inherent structure* besteht darin, dass man Minima, Energiebarrieren, Sattelpunkte und die Übergänge finden muss. Das Konzept wurde erfolgreich für unterschiedliche Systeme benutzt, vor allem zur Beschreibung

von Gläsern [18, 19, 20, 21, 22], Spingläsern [23, 24, 25, 26, 27, 28] und auch von unterkühlten Flüssigkeiten [29, 30].

In diesem Kapitel werden wir die Energielandschaft des Edwards-Anderson Modells untersuchen. Es erweist sich, dass man viele Eigenschaften der Energielandschaft an diesem Modell studieren kann. Insbesondere weist es langsame Relaxation auf. Das Auffinden des Grundzustandes ist aufgrund der vorkommenden Frustration [12] eine schwierige Optimierungsaufgabe. Darüber hinaus kommt es wegen der Diskretheit der Wechselwirkungen zu einer hohen Entartung der Zustände. Die Algorithmen zur Bestimmung des Grundzustandes haben die unangenehme Eigenschaft, dass zur Lösung die Rechenzeit exponentiell mit der Anzahl der Spins anwächst. Für spezielle Systemklassen der zweidimensionalen  $\pm J$  Spingläser auf einem quadratischen Gitter konnte man Algorithmen finden, die zur sogenannten Klasse "P" gehören. Für diese Algorithmen ist es möglich, den Grundzustand in nur polynomial mit der Größe des Systems wachsender Zeit zu finden. Für Probleme in einer anderen Klasse "NP-hard" [31] sind nur nicht-polynomiale Algorithmen gefunden, die polynomialen Algorithmen existieren für diese Probleme wahrscheinlich nicht. Der Beweis der Existenz oder (Nichtexistenz) ist ein ungelöstes Problem der kombinatorischen Optimierung [4]. Es wurden Methoden entwickelt, die es möglich machen, bei nicht zu großen Systemen die exakten Grundzustände zu finden. In den nächsten Abschnitten werden diese Methoden vorgestellt. Die gefundenen Grundzustände werden zum Aufbau einer Energielandschaft benutzt. Des Weiteren werden auch Simulationen vorgestellt, die zu Zuständen führen, von denen man mit hoher Wahrscheinlichkeit davon ausgehen kann, dass es sich um Grundzustandskonfiguration handelt. Mit diesen ist man ebenfalls in der Lage, in gewisser Weise Aussagen über physikalische Eigenschaften der Energielandschaft zu gewinnen. Nach einer Vorstellung der vollständigen Methoden, die Konfigurationen des Grundzustandes finden, geben wir im letzten Abschnitt dieses Kapitels eine komplette Übersicht über die Energielandschaft und ihre Komponente.

## 3.2 Überblick über Methoden

In diesem Abschnitt werden die Methoden und Algorithmen beschrieben, die die Untersuchung der Grundzustände und der niedrigen Anregungen ermöglichen. Erst besprechen wir die exakten Methoden: die Transfer Matrix Methode, *branch-and-cut*, *Matching Ansatz*, und die im weiteren hauptsächlich verwendete Methode *branch-and-bound*. Dann wenden wir uns den Algorithmen zu, die die energetisch niedrig liegenden Konfigurationen näherungsweise beschreiben. Dazu gehören: *cluster exakt approximation*, *expansion fall invasion spring* und verschiedene Monte Carlo Simulationen wie z.B.: *multi-*

*canonical simulations* und *flat histogram sampling*. Als Größe der Systemen geben wir die Länge  $L$  einer Kante an. Bei kubischen ( $3D$ ) und quadratischen ( $2D$ ) Gittern beträgt die Anzahl der Spins  $N = L \times L \times L$  für  $3D$  und  $N = L \times L$  für  $2D$ .

### 3.2.1 Die exakten Methoden

Zu den Methoden werden nicht nur die gezählt, die einen einzelnen Grundzustand exakt finden können, sondern auch die, die alle Zustände unterhalb einer Energieschranke liefern.

#### *Matching-Ansatz*

Der Matching-Ansatz ist auf zweidimensionale Gitter beschränkt. Das Konzept besteht darin, dass man eine Grundzustandskonfiguration sucht, indem man zwei frustrierte Plaquetten auf eine solche Weise verknüpft, dass die Anzahl der gebrochenen Bindungen minimiert wird. Die Methode wird auf ein graphen-theoretisches Problem reduziert [32]. Wenn man eine optimale *matching* Lösung gefunden hat, dann wird sie in eine Spinkonfiguration konvertiert. Mit diesem Algorithmus ist es Palmer und Adler [33] gelungen, den Grundzustand für Gitter mit  $L = 1800$  bei offenen Randbedingungen zu finden. Dies wird bisher als "2D Weltrekord" angesehen. An der Stelle soll erwähnt werden, dass man den *matching* Ansatz auch zum Erhalten aller Grundzustandskonfigurationen einsetzen kann [34]. Es wurden alle optimalen Lösungen des Problems gefunden und dann in die Konfigurationen umgesetzt. Um sicher zu sein, dass alle Zustände gefunden wurden, wurden die Ergebnisse mit Ergebnissen von Algorithmen, die die Zustandssumme berechnen, verglichen. Natürlich ist das nur für kleine Systeme möglich. Dann wurde festgestellt, dass die Anzahl der Zustände einer log-normalen Verteilung unterliegen und sowohl die Mittelwerte der Zustandsanzahl als auch die Schwankungen mit der Größe des Systems wachsen.

#### **Transfer Matrix Methode**

Die Transfer Matrix Methode wurde für die Untersuchung der zweidimensionalen Spingläser von Binder und Morgenstern [35] angewendet. Die Grundzustandsenergie und Entropie wurde mit der Methode von Cheung und McMillan [36] für ( $2D$ ), für rechteckige Gitter der Breite  $W = 3$  bis 11 und Länge  $L = 10^4$  bis  $10^6$  berechnet. In [37] wurden mit der Methode alle Grundzustände für  $3D$ ,  $L = 4$  gefunden.

## Branch and Cut

Die Methode ist ein sehr komplexes Verfahren. Sie schreibt die quadratische Funktion der Energieformel in eine lineare mit zusätzlichen Ungleichungen um, die dann durch die richtige Lösung erfüllt werden müssen. Es sind nicht alle Ungleichungen von Anfang an bekannt. Erst während der Lösung entstehen weitere, die ebenfalls berücksichtigt werden müssen. Da die Anzahl der Ungleichungen exponentiell mit der Größe des Systems anwächst, gilt dasselbe für den Aufwand an Rechenzeit. Mit dem Verfahren ist es gelungen, Grundzustände bei  $2D$  Systemen bis  $L = 100$  [38, 39] zu finden, s. Tab. 3.1.

## Der Branch-and-Bound Algorithmus

Der branch-and-bound Algorithmus zählt zu den Standardmethoden der numerischen Optimierung [40]. Er wurde in [41] zum ersten Mal in einer rekursiver Form zur Minimierung des Hamiltonians für Systeme mit Frustration verwendet. Im allgemeinen besteht die Verfahrensweise bei *branch-and-bound* darin, den Baum der möglichen Zustände eines Systems nach dem globalen Minimum der jeweiligen Gütefunktion zu durchsuchen. Dabei wird in jedem Knoten des Baums geprüft, ob der entstehende Zweig noch weiter durchsucht werden muss. Die Entscheidung wird durch Berechnung geeigneter Schranken für die zu minimierende Funktion getroffen. Der Algorithmus eignet sich nur für kleine Systeme, aber der Vorteil besteht darin, dass man neben dem optimalen Wert auch alle niederenergetische Zustände erhalten kann. Fast alle Berechnungen von Grundzuständen und Anregungen in dieser Arbeit wurden mit dieser Methode durchgeführt.

### 3.2.2 Näherungsweise Berechnungen

#### Cluster Exact Approximation

*Genetic cluster exact approximation* ist ein sehr effektiver Algorithmus. Er wurde von Hartmann entwickelt [42, 43]. Die Hauptidee dieses Verfahrens besteht darin, einen Teilcluster von Spins (im Realraum) zu konstruieren, welcher keine Bond-Frustrationen aufweist. Die Wechselwirkung der Clusterspins mit den anderen Spins an der Clusteroberfläche wird in Form von lokalen Feldern berücksichtigt, welche auf die Clusterspins wirken. Dann wird der Grundzustand für den gebildeten Teilcluster exakt bestimmt. Auf diese Weise entsteht ein Teilgrundzustand Cluster mit den restlichen unverändlichen Spins. Das Gebilde stellt eine Approximation des Grundzustandes für das gesamte System dar. Die mit diesem Verfahren gewonnene Ergebnisse stellen für  $3D$  und  $4D$  "Weltrekord" dar, s.Tab 3.1.

### Monte Carlo Simulationen

Auch verschiedene Techniken von *Monte Carlo Simulationen* wurden zur Bestimmung von energetisch tief liegenden Zuständen angewendet. Das Ziel solcher Untersuchungen ist jedoch nicht in erster Linie das Finden einer konkreten Konfiguration, sondern die Untersuchung allgemeiner Eigenschaften des Systems, z.B. Energie und Entropie. Mit Hilfe der Methode *multicanonical simulationen* [44] wurden für 3D Systeme mit  $L = 12$  untersucht, s. Tab 3.1. Einzelheiten der Methode sind sehr gut in [45] erklärt. Eine andere Methode - *flat histogram sampling* [46] liefert uns auch die Werte für 2D bis  $L = 32$  [47]. Eine interessante Methode, die direkt das in strukturellen Gläsern nützliche Landschaft-Paradigma anwendet, wurde in [23] für  $\pm J$  Spinglas-Modelle benutzt. Hierbei wurde die "heat-bath" Dynamik mit *steepest-descent* Energieminimierung genutzt, um die *inherent structure* abzutasten. Dann wurde die Abhängigkeit der *inherent structure* von der Temperatur bestimmt. Es hat sich gezeigt, dass es verschiedene Temperaturregime gibt, mit denen auch die Dynamik zusammenhängt. Das Szenario wird auch bei unterkühlten Flüssigkeiten beobachtet. Wir werden auf die Ergebnisse dieser Untersuchungen in dem Kapitel 4, das die Dynamik betrifft, genauer eingehen.

### Expansion-Fall-Invasion-Spring

Bei diesem Verfahren [50] werden anfangs viele zufällige Zustände hergestellt (*expansion*), die sich voneinander durch die Einstellung von  $N/4$  bis  $N/2$  Spins unterscheiden. Dadurch wird gewährleistet, dass relativ große Abstände zwischen den Konfigurationen vorhanden sind. In einer nachfolgender Prozedur (*fall - steepest descent*) wird - ausgehend von jeder Konfiguration - versucht, Zustände mit möglichst niedriger Energie zu finden. In einem dritten Schritt (*invasion*) werden Cluster (in [50] wird die Terminologie LEG - *local ensembles of ground states* - dafür benutzt) aufgebaut. Schließlich werden bestimmte (auf gewisse Weise gewählte) Spins im Cluster gleichzeitig umgedreht. Auf diese Weise bekommt man neue Konfigurationen, aus denen man durch *invasion* neue Cluster gewinnt, sofern diese aus dem vorherigen Verfahren nicht bereits bekannt sind (*spring*). Auf diese Weise ist es möglich, die Energielandschaft in der Nähe der Grundzustandsenergie zu charakterisieren. Mit der Methode wurden Ergebnisse für 2D Systeme bis  $L = 10$  gefunden. Die mittlere Clustergröße wächst exponentiell mit der Größe des Systems. Die Ergebnisse für Energie und Entropie sind in der Tabelle 3.1 angegeben..

**Tabelle 3.1:** Energie  $e_0$  und Entropie  $s_0$  pro Spin für den Grundzustand von Spinglas-Modellen der Dimension  $D$ , berechnet mit verschiedenen Methoden. Die Werte sind Extrapolationen auf ein unendlich großes Gitter.  $L_{max}$  gibt die maximale Länge der quadratischen und kubischen Gitter an, mit der die Extrapolation durchgeführt wurde.

D	Methode	$L_{max}$	$e_0$	$s_0$	ref.
2	matching*	1800	-1.40193(2)		[33]
2	branch-and-cut	50	-1.4015(8)		[39]
2	branch-and-bound	8	-1.40(6)	0.077(21)	[14]
2	genetic cluster appr.	40	-1.4015(3)		[48]
	genetic cluster appr.	40		0.078(5)	[49]
2	transfer matrix <sup>×</sup> (TM)	11	-1.4024(12)	0.0701(5)	[36]
2	expansion-fall-invasion-spring	10	-1.40169		[50]
2	flat histogram sampling	32	-1.4007(85)	0.0709(6)	[46]
3	branch-and-bound	4	-1.778(14)	0.054(16)	[14]
	genetic cluster appr.	8		0.051(3)	[49]
3	genetic cluster appr.	14	-1.7876(3)		[51]
3	multicanonical sampling	12		0.04412(46)	[44]
4	genetic cluster appr.	7	-2.095(1)		[51]
	genetic cluster appr.	6		0.027(5)	[49]

\* freie Randbedingungen

<sup>×</sup> rechteckiges Gitter ( $L \times W$ ) mit  $L_{max} = 11$  (periodische Randbedingungen) und  $W_{max} = 10^4 \dots 10^5$  (freie Randbedingungen)

### 3.3 Charakterisierung der energetisch tiefsten Zustände.

Die Charakterisierung der Landschaften beginnt zunächst mit der Beschreibung der energetisch tiefsten Zustände [42, 48, 52]. In diesem Abschnitt wird die Analyse der Grundzustände und der ersten Anregungen durchgeführt. Mit der Methode *branch-and-bound* wurden für 8555 Systeme der Größe  $4 \times 4 \times 4$  alle Grundzustände und erste Anregungen berechnet. Dann wurden alle interessanten Merkmale im Grundzustand (Grundzustandsentropie und Clusteranzahl) und in der ersten Anregung (Anzahl der Zustände und der metastabilen Zustände, Cluster und Sattelcluster) bestimmt. Zu einer weiteren häufig benutzten und wichtigen Charakterisierung der Struktur

der Grundzustände in Spingläser benutzt man die Überlappung (im folgenden kurz “Overlap“ genannt) und ihre Verteilung [53, 48]. Für ein gegebenes System mit *quenched disorder* definiert man den Overlap des Spins  $i$  in zwei Konfigurationen durch

$$q_i^{\alpha,\beta} \equiv S_i^\alpha S_i^\beta, \quad (3.1)$$

der vollständige Overlap zwischen beiden Konfigurationen ergibt sich daraus zu

$$q^{\alpha,\beta} \equiv \frac{1}{N} \sum_i q_i^{\alpha,\beta}. \quad (3.2)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Overlap ist dann für ein gegebenes System

$$P_J(|q|) \equiv \left\langle \delta(|q - q^{\alpha,\beta}|) \right\rangle, \quad (3.3)$$

wobei die eckige Klammer die Mittelung über alle möglichen Paare von Konfigurationen  $\alpha, \beta$  bezeichnet. Der Mittelwert über mehrere Systeme mit unterschiedlicher Verteilung der  $J_{ij}$

$$P(q) \equiv \overline{P_J(|q|)} \quad (3.4)$$

wird als Verteilung des Overlap bezeichnet und ist ein Maß für die Organisation der Grundzustände.

An dieser Stelle soll bemerkt werden, dass die Verteilung des Overlap Gl. 3.4; S. 15 in der Literatur oftmals als typisches Merkmal zur theoretischen Beschreibung der Spingläser dient. Wenn die Verteilung  $P(q)$  breit ist, spricht man von einer komplexen Grundzustandsstruktur im Sinne der *replica symmetry breaking theory* [54, 6, 55, 7, 56, 57]. Im Fall der *droplet theory* [5, 58] besteht der Grundzustand nur aus zwei Zuständen und die Gestalt des Overlap entspricht näherungsweise einer  $\delta$ -Funktion. Es wird gezeigt, wie sich der Overlap für Systeme mit verschiedenen Grundzustandsenergien und -entropien verändert. In der Tabelle 3.2 wurden die Ergebnisse für die Grundzustände dargestellt. Die am häufigsten auftretenden Systeme sind die mit der Grundzustandsenergie  $E_0 = -112$ . Eines dieser Systeme wurde als Referenzsystem (repräsentatives System) gewählt. An ihm werden allgemeine Eigenschaften der Energielandschaft diskutiert. Es wurde ebenfalls von Klotz und Kobe [24, 14] ausgewählt. Die Entropie pro Spin

$$s_0 \equiv \overline{\ln n_{GS}}/N \quad (3.5)$$

wächst mit zunehmender Grundzustandsenergie. (Die Mittelung erfolgt wie in Gl. 3.4; S. 15 über verschiedene Realisierungen der Wechselwirkung.) Das ist durch die Einschränkung des Volumens des Konfigurationraums bedingt. Dieselbe Anzahl von Zuständen  $2^N$  hat im Falle der höheren Grundzustands-

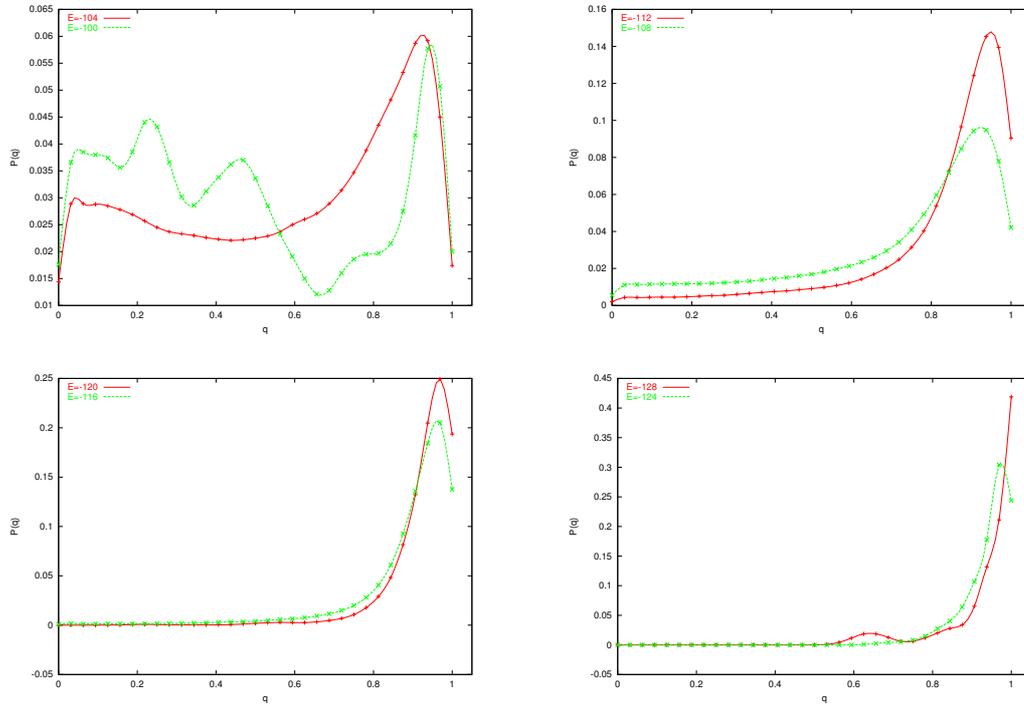
$E_0$	$n_{sys}$	$\bar{s}_0$	$\bar{n}_{Cl}$	$\bar{n}_{GS}$
-100	5	$0.1153 \pm 0.0091$	$10.20 \pm 2.82$	3848
-104	505	$0.0974 \pm 0.0231$	$6.19 \pm 3.14$	1088
-108	2769	$0.0748 \pm 0.0257$	$3.19 \pm 1.99$	326
-112	3541	$0.0566 \pm 0.0249$	$1.91 \pm 1.17$	114
-116	1358	$0.0448 \pm 0.0221$	$1.38 \pm 0.74$	45
-120	291	$0.0371 \pm 0.0210$	$1.18 \pm 0.46$	24
-124	52	$0.0311 \pm 0.0181$	$1.11 \pm 0.32$	14
-128	7	$0.0259 \pm 0.0235$	$1.33 \pm 0.57$	41
	8555	$0.0623 \pm 0.0285$	$1.14 \pm 0.37$	19

**Tabelle 3.2:** Charakteristische Eigenschaften der Grundzustände für 8555 Systeme der Größe  $4 \times 4 \times 4$ , dabei wurde jeder Zustand und sein spiegel-symmetrischer Zustand nur einmal gezählt (s. Kap. 2.). Die Werte sind für Systeme mit unterschiedlicher Grundzustandsenergie  $E_0$  angegeben ( $n_{sys}$  - Anzahl gefundenen Systeme,  $\bar{s}_0$  - mittlere Entropie pro Teilchen,  $\bar{n}_{Cl}$  - mittlere Anzahl der Cluster,  $\bar{n}_{GS}$  - mittlere Anzahl aller Zuständen). Die letzte Zeile gibt die Werte gemittelt über alle 8555 Systeme an.

$E_0$	$\bar{S}t_{Anr}$	$\bar{Cl}_{Anr}$	$\bar{S}t_{Sdl}$	$\bar{Cl}_{Sdl}$	$\bar{S}t_{Ms}$	$\bar{Cl}_{Ms}$
-100	384825	$61.00 \pm 8.51$	191598	$0.70 \pm 0.45$	351	$7.20 \pm 3.56$
-104	102879	$47.64 \pm 15.76$	50016	$0.98 \pm 0.68$	543	$6.31 \pm 3.58$
-108	25469	$33.48 \pm 14.37$	11079	$0.99 \pm 0.90$	375	$4.59 \pm 2.73$
-112	6653	$23.02 \pm 10.81$	2199	$0.54 \pm 0.77$	151	$2.57 \pm 1.98$
-116	1895	$17.01 \pm 7.76$	375	$0.30 \pm 0.62$	42	$1.25 \pm 1.28$
-120	775	$14.18 \pm 5.07$	81	$0.16 \pm 0.41$	14	$0.59 \pm 0.94$
-124	395	$12.81 \pm 4.11$	22	$0.15 \pm 0.44$	2	$0.14 \pm 0.36$
-128	322	$13.42 \pm 4.75$	13	$0.14 \pm 0.38$	0.43	$0.14 \pm 0.37$
	17634	$26.5 \pm 14.4$	7326	$0.68 \pm 0.83$	225	$3.14 \pm 2.73$

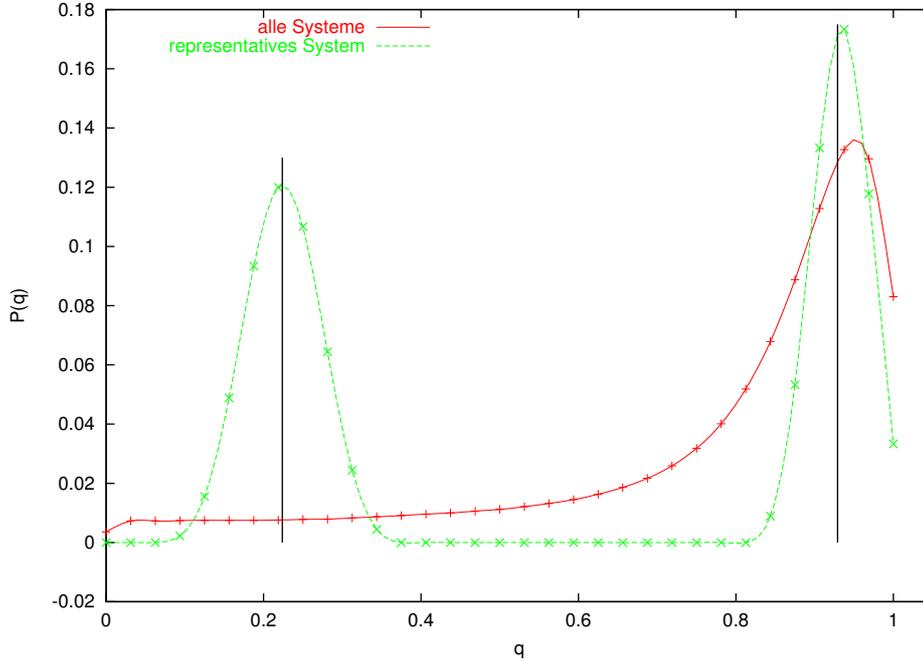
**Tabelle 3.3:** Charakteristik der Struktur der ersten Anregung für 8555 Systeme der Größe  $4 \times 4 \times 4$  analog zu Tab 3.2: Mittlere Anzahl der Konfigurationen ( $\bar{S}t_{Anr}$ ), Cluster ( $\bar{Cl}_{Anr}$ ), Konfigurationen in Sattelclustern ( $\bar{S}t_{Sdl}$ ), Sattelcluster ( $\bar{Cl}_{Sdl}$ ), metastabilen Zustände ( $\bar{S}t_{Ms}$ ), metastabilen Cluster ( $\bar{Cl}_{Ms}$ ).

energie weniger Energieniveaus zu besetzen. Das vergrößert auf natürliche Weise die Entartung der Niveaus. Die steigende Entartung beeinflusst die Struktur der niederenergetischen Energielandschaft. Der Einfluss der Grundzustandsenergie auf die Struktur (also auf die Anzahl der Grundzustands-



**Abbildung 3.1:** Verteilung des Overlap  $P(q)$  für verschiedene Grundzustandsenergien (Grundzustandsenergien pro Spin) für 3D Systeme ( $L = 4$ ):  $E = -100$  ( $-1.5625$ ),  $-104$  ( $-1.625$ ),  $-108$  ( $-1.6875$ ),  $-112$  ( $-1.75$ ),  $-116$  ( $-1.8125$ ),  $-120$  ( $-1.875$ ),  $-124$  ( $-1.9375$ ),  $-128$  ( $-2.0$ ). Es wurde über verschiedene Realisierungen der Wechselwirkungen entsprechend der Tabelle 3.2 gemittelt.

und Sattelcluster sowie metastabilen Zuständen) ist bemerkenswert, vgl. Tabelle 3.3. Die Struktur wird “einfacher“ bei niedrigerer Energie. Die Anzahl der metastabilen Zustände und Sattelcluster nimmt ebenfalls mit der Energie ab. Für die Systeme mit niedrigerer Grundzustandsenergie treten sie sehr selten oder gar nicht auf. Die Grenzfälle sind das total unfrustrierte und das total frustrierte System. Im ersten Fall gehören zum Grundzustand nur zwei symmetrische Konfigurationen, im zweiten Fall viele voneinander getrennte Konfigurationen [13]. Das Verhalten spiegelt sich deutlich in der Verteilung des Overlap  $P(q)$  wider (Abb. 3.1; S. 17). Für Systeme mit geringer Anzahl von Grundzuständen (in diesem Fall auch mit niedrigeren Energien) nähert sich die Verteilung der einer  $\delta$ -Funktion. Bei höheren Energien bleibt die Verteilung aufgrund einer komplizierten Grundzustandsstruktur viel breiter. Eine äußerst komplizierte Verteilung kommt bei der Energie  $E = -100$  und  $E = -104$  vor, bei denen die mittlere Anzahl von Clustern 10.20 bzw. 6.19 beträgt. In Abb. 3.2; S. 18 ist die Verteilung des Overlap für alle Systeme



**Abbildung 3.2:** Verteilung des Overlap  $P(q)$  für alle berechnete Systeme und für das repräsentative System. Die Verteilung des repräsentativen Systems enthält zwei Maxima. Die eine (linke) entspricht dem Overlap zwischen zwei getrennten Clustern ( $\bar{q}_{dd}^{c1,c2} = 0.223$ ), die in dem System auftreten, die andere ist durch den Overlap zwischen relativ benachbarten Konfigurationen in Clustern geprägt ( $\bar{q}_{di}^{c1,c2} = 0.929$ ). Die schwarzen Linien bezeichnen die Lage der berechneten  $q$  Werte.

und für das repräsentative System dargestellt. Die  $P(q)$  - Verteilung für alle Systeme weist ein Maximum auf. Die Verteilung bei dem repräsentativen System spiegelt deutlich die Struktur der zugehörigen Energielandschaft wider, siehe Abb. 3.4; S. 23. Wenn man den Hammingabstand  $h_d^{\alpha,\beta}$  ( $h_d^{\alpha,\beta}$  von zwei Zuständen  $\alpha, \beta$  ist eine Hälfte der Differenz von der Summe über alle Spins) für die Betrachtung des Systems benutzt, dann bekommt man eine sehr gute Übereinstimmung der Grundzustandsstruktur und der Verteilung  $P(q)$ . Wir bezeichnen mit  $\bar{h}_{dd}$  den mittleren Hammingabstand

$$\bar{h}_{dd} = \frac{1}{m_1 m_2} \sum_{\alpha=0}^{m_1} \sum_{\beta=0}^{m_2} h_d^{\alpha,\beta} \quad (3.6)$$

zwischen zwei disjunkten Mengen von Zuständen mit  $m_1$  bzw.  $m_2$  Elementen bzw.

$$\bar{h}_{di} = \binom{m}{2}^{-1} \sum_{\alpha=1}^m \sum_{\beta=\alpha+1}^m h_d^{\alpha,\beta} \quad (3.7)$$

innerhalb einer Zustandsmenge mit  $m$  Elementen. Für die Cluster  $c_1$  und  $c_2$  (s. Kap 3.5 und 3.6) ergab sich  $\bar{h}_{di}^{c_1} = 2.06$ ,  $\bar{h}_{di}^{c_2} = 2.41$ . Wenn man die Beziehung zwischen  $q^{\alpha,\beta}$  und  $h_d^{\alpha,\beta}$ :

$$q^{\alpha,\beta} = 1 - \frac{2h_d^{\alpha,\beta}}{N} \quad (3.8)$$

bzw.

$$\bar{q}_{dx} = 1 - \frac{2\bar{h}_{dx}}{N} \quad (3.9)$$

benutzt ( $x$  bezeichnet  $i$  bzw.  $d$ ), bekommt man die Werte  $\bar{q}_{di}^{c_1} = 0.936$ ,  $\bar{q}_{di}^{c_2} = 0.925$ . Der gewichtete Mittelwert aus den beiden Größen ergibt  $\bar{q}_{di}^{c_1,c_2} = 0.929$ . Der Wert bestimmt das Maximum in der  $P(q)$ -Verteilung, das dem Overlap der Konfigurationen in den Clustern entspricht. Der Hammingabstand zwischen den beiden Clustern  $c_1$  und  $c_2$  ( $\bar{h}_{dd} = 24.83$ ) legt den Overlap  $\bar{q}_{dd}^{c_1,c_2} = 0.223$  fest. Der Overlap weist auf die Lage des zweiten Maximums hin. In Abb. 3.2; S. 18 stimmen die berechneten Werte und die Maxima sehr gut überein. Der Zusammenhang der Clusterstruktur und der  $P(q)$ -Verteilung ist eindeutig.

## 3.4 Aufbau und Definition der exakten Landschaft.

Wie kann man eine Energielandschaft erstellen, wenn die Information nicht vollständig bekannt ist? Zur Beantwortung dieser Frage klären wir zunächst, was aus physikalischer Sicht relevant ist. Die Struktur und ihr Einfluss auf die Physik des Modells hängt sehr stark mit der Dynamik zusammen, die wir bei Untersuchungen des Modells verwenden. In dieser Arbeit werden zwei numerische Realisierungen des dynamischen Verhalten verwendet: Metropolis und *waiting time method*, s. Kap. 4.2. Da es sich dabei in beiden Fällen um eine Spin-Flip Dynamik handelt, werden solche Objekte im Konfigurationsraum wesentlich, für die die Unterschiede zwischen einzelnen Konfigurationen die größte Rolle spielen. In diesem Abschnitt wird die exakte Landschaft charakterisiert und es werden die Möglichkeiten dargestellt, die einen Aufbau der Landschaft aus nicht kompletten Informationen ermöglichen.

### 3.4.1 Aufbau der exakten Landschaft

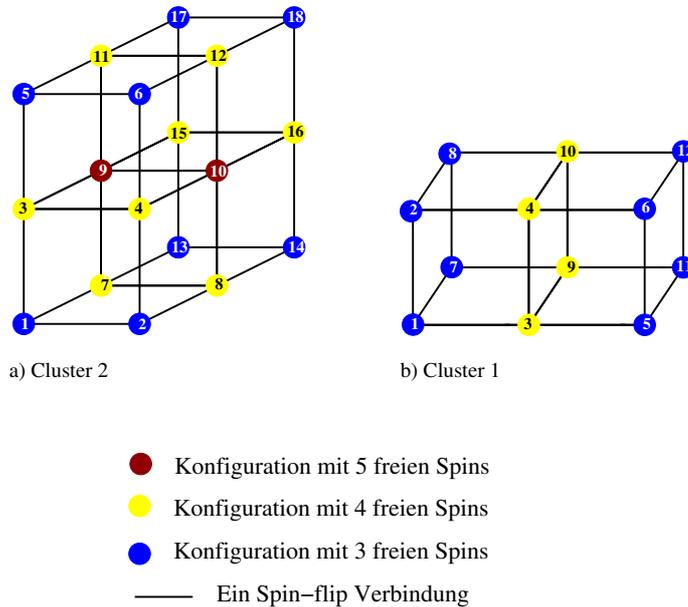
Die grundlegenden Bausteine jeder Landschaft sind Spinkonfigurationen im  $N$ -dimensionalen Konfigurationsraum. Damit hat jede Konfiguration jeweils  $N$  Nachbarn. Zwei Konfigurationen bezeichnet man als benachbart, wenn sie

sich nur durch die Richtung der Einstellung eines Spins unterscheiden. Von Interesse sind insbesondere diejenigen benachbarten Konfigurationen, die zu demselben Energieniveau gehören. Wenn man alle nötigen Konfigurationen identifiziert hat, kann man Verbindungen zwischen ihnen suchen und die Landschaftsstruktur aufbauen. Unter **Verbindung** versteht man einen möglichen Übergang zwischen zwei Konfigurationen, der durch das sukzessive Umdrehen jeweils eines Spins entsteht. Als Beispiel wurde das repräsentative System mit der Wahrscheinlichkeit  $p = 0.5$  für antiferro- und ferromagnetische Wechselwirkungen benutzt. Systeme mit anderen Werten der Wahrscheinlichkeit und die zugehörigen schematischen Landschaften wurden in [14, 13] untersucht. Es ist das Ziel, die Struktur der niederenergetischen Landschaft für einzelne Systeme exakt zu bestimmen und die allgemeinen Eigenschaften ihrer inneren Struktur zu verstehen. In  $\pm J$  Spinglas-Modellen mit Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn ist es möglich, auf natürliche Weise mikrokanonische **Cluster** zu definieren. Zwei Konfigurationen gehören zu demselben Cluster, wenn es möglich ist, von einer zur anderen durch eine Folge von einzelnen Spinflips überzugehen, ohne die Energie zu verändern. Ein Spin, dessen Umlappen keine Energieänderungen verursacht, nennt man **freien Spin**. Wenn ein Spin  $S_i$  frei ist, muss das effektive Feld verschwinden:

$$h_i^{eff} = \sum_j J_{ij} S_j = 0.$$

In der Literatur werden solche Cluster als *local ensemble of (ground) states* [50] bzw. als *funnel or cluster* [59] bezeichnet. Eine schematische Darstellung von zwei Grundzustandsclustern unseres Systems ist in Abb. 3.3; S. 21 zu sehen. Da wir uns im folgenden noch häufiger auf diese beiden Cluster beziehen werden, bezeichnen wir sie als c1 für Cluster 1 (12 Zustände) und c2 für Cluster 2 (18 Zustände). Die einzelnen Spinkonfigurationen sind durch einen Spinflip verbunden. Man sieht, dass sich z.B. Konfigurationen #1 und #18 im Cluster 1 durch die Einstellung von fünf Spins unterscheiden. Da es möglich ist, einen Weg zwischen beiden ohne Energieänderung zu finden, gehören sie zu demselben Cluster. Ein solcher Weg kann z.B. entsprechend  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 8 \rightarrow 14 \rightarrow 16 \rightarrow 18$  gebildet werden. (Diese einfache Darstellung eines Ausschnitts aus dem Konfigurationsraum ist nur dann möglich, wenn, wie im vorliegenden Fall, die maximale Anzahl von freien Spins in den Konfigurationen des Clusters nicht größer als 6 ist.)

Nachdem die Cluster bestimmt wurden, werden die Verknüpfungen zwischen einzelnen Clustern gesucht und die Cluster entsprechend gruppiert. Zwei Cluster sind verknüpft, wenn es wenigstens eine Konfiguration in einem Cluster gibt, die mit einer Konfiguration aus dem anderen Cluster verbunden ist. Da die Verknüpfungen zwischen Clustern einfach zu finden sind, besteht



**Abbildung 3.3:** Schematische Darstellung von Clustern im Konfigurationsraum. Jede Konfiguration kann maximal  $N$  Nachbar haben, im mikrokanonischen Cluster ist diese Anzahl durch die Nebenbedingung, dass alle Konfigurationen zur gleichen Energie gehören müssen, begrenzt. Cluster 1 (c1) enthält 12 und Cluster 2 (c2) enthält 18 Konfigurationen.

der größte numerische Aufwand im Auffinden der Cluster. Die schon besprochene *branch-and-bound* Methode liefert alle niederenergetischen Zustände, die dann nun geeignet gruppiert werden müssen. Die Kenntnis der Größe der Cluster ist notwendig, wenn man die Entropie berechnen will. Im nächsten Abschnitt werden zwei Methoden zum Aufbau des Clusters vorgestellt.

### 3.4.2 Aufbau des Clusters

Aufgrund der Spezifik des jeweils benutzten numerischen Verfahrens sind in manchen Fällen zunächst nur einige Konfigurationen bekannt, die zu einem Cluster gehören. In diesem Abschnitt wird auf das Problem eingegangen, wie man aus diesen möglichst umfassende Information über den zugehörigen Cluster gewinnen kann. Zu den wichtigsten Merkmalen gehören die Anzahl der Zustände im Cluster. Des weiteren möchte man oftmals herausfinden, ob eine zufällige Konfiguration zu einem Cluster gehört.

### Exakte Enumeration

Die Idee ist, in einer gefundenen Konfiguration alle freien Spins zu finden, und dann durch das Umklappen der Spins neue Konfigurationen zu erzeugen. Solch ein Verfahren erfordert den Vergleich aller Konfigurationen untereinander. Man kann jedoch die Anzahl der Vergleiche durch geeignete Gruppierung der Zustände minimieren und dadurch den Zeitaufwand verringern, siehe Anhang A; S. 79. Das Verfahren wird dadurch begrenzt, dass die Anzahl der Grundzustände [34, 24] mit der Größe des Systems exponentiell wächst.

### Ballistic search

Diese durch Hartmann [59] eingeführte Methode ermöglicht das Identifizieren der Cluster, obwohl man nicht alle Zustände kennt. Man kann auch die Größe der Cluster näherungsweise bestimmen. Die Grundidee benutzt einen Test, der prüft, ob zwei Konfigurationen zu demselben Cluster gehören. Wenn man zwei Zustände hat, sucht man alle freien Spins, durch die sich die Konfigurationen unterscheiden. Dann versucht man einen Weg zu finden, der die beiden verbindet, indem man freie Spins umdreht. Gelingt dies, dann gehören die Zustände zu demselben Cluster. Aufgrund der Analyse der maximalen Wege wird die Größe des Cluster abgeschätzt. Auf diese Weise wurde festgestellt, dass z.B. für 3D Systeme der Größe  $L = 8$  ein typischer Cluster aus  $\approx 10^{17}$  Zuständen besteht.

## 3.5 Charakterisierung der exakten Landschaft

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der genauen Beschreibung der Energielandschaft des repräsentativen Systems. Die Landschaft wird hier durch eine im Vergleich zu [14, 13] kompaktere Darstellung repräsentiert. Alle Kreisflächen und Punkte in Abb. 3.4; S. 23 bezeichnen Cluster. Die Fläche der Kreise ist proportional zur Anzahl der in ihnen enthaltenen Konfigurationen, jedoch wurde für unterschiedliche Energieniveaus eine unterschiedliche Skalierung verwendet. (Demzufolge werden im Grundzustand vier Cluster mit 12 bzw. 18 Zuständen gezeigt, die jedoch durch fast ebenso große Kreise dargestellt werden wie z.B. der größte in der ersten Anregung mit 819 Zuständen). Zwei Cluster sind durch Linien miteinander verbunden, wenn es in einem Cluster wenigstens einen Zustand gibt, der eine Verbindung mit wenigstens einem Zustand aus dem anderen Cluster hat. Man sagt, dass zwei Cluster (aus demselben Energieniveau) dieselbe **Konnektivität** aufweisen, wenn sie dieselben Verknüpfungen mit den Clustern aus anderen Energiestufen besitzen. Die Linien werden bezüglich der Energieniveaus geordnet, die sie verknüpfen:

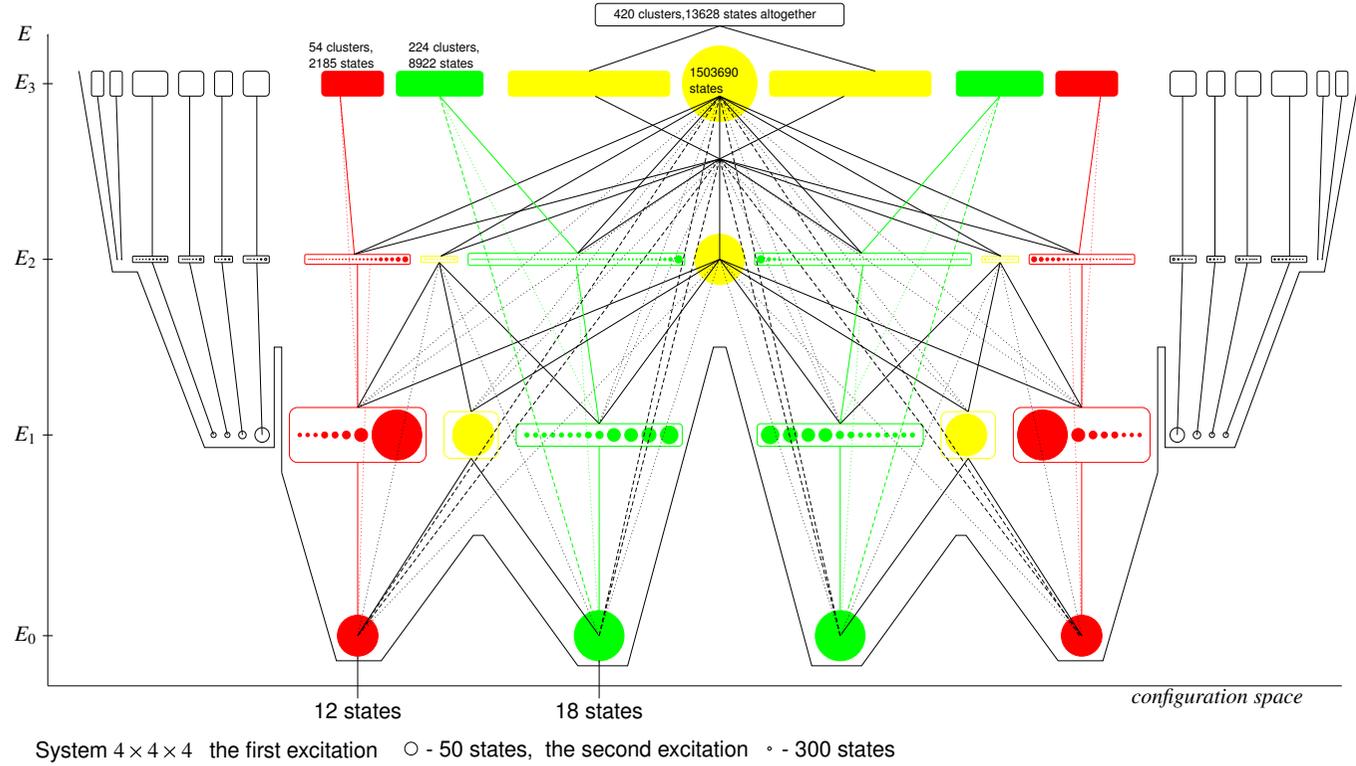


Abbildung 3.4: Schema der Energielandschaft des repräsentativen  $4 \times 4 \times 4$  Systems.

STÄRKE DER KONNEKTIVITÄT						
	$E_0$	$E_1$		$E_2$		$E_3$
Cluster		Tal	Sattelcl.	Tal	Sattelcl.	
c1 (12)	20	210	32	106	250	50
c2 (18)	33	255	120	198	294	251

**Tabelle 3.4:** Die Anzahl der Verbindungen zwischen den beiden Grundzustandcluster c1 und c2 und ihren Tal- und Sattelclustern in der höheren Anregungen. Ein Tal bezeichnet alle Cluster, die zu den Clustern im Grundzustand c1 bzw. c2 gehören. Sattelcl bezieht sich in der ersten Anregung ( $E_1$ ) nur auf den einen existierenden Sattelcluster, in der zweiten Anregung ( $E_2$ ) sind die Verbindungen zu beiden Sattelclustern berücksichtigt.

- durchgezogene - für benachbarte Energieniveaus,
- punktierte - für übernächste Energieniveaus,
- gestrichelte - verknüpfen Grundzustand und dritte Anregung.

Boxen beinhalten Cluster mit derselben Konnektivität. Eine Linie zwischen einer Box und einem einzelnen Cluster bedeutet, dass jeder Cluster aus der Box mit dem einzelnen Cluster verbunden ist.

Aus der Analyse der Konnektivität ergibt sich die Möglichkeit, Täler und Sattelcluster zu definieren. Diese Begriffe werden später im Zusammenhang mit der Diskussion der Dynamik benutzt. Die Definition eines Tales bezieht sich immer auf einen bestimmten Grundzustandscluster. Zu einem **Tal** gehören die Clusters, die mit **nur** einem Grundzustandscluster direkt oder indirekt (durch andere Cluster) verbunden sind. Ein **Sattelcluster** hat dagegen die Konnektivität mit mindestens zwei Grundzustandsclustern. In unserem Beispiel gibt es vier verschiedene Täler, von denen jeweils zwei spiegelsymmetrisch sind. Die unterschiedlichen Täler sind mit den Farben rot und grün gekennzeichnet. Gelb bezeichnet die Sattelcluster, die getrennte Täler verbinden. In der Tabelle 3.4 ist die Anzahl der Verbindungen zwischen den beiden Grundzustandsclustern c1 und c2 und den Tal- und Sattelclustern in den einzelnen Anregungen angegeben. Die Anzahl der inneren Verbindungen (zwischen den Konfigurationen in einem Cluster) für c1 und c2 ergeben sich auch aus der Darstellung Abb. 3.3; S. 21. Die meisten Verbindungen haben die beiden Cluster mit dem größten Cluster in der zweiten Anregung.

Die bei den Clustern und Boxen in Abb. 3.4; S. 23 angegebenen Zahlen beziehen sich auf die Anzahl der Zustände. Die Anzahl der insgesamt berechneten Zustände beträgt 1635796. Davon gehören zu den zwei größten Sattelclustern in der zweiten Anregung 82960 bzw. in der dritten Anregung

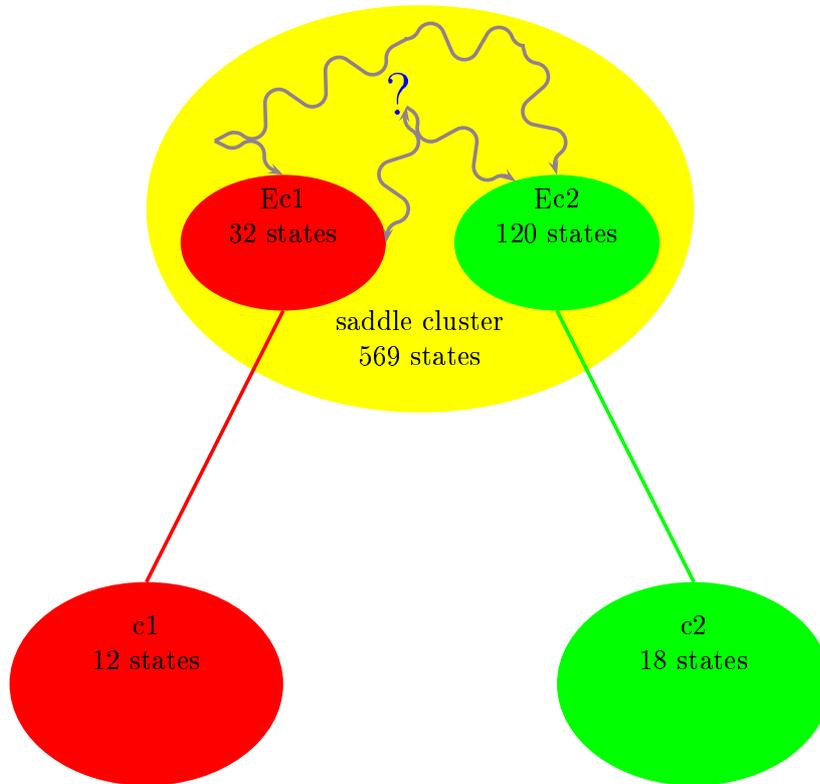
1503690 Konfigurationen. Der Übersicht halber wurden die Verbindungslinien von metastabilen Zuständen zu den beiden größten Sattelclustern nicht gezeichnet.

Im weiteren werden wir auf die Grundzustände und die erste Anregung näher eingehen.

## 3.6 Struktur der Sattelcluster

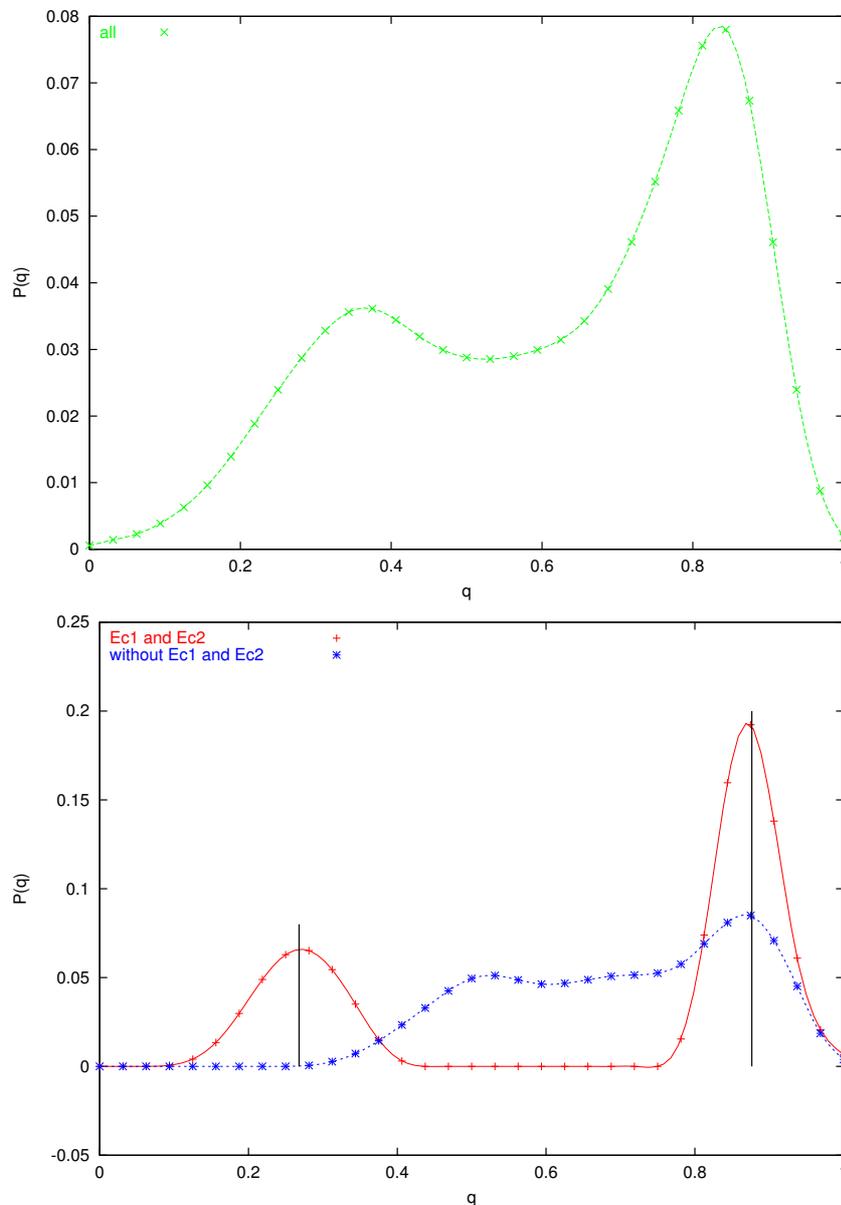
Sowohl die Existenz und die Struktur von Sattelpunkten als auch der Zusammenhang mit der Dynamik wurden in letzter Zeit intensiv erforscht [9]. In diesem Kapitel betrachten wir die innere Struktur des Sattelclusters. Schon in [14] wurde der Zusammenhang von Struktur und Dynamik gezeigt. Insbesondere wurde gefunden, dass die Sattelcluster nicht homogen sind, sondern eine innere Struktur aufweisen. Die schematische Struktur von Verbindungen zwischen den Grundzustandsclustern und dem Sattelcluster sehen wir in Abb. 3.5; S. 26. Zwei Bereiche Ec1 bzw. Ec2 im Sattelcluster werden hervorgehoben, die mit den Grundzustandsclustern c1 bzw. c2 direkt benachbarte Konfigurationen enthalten. Die Anzahl der Konfigurationen stimmt in den Ec1- und Ec2- Bereichen mit den Angaben der Tabelle 3.4 für die Stärke der Konnektivität zwischen Grundzustandscluster und Sattelcluster überein.

Zur Analyse der Struktur berechnen wir die Verteilung des Overlap  $P(q)$  für Sattelcluster. Der Unterschied zu dem Overlap aus den früheren Abschnitten besteht darin, dass sich die Verteilung nur auf die Konfigurationen des Sattelclusters bezieht, während früher alle Konfigurationen des Grundzustandes berücksichtigt wurden. Die Ergebnisse in Abb. 3.6; S. 27 (oben) zeigen, dass der Cluster in der Tat nicht homogen ist. Damit die Struktur deutlicher erkennbar wird, haben wir die Verteilung  $P(q)$  für drei verschiedene Konfigurationsmengen angegeben. Die erste Teilmenge enthält alle Zustände des Clusters (grün), die zwei anderen sind disjunkte Untermengen der ersten. In dem Fall der ersten Menge hat  $P(q)$  zwei Maxima. Das globale Maximum entspricht kompakten Bereichen (naheliegenden Konfigurationen), und die anderen gehören zu entfernten Konfigurationen. Wenn wir nur einen kompakten Bereich hätten, dann würden wir nur das erste Maximum sehen. An der Lage der beiden Bereiche Ec1 und Ec2 ist deutlich zu sehen, dass sie der Verteilung der beiden disjunkten Untermengen entsprechen. Die rote Kurve kennzeichnet die Verteilung der Untermenge, die nur aus den Konfigurationen der Mengen Ec1 und Ec2 besteht. Bei der Bestimmung der genauen Lage der Untermengen hilft uns die Analyse der Hammingabstände (vgl. Kapitel 3.3). Die inneren Werte  $\bar{h}_{di}$  für Ec1 und Ec2,  $\bar{h}_{di}^{Ec1} = 3.43$  und  $\bar{h}_{di}^{Ec2} = 4.09$ , ergeben den gewichteten Mittelwert  $\bar{q}_{di}^{Ec1, Ec2} = 0.876$ . Aus



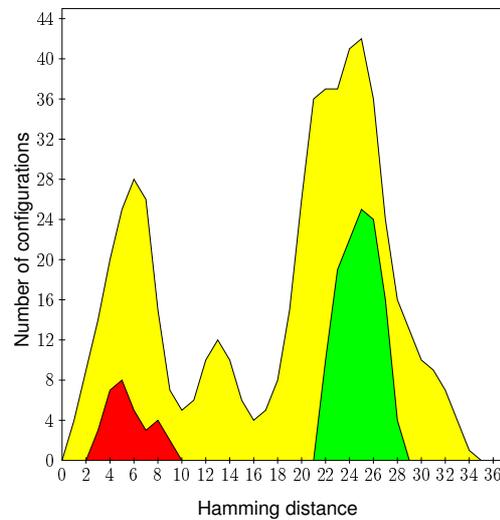
**Abbildung 3.5:** Schematische Struktur für die beiden Grundzustandscluster und den verbindenden Sattelcluster des repräsentativen Systems  $4 \times 4 \times 4$ . Ec1 und Ec2 bezeichnen jeweils Mengen von Konfigurationen im Sattelcluster, die eine direkte (“Ein-Spin-Flip“) Verbindung zu den Clustern c1 bzw. c2 haben.

dem Wert  $\overline{h}_{dd}^{Ec1, Ec2} = 23.43$  für den mittleren Hammingabstand zwischen den Mengen Ec1 und Ec2 wurde der Overlap  $\overline{q}_{dd}^{Ec1, Ec2} = 0.268$  berechnet. In Abb. 3.6; S. 27 (unten) werden die Werte für  $q$  dargestellt. Sie stimmen gut mit der Lage der Maxima überein. Das bestätigt, dass zu den zwei kompakten Gebieten vor allem die Konfigurationen der Mengen Ec1 und Ec2 beitragen. Das zweite Maximum liefert eine Information über die relative Entfernung der beiden Mengen Ec1 und Ec2. Ein anderes anschauliches Bild von der Struktur wird durch das Übergangsprofil Abb. 3.7; S. 28 vermittelt. Das Profil wird wie folgt berechnet: Erst bestimmen wir zwei Konfigurationen  $\alpha, \beta$  mit dem größten Wert  $h_d^{\alpha, \beta}$ . Danach wird einer der beiden Zustände als Bezugszustand gewählt, und  $h_d$  wird für alle Konfigurationen des Sattelclusters hinsichtlich dieses Bezugszustandes berechnet. Natürlich hängt das Bild von der Wahl des Bezugszustandes ab. Die Menge von Zuständen im Sattelcluster, die sich nur durch die Orientierung eines Spins von Zuständen in



**Abbildung 3.6:** Verteilung des Overlap für den Sattelcluster (alle Sattelzustände (oben); nur Zustände in Ec1 und Ec2 (unten, rot); alle Zustände außer denen in Ec1 und Ec2 (unten, blau)). Die senkrechten schwarzen Linien markieren  $\bar{q}_{dd}^{Ec1, Ec2} = 0.268$  und  $\bar{q}_{di}^{Ec1, Ec2} = 0.876$ , siehe Text.

den Grundzustandsclustern unterscheiden (Ec1 und Ec2), werden rot-(Ec1) und grün-(Ec2) markiert. Sie kennzeichnen einen Eingangsbereich für den Übergang vom ersten in das zweite Tal. Offensichtlich wird der Übergang auf Grund der kleinen Anzahl von Zuständen zwischen den

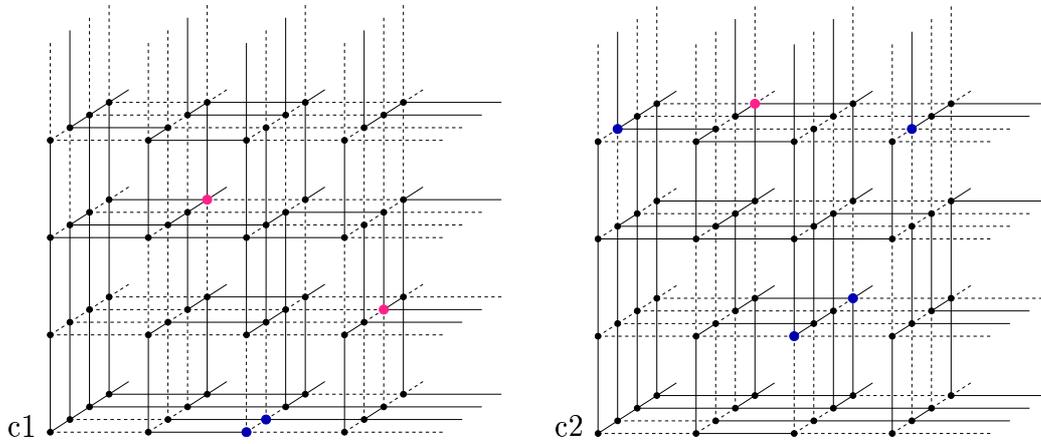


**Abbildung 3.7:** Übergangsprofil des Sattelclusters dargestellt als die Anzahl der Konfigurationen vs. Hammingabstand gemessen von einem Bezugszustand (siehe Text). Der gelbe Bereich markiert alle Zustände in dem Sattelcluster. Die Konfigurationen, die die Verbindung mit den Grundzustandsclustern haben, sind grün (Ec2) und rot (Ec1) gekennzeichnet.

Bereichen behindert, denn das System muss dabei diese Zustände berühren. Die Wahrscheinlichkeit, dass dies geschieht, verringert sich mit der Abnahme der Anzahl dieser Zustände.

### 3.7 Landschaft und Realraumbild

Die Struktur der Energielandschaft ist direkt mit dem Realraumbild verknüpft. Jeder Cluster wird durch eine Menge von Spinkonfigurationen gebildet. Vergleicht man diese Spinkonfigurationen miteinander, so stellt man fest, dass eine Untermenge aller Spins in jeder dieser Konfigurationen übereinstimmt. Die übrigen Spins können geflippt werden, ohne dass sich die Energie ändert. Ihre Anzahl und ihre gegenseitige Lage sind bestimmend für die Größe des Clusters. In Abb. 3.8; S. 29 sind diese freien Spins für die Cluster c1 und c2 des repräsentativen Systems ( $L = 4$ ) farbig gekennzeichnet. Mit der Farbe rot wird ein isolierter freier Spin markiert, der in allen Spinkonfigurationen des Clusters frei ist. Ein solcher Spin leistet den größten Beitrag zur Entartung; er führt zur Verdopplung der Anzahl der Zustände. Der blau gekennzeichnete Spin tritt nicht in allen Zuständen als frei auf und hat wenigstens einen anderen freien Spin als Nachbar. Solche Spins wirken aufeinander und bilden eine Gruppe benachbarter freier Spins

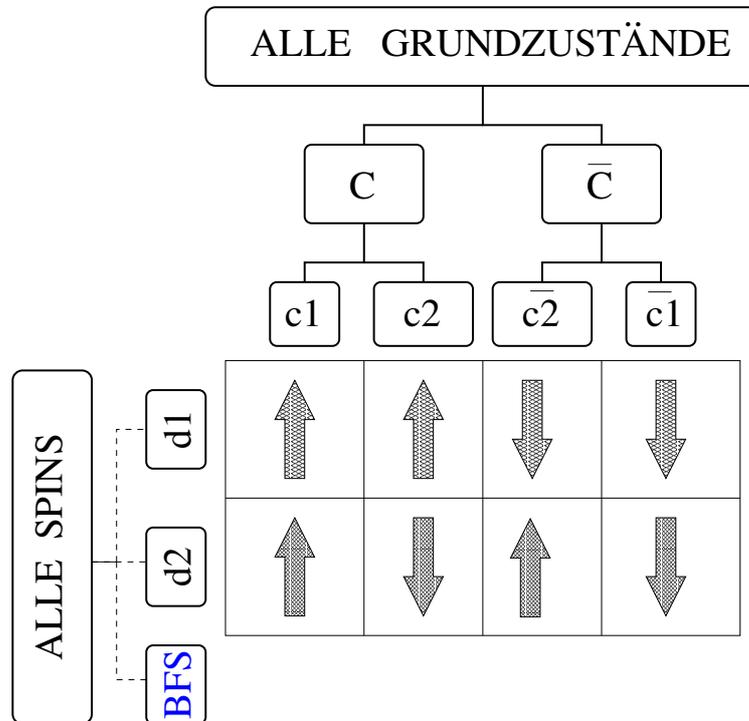


**Abbildung 3.8:** Darstellung des Wechselwirkungsgitters und der Lage der freien Spins für zwei Cluster des repräsentativen Systems nach [14]. Durch die Farbe blau werden die Spins in c1 (c2) gekennzeichnet, die in 8 (12) Konfigurationen als frei auftreten. Durch die Farbe rot werden die in allen Konfigurationen des Clusters als frei auftretende Spins gekennzeichnet.

(BFS), die dann zu einem Grad der Entartung führt, der pro Spin kleiner als zwei ist. Man kann den Entartungsgrad des gesamten Clusters  $n_{cl}$  durch die Entartungsgrade der einzelnen BFS ausdrücken:

$$n_{cl} = \prod_{i=1}^s g_i^k. \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnet  $s$  die Anzahl der in einem Cluster vorkommenden Typen von BFS und die Potenz  $k$  gibt an, wie oft ein bestimmter Typ in Cluster vorkommt. Unter  $g_i$  versteht man den Entartungsgrad des  $i$ -ten BFS. Eine Klassifizierung der BFS und die ausführliche Berechnung aller  $g_i$  bis zu 4 beteiligten Spins wird in Anhang B; S. 83 durchgeführt, vgl. auch [60, 13]. An dieser Stelle soll erwähnt werden, dass die BFS eine Untermenge der in [61] untersuchten ‘‘Gittertiere‘‘ darstellen. Die einfachste BFS-Struktur besteht aus einem einzelnen freien Spin (siehe Anhang B; S. 83 Struktur Nummer 1) mit  $g_1 = 2$ . Die nächst einfache Struktur besteht aus einer Kette von  $l$  Spins, in der anfangs nur einer frei ist. Das Umdrehen des Spins macht seinen Nachbarn frei. Das Umdrehen des Nachbarn macht den nächsten Spin frei, wobei der erste wiederum fixiert wird. Bei einer Spinkette der Länge  $l$  erhält man demzufolge den Entartungsgrad  $l + 1$ . Diese Eigenschaft hat Klotz [14] bei der Entropieabschätzung für Systeme mit unterschiedlichem Anteil ferromagnetischer Bindungen benutzt. Mit den Kenntnissen über die Entartungsgrade aus Anhang B; S. 83 kann man die Entartung der Cluster c1 und c2 des repräsentativen System berechnen (Abb. 3.8; S. 29). Im Cluster



**Abbildung 3.9:** Schematische Darstellung der Struktur der Grundzustände nach [62].  $d1$  und  $d2$  stellen die Spindomäne dar. Mit BFS bezeichnete Spins gehören keiner der Domänen an. Die Aufspaltung der Zustände in  $C$  und  $\bar{C}$  entspricht der Spiegelsymmetrie.

$c1$  tritt die Struktur  $k1d2$  zweifach und die Struktur  $k2d3$  einmal auf. Das ergibt

$$n_{cl1} = g_1^2 \cdot g_2 = 2^2 \cdot 3 = 12.$$

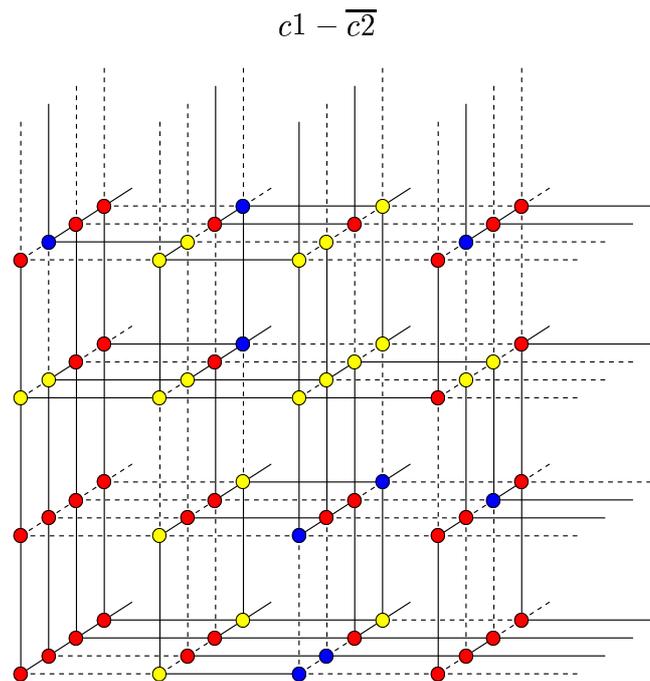
Für Cluster  $c2$  erhält man

$$n_{cl2} = g_1 \cdot g_2^2 = 2 \cdot 3^2 = 18.$$

Nachdem wir nun den Einfluss der freien Spins auf die Landschaftsstruktur kennen, kann man jetzt die Frage stellen, wie sich die bereits erwähnten festen Spins auf die Landschaftsstruktur auswirken. Vergleicht man die Menge aller festen Spins sowie deren Einstellung in verschiedenen Clustern, so fällt auf, dass sie sich ineinander überführen lassen. Dazu muss man eine Gruppe von Spins als Ganzes gegenüber dem Rest der festen Spins umdrehen. Diese räumlich kompakten Gruppen werden als Spindomänen bezeichnet [51]. In Abb. 3.9; S. 30 sind sie schematisch durch Pfeile ( $d1$  bzw.  $d2$ ) symbolisiert. Innerhalb einer jeder Spindomäne bleibt die Einstellung der Spins

relativ zueinander unverändert. Es lässt sich leicht erkennen, wie in diesem Fall vier Grundzustandscluster  $c_1, c_2, \overline{c_2}, \overline{c_1}$  durch die vier unterschiedlichen Einstellung der Spindomänen  $d_1$  und  $d_2$  entstehen. Die Entartung der Grundzustandscluster ergibt sich dann aus den schon zuvor diskutierten Einstellungsmöglichkeiten der freien Spins (BFS).

In Abb. 3.10; S. 31 ist die Situation im Realraum für das Beispiel des repräsentativen Systems ( $L = 4$ ) veranschaulicht. Dabei werden die Spineinstellungen in verschiedenen Cluster miteinander verglichen. Wenn die Richtung eines ausgewählten Spins in allen Zuständen beider Cluster übereinstimmt, so wird dieser rot markiert, wenn er in entgegengesetzte Richtung zeigt, wird er gelb markiert. Die restlichen Spins, die in manchen Zuständen der Cluster übereinstimmen und in anderen nicht, sind blau markiert. Ihre Existenz ist durch die BFS begründet. Die Darstellung in Abb. 3.10; S. 31 erlaubt es, die Spindomänen im Realraum zu identifizieren. In diesem Bild



**Abbildung 3.10:** Spindomänen im repräsentativen System. Man vergleicht die Richtungen der einzelnen Spins in den Clustern  $c_1, \overline{c_2}$ . Die blauen Punkten bezeichnen die freien Spins. Die gelben Punkte bezeichnen Spins, die in beiden Clustern in entgegengesetzten Richtungen stehen, entsprechend bezeichnen die roten Punkte Spins in gleicher Richtung.

erscheint die Domäne d1 gelb und die Domäne d2 rot. Von besonderem Interesse ist die Lage der freien Spins im Vergleich mit der Lage der Spindomänen. Sie liegen im Grenzbereich zwischen den beiden Domänen d1 und d2.

Schließlich sei bemerkt, dass eine kompliziertere Struktur des Grundzustands mit mehr als vier Clustern auftritt, sobald drei oder mehr Domänen existieren.

### 3.7.1 Der Fall $L = 6$

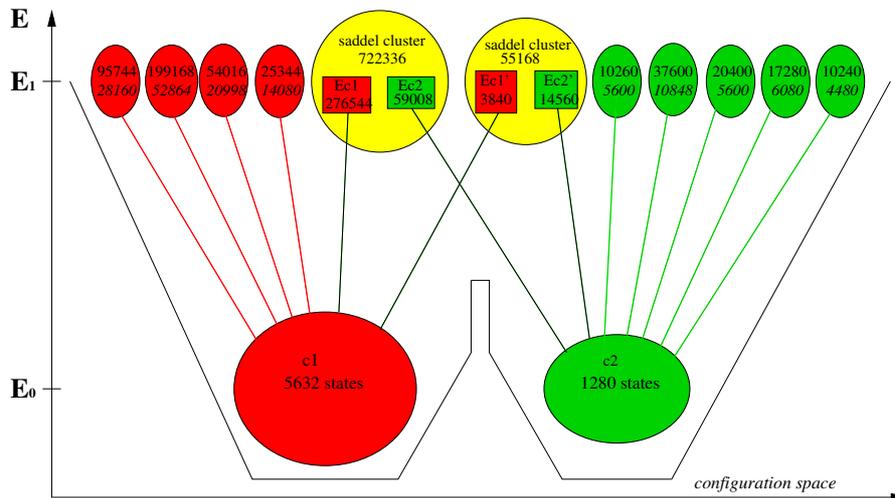
Eine einschneidende Beschränkung der bisher gemachten Aussagen über  $\pm J$  Spinglas-Modelle besteht in der Begrenzung auf kleine Systeme, die mit dem *branch-and-bound* Algorithmus untersucht werden können. Im folgenden werden daher Ergebnisse vorgestellt, die auf der Grundlage von *genetic cluster exact approximation* von A.K. Hartmann für ein System  $L = 6$  gewonnen wurden [42]. Ausgangspunkt bildete ein Datensatz bestehend aus 23 Grundzuständen und 99 Zuständen in der ersten Anregung. Dieser wurde uns vom Author zur Verfügung gestellt. Diese Konfigurationen wurden benutzt, um mit der Methode der exakten Enumeration (siehe Kapitel 3.4.1) die zugehörigen Cluster aufzubauen. Dann wurden alle gefundenen Cluster hinsichtlich ihrer Konnektivität geprüft. Auf diese Weise war es möglich, die in Abb. 3.11; S. 33 dargestellte Energielandschaft für das System zu finden. Hier wurde nur eine spiegelsymmetrische Seite der Energielandschaft des System dargestellt. Die Bedeutung aller Komponenten stimmt mit der in Abb. 3.4; S. 23 überein. Weiterhin muss beachtet werden, dass es aufgrund des verwendeten Verfahren nicht sicher ist, ob es sich um die vollständige Energielandschaft handelt. Die Zahlen geben die Anzahl der Konfigurationen im Cluster (oben) und die Anzahl der Verbindungen mit dem Grundzustand (unten) an. Im Vergleich zu der Landschaft  $L = 4$  treten hier zwei Sattelcluster in der ersten Anregung auf. In den Sattelclustern sind die Zahlen der Verbindungen mit Grundzuständen in entsprechenden Boxen hervorgehoben.

Die Analyse der Spindomänen und BFS im Grundzustand liefert hier das folgende Bild: Es existieren wieder zwei Spindomänen und demzufolge insgesamt vier Grundzustandscluster. In Abb. 3.12; S. 35 sind zwei Cluster des Systems (c1 und c2) dargestellt. Im Cluster c2 lassen sich drei bekannten BSF-Strukturen erkennen, s. Anhang B; S. 83: 1-mal k4d5, 5-fach k1d2 und 1-mal k4d8. Die Anzahl der Zustände ergibt sich somit zu  $n_{cl} = g_1^5 \cdot g_5 \cdot g_8 = 2^5 \cdot 5 \cdot 8 = 1280$  in Übereinstimmung mit der Clustergröße. Im Cluster c1 ist die Situation komplizierter, weil neben der bekannten BSF-Strukturen k3d4 und k1d2 eine weitere vorkommt, welche aus 10 Spins besteht. Da die Anzahl der Zustände im Cluster aus der exakten Enumeration bekannt ist, kann man den

Entartungsgrad für letztere berechnen:  $n_{cl} = 5632 = g_1^6 \cdot g_3 \cdot g_x = 2^6 \cdot 4 \cdot g_x \Rightarrow g_x = 22$ .

Aus dieser Analyse ergibt sich die interessante Frage, ob es möglich ist, alle BSF-Strukturen zu finden, die in den Grundzuständen auftreten können. Daraus ließe sich eventuell eine günstige Strategie entwickeln, um die Grundzustände zu finden.

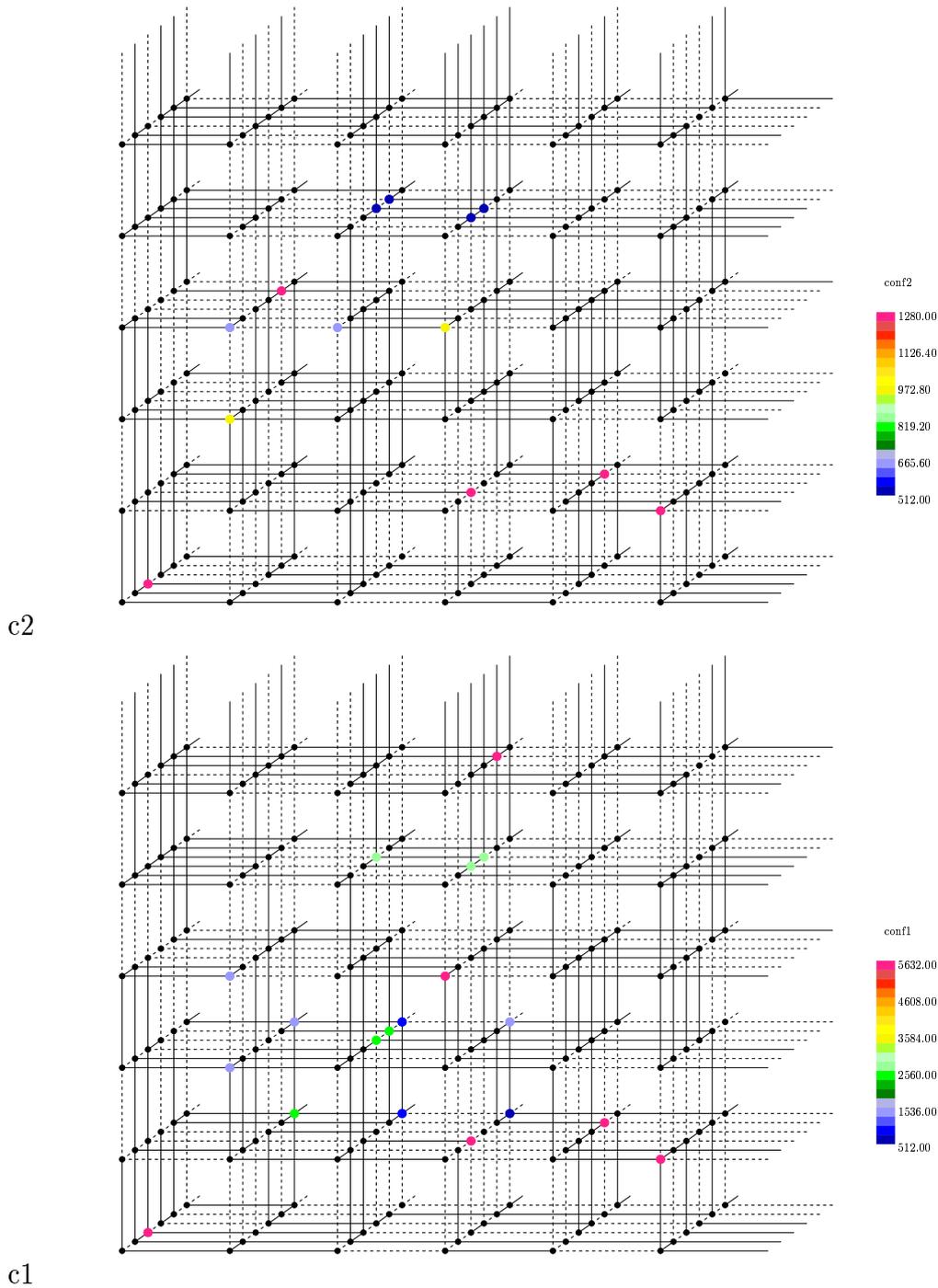
Wie im vorherigen Beispiel lassen sich die Spindomänen aus Abb. 3.13; S. 36 erkennen. Auffällig ist, dass eine der Domänen wesentlich kleiner ist als die andere, sie enthält nur neun Spins. Damit würde bei diesem Beispiel die in [62] angegebene Abschätzung erfüllt, dass die größte Domäne mehr als vier mal so groß ist wie die zweitgrößte. Verknüpft man die Aussagen aus Abb. 3.11 über die Energielandschaft mit der Realraumdarstellung in Abb. 3.12, so wird klar, dass der Übergang von einem Grundzustandscluster in den anderen über den Sattelcluster das komplette Umdrehen einer Spindomäne erfordert. Da für einen dynamischen Prozess ein solches Umdrehen stochastisch erfolgt, ist dafür eine große Zahl von Zeitschritten erforderlich, zumal das System bei tiefen Temperaturen dabei auf Wege im niederenergetischen Bereich der Energielandschaft beschränkt ist.



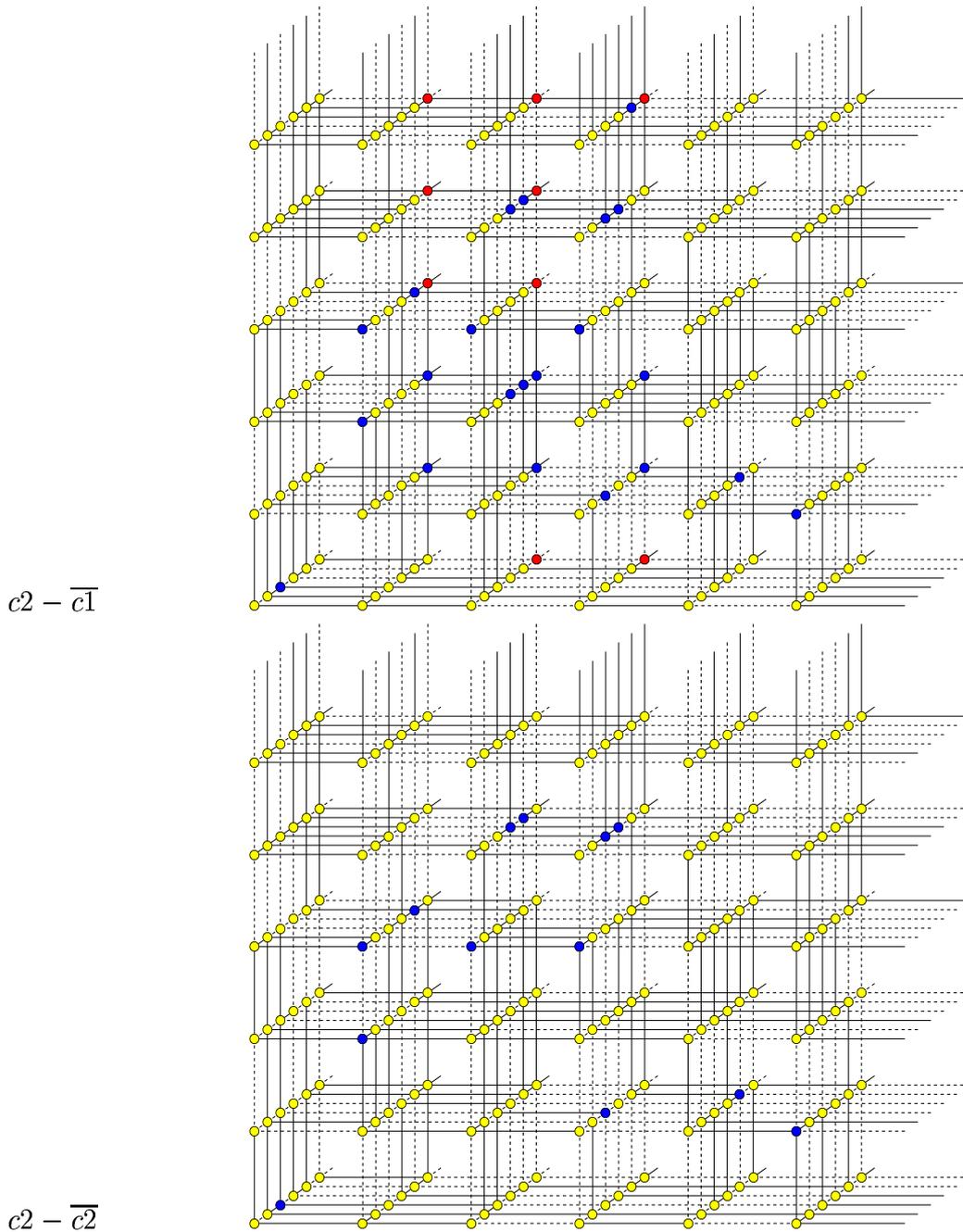
**Abbildung 3.11:** Die Energielandschaft für ein System  $L = 6$  bis zur ersten Anregung. Es ist nur die Hälfte aller Zustände ohne ihre Spiegelzustände dargestellt. Es existieren weiterhin metastabile Zustände in der ersten Anregung, diese sind jedoch nicht gezeigt.

### **3.7.2 Zusammenfassung**

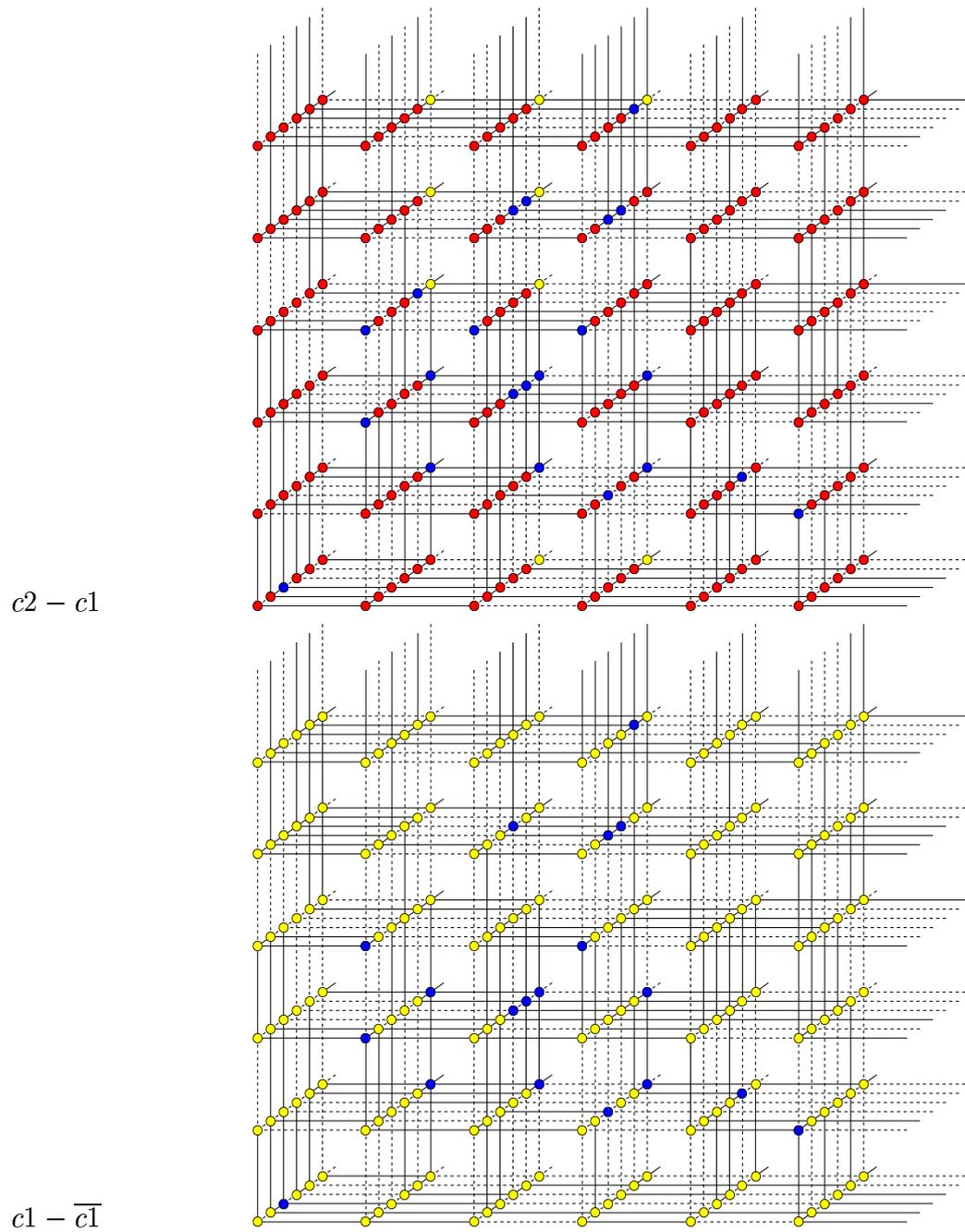
Wir haben gezeigt, dass die komplizierte Energielandschaft in einem engen Zusammenhang mit dem Realraumbild der Systeme steht. Spindomänen verursachen die Aufteilung des Konfigurationsraumes in Cluster. Die freien Spins und ihre gegenseitige Lage im Realraum bestimmen dagegen die Größe der Cluster.



**Abbildung 3.12:** Darstellung des Wechselwirkungsgitters und der Lage der freien Spins (BFS, farbig) für zwei Cluster des  $L = 6$  Systems. Durch die Farbskala wird die Anzahl der Konfigurationen markiert, in denen ein Spin als frei auftritt (z.B. bedeutet die Farbe rot, dass der Spin in allen Konfigurationen als frei auftritt).



**Abbildung 3.13:** Spindomänen im  $L = 6$  System analog zum Abb. 3.10; S. 31. Die Richtungen der einzelnen Spins in den Clustern  $c2$  mit  $\overline{c1}$  (oben) und  $c2$  mit  $\overline{c2}$  (unten) werden verglichen. Die blauen Punkte bezeichnen die freien Spins. Die gelben Punkte bezeichnen Spins, die in beiden Clustern in entgegengesetzten Richtungen stehen, entsprechend bezeichnen die roten Punkte Spins in gleicher Richtung.



**Abbildung 3.14:** Spindomäne im  $L = 6$  System analog zur Abb. 3.13; Vergleich der Cluster:  $c_1$  mit  $c_2$  (oben) und  $c_1$  mit  $\bar{c}_1$  (unten).



# Kapitel 4

## Dynamische Eigenschaften

### 4.1 Einleitung

Das Verhalten von Spingläsern wird grundlegend durch die Existenz von extrem langsamen Relaxationsprozessen bei tiefen Temperaturen bestimmt. In realen Spingläsern sind die Relaxationszeiten so groß, dass das Erreichen des Gleichgewichts in Labor- (und sogar geologischen) Zeitskalen unmöglich ist [63, 64]. Die Gleichgewichtseigenschaften untersucht man anhand von Modellen [65], dabei sind auch bei Computersimulationen sehr lange Rechenzeiten nötig. Zur Beschreibung der Dynamik wird die Korrelationsfunktion

$$q(t) = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle S_i(0)S_i(t) \rangle \quad (4.1)$$

benutzt.  $N$  gibt die Spinanzahl an,  $S_i$  die Position des  $i$ -ten Spins. Die Korrelationsfunktion ist identisch mit dem Overlap (3.2) zwischen zwei Zuständen, die zu verschiedenen Zeitpunkten gemessen werden. In den nächsten Abschnitten werden die numerischen Methoden beschrieben, die zur Untersuchung der Dynamik benutzt wurden. Danach wird die Relaxation der Korrelationsfunktion zum Gleichgewicht bestimmt und mit den Ergebnissen von Ogielski [65] verglichen. Insbesondere wird der Zusammenhang der Korrelationsfunktion mit der Energielandschaft untersucht sowie die Fluchtzeit aus energetischen Tälern bestimmt. Schließlich wird das Problem des Erreichens des Gleichgewichtes in geordneten antiferromagnetischen Systemen und ungeordneten Spinglas-Systemen diskutiert.

### 4.2 Numerische Methoden

Zur Untersuchung des dynamischen Verhaltens wurde die Monte-Carlo-Methode benutzt. Mit Hilfe dieser Methode wurden *random walks* im Konfigurationraum

durchgeführt, Fluchtzeiten aus energetischen Minima und die Korrelationsfunktionen bestimmt. Im allgemeinen wird ein System betrachtet, das sich mit dem Hamiltonian Gl. 2.1; S. 5 beschreiben lässt und sich in einem Zustand  $S$  befindet. Man beginnt mit einer zufälligen (oder gewählten) Konfiguration  $S^{start}$ , die während der Dynamik in andere Zustände übergeht  $S^{start} \rightarrow S^1 \rightarrow S^2 \rightarrow \dots$ . Die Grundidee besteht darin, eine solche Übergangsrate zwischen einzelnen Zuständen zu wählen, dass die Gleichgewichtseigenschaften des Systems durch die Boltzmannverteilung bestimmt werden:

$$P_{eq} = \frac{1}{Z} \exp(-\mathcal{H}(S)/k_B T). \quad (4.2)$$

Dabei ist  $Z$  die Zustandssumme  $Z = \sum_S \exp(-\mathcal{H}(S)/k_B T)$ . Eine solche Sequenz von Zuständen kann auch als ein Markoffscher Prozess betrachtet werden, in dem die einzelne Konfiguration mit der Wahrscheinlichkeit  $P_t(S)$  im  $t$ -ten Schritt auftritt. Die Zeitentwicklung ist durch die Mastergleichung gegeben:

$$P_{t+1}(S) = P_t(S) + \sum_{S'} \{w(S' \rightarrow S)P_t(S') - w(S \rightarrow S')P_t(S)\}. \quad (4.3)$$

Nach einer großen Anzahl von Schritten geht die Wahrscheinlichkeit  $P_t$  in eine stationäre Verteilung über. Man kann die Übergangsrate  $w(S \rightarrow S')$  so konstruieren, dass die stationäre Verteilung dem Gleichgewicht Gl. 4.2; S. 40 entspricht, d.h.

$$P(S) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_t(S) = P_{eq}$$

und jeder Summand auf der rechten Seite der Gleichung (4.3) verschwindet.

$$w(S' \rightarrow S)P_t(S') = w(S \rightarrow S')P_t(S) \quad (4.4)$$

Die Relation (4.4) nennt man *detailed balance*. Sie soll bei jedem dynamischen Prozess, der die stationäre Verteilung (also das Gleichgewicht) erreicht hat, erfüllt werden.

### 4.2.1 Metropolis Dynamik

Metropolis [66] hat folgende Übergangsrate vorgeschlagen:

$$w(S \rightarrow S') = \begin{cases} 1 & \text{für } \Delta\mathcal{H} \leq 0 \\ \exp(-\mathcal{H}(S)/k_B T) & \text{für } \Delta\mathcal{H} > 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(S') - \mathcal{H}(S)$  ist die Energiedifferenz zwischen dem neuen  $S'$  und dem alten Zustand  $S$ . Es lässt sich zeigen, dass diese Übergangsrate im

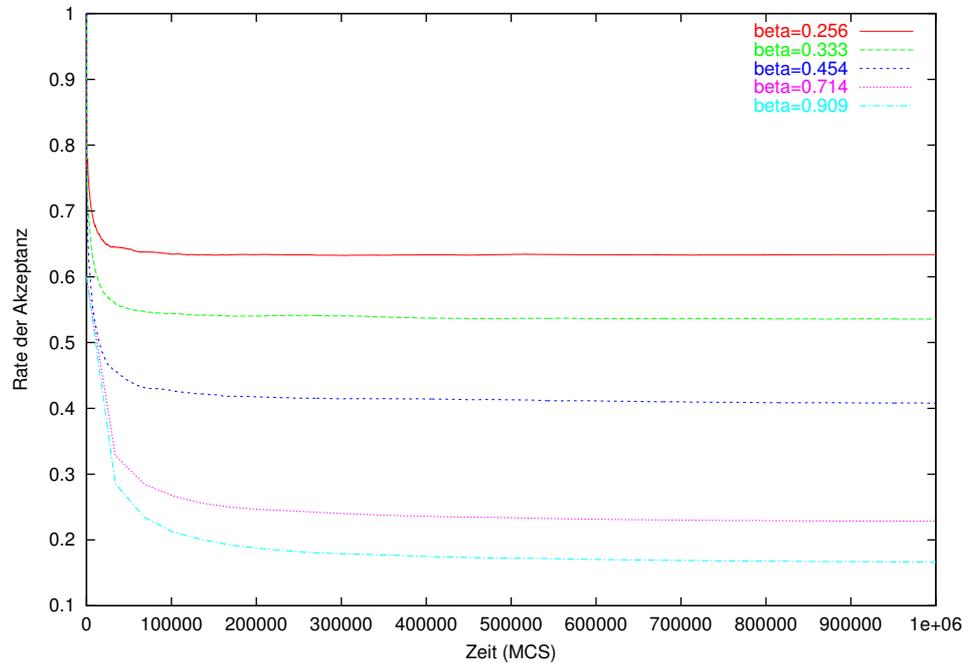
Gleichgewicht die Bedingung *detailed balance* erfüllt. Bei Anwendungen auf  $\pm J$  Spingläser nutzt man für die Dynamik den folgenden Algorithmus, dabei bezeichnet  $T$  die Temperatur und  $N_{schr}$  die Anzahl der durchzuführenden Monte Carlo Schritte:

```

Algorithmus Metropolis( $T, N_{schr}$ )
begin
  t=0;
   $S = S^0$ ;           wählt eine Anfangskonfiguration
  while(  $t < N_{schr}$  )
    begin           Anfang neues MC-Schritts
       $i = random(1, N)$ ;   wählt zufällig einen Spin
       $S'_i = -S_i$ ;         erzeugt einen neuen Zustand
       $\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(S') - \mathcal{H}(S)$ ;
      if  $\Delta \mathcal{H} \leq 0$  then
         $p = 1$ ;
      if  $\Delta \mathcal{H} > 0$  then
         $p = exp(-\Delta \mathcal{H}/k_B T)$ ;
       $r = random(0, 1)$ ;   wählt eine Zufallszahl zwischen 0 und 1
      if  $r \leq p$  then
         $S = S'$ ;         akzeptiert den neuen Zustand
      else
         $S = S$ ;           lehnt den neuen Zustand ab
       $t = t + 1$ ;
    end           Ende eines MC-Schritts
  end

```

Ein Monte-Carlo Metropolis Schritt (MC) ist als das Durchführen einer Periode in der Schleife **while** definiert. (MC wird im folgenden als Zeiteinheit benutzt, MCS bezeichnet einen Monte-Carlo Schritt pro Spin.) Die dargestellte Methode ist für kleine Temperaturen sehr rechenzeitaufwändig, weil für diese die Anzahl der neuen akzeptierten Zuständen (*updates*) sehr gering ist. Man kann sich davon am Beispiel eines zweidimensionalen Spinglas-Systems überzeugen. Das Verhältnis der Anzahl der akzeptierten Zustände zu allen neu erzeugten (also zur Anzahl aller Monte Carlo Schritte) ist in Abb. 4.1; S. 42 für den Metropolis Algorithmus als Rate der Akzeptanz dargestellt. Die geringe Akzeptanzrate wird physikalisch dadurch begründet, dass das System in ein lokales Minimum fällt und dort viel Zeit verbringt.



**Abbildung 4.1:** Rate der Akzeptanz - das Verhältnis der Anzahl der akzeptierten Zustände zu allen neu erzeugten für verschiedene  $\beta$  eines 2D Spinglass-Modells ( $N = 70 \times 70$ ) vs. MCS. Die Anzahl der neu akzeptierten Zustände fällt stark mit wachsendem  $\beta$ .

#### 4.2.2 Waiting Time Method (WTM)

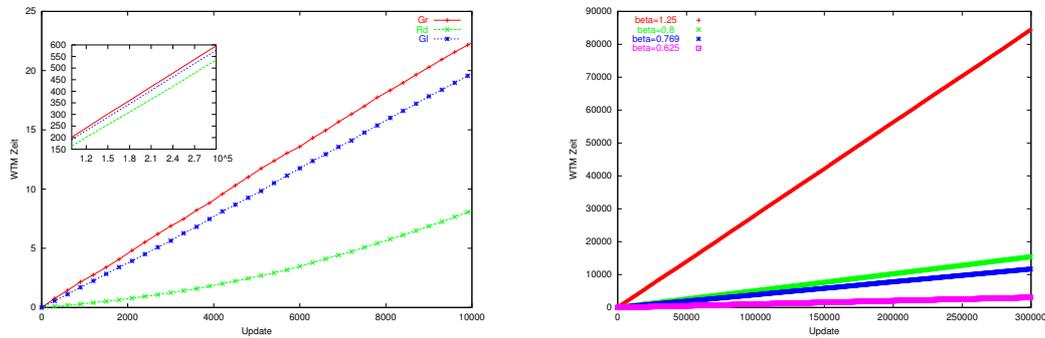
Die Methode wurde von Dall und Sibani [67] für Spingläser eingeführt. Sie eignet sich besonders für Simulationen bei tiefen Temperaturen. Die Übergangswahrscheinlichkeit wurde so gewählt, dass die stationäre Verteilung im Gleichgewicht die Boltzmann-Verteilung ergibt. Der große Vorteil besteht darin, dass bei jedem Schritt ein Spin umgedreht wird. Jedem Spin wird eine Wartezeit aus einer exponentiellen Verteilung mit dem Mittelwert  $\tau_i = \max(1, \exp(\Delta\mathcal{H}(S_i)/T))$  zugeschrieben.  $\Delta\mathcal{H}(S_i)$  ist gleich der Energiedifferenz der beiden Zustände vor und nach dem Flip des  $i$ -ten Spins. Der Spin mit der kleinsten Wartezeit wird gesucht und gedreht. Der Wert der Wartezeit wird als globale Zeit  $t_{global}$  benutzt. Nach dem Flip werden für alle Nachbarn des Spins und für ihn selbst neue Wartezeiten berechnet. Der größte Rechenaufwand wird bei der Suche der kleinsten Wartezeit benötigt. Die in den vorherigen Abschnitt eingeführte Rate der Akzeptanz bleibt immer gleich Eins.  $N_{schr}$  als Schrittzahl der Simulationen wird im folgenden auch als WTM-Zeit bezeichnet. Es ist interessant, die Ergebnisse der Simulationen für die beiden Methoden (WTM und Metropolis) zu vergleichen, s.

<b>Algorithmus</b> WTM( $T, N_{schr}$ )	
<b>begin</b>	Auswahl
$S = S^0;$	einer Anfangskonfiguration
<b>for</b> $i = 0$ <b>to</b> $N$	
$\tau_i = \max(1, \exp(\Delta\mathcal{H}(S_i)/T));$	initialisiert die Wartezeiten
$t_i = -\tau_i \log X_i;$	$X_i$ - Zufallszahl aus einer
<b>while</b> ( $t < N_{schr}$ )	gleichmäßigen Verteilung
<b>begin</b>	
<b>if</b> $\wedge_{t_i} t_k \leq t_i$ <b>then</b>	sucht Spin mit der kleinsten
$S_k = -S_k;$	Wartezeit und dreht ihn um,
$t_{global} = t_k;$	aktualisiert die globale Zeit
<b>for</b> $i \in k$ und ihren Nachbarn	
$\tau_i = \max(1, \exp(\Delta\mathcal{H}(S_i)/T));$	aktualisiert die Wartezeit
$\delta_i = -\tau_i \log X_i;$	für den gedrehten Spin und
$t_i = \delta_i + t_{global};$	seine Nachbarn
<b>end</b>	
<b>end</b>	

Tab. 4.1. Die Anfangszustände wurden zufällig auf solche Weise ausgewählt, dass die Energie größer als Null ist. Die Übereinstimmung der beiden Methoden ist sehr gut, da der gleiche Mittelwert gefunden wird. Leider ist es nicht einfach, die WTM-Zeit mit der MC-Zeit zu vergleichen. Die gemessene Zeit bei WTM wächst im Gleichgewicht proportional mit der Anzahl der *updates*. Bei der Relaxation ist die Abhängigkeit jedoch nicht immer linear. In

$\beta$	WTM	METROPOLIS
0.256	$-2811 \pm 127$	$-2805 \pm 29$
0.333	$-4012 \pm 130$	$-4006 \pm 32$
0.454	$-7546 \pm 200$	$-7566 \pm 43$
0.555	$-9115 \pm 90$	$-9107 \pm 22$
0.625	$-9447 \pm 60$	$-9449 \pm 16$
0.714	$-9641 \pm 40$	$-9643 \pm 11$
0.769	$-9702 \pm 32$	$-9702.5 \pm 8.4$
1.1	$-9793.86 \pm 7.70$	$-9793.24 \pm 1.95$
1.25	$-9798.40 \pm 3.70$	$-9796.55 \pm 1.13$

**Tabelle 4.1:** Vergleich der Gleichgewichtsenergie für verschiedene Werte des Parameters  $\beta$  für Metropolis Algorithmus und Waiting Time Method für ein  $2D$  antiferromagnetisches System  $L = 70$  (Grundzustandsenergie  $E_0 = -9800$ ). Als Anfangszustand wurde eine zufällige Konfiguration mit einer Energie  $> 0$  gewählt. Es wurde über 50 verschiedene Läufe gemittelt.

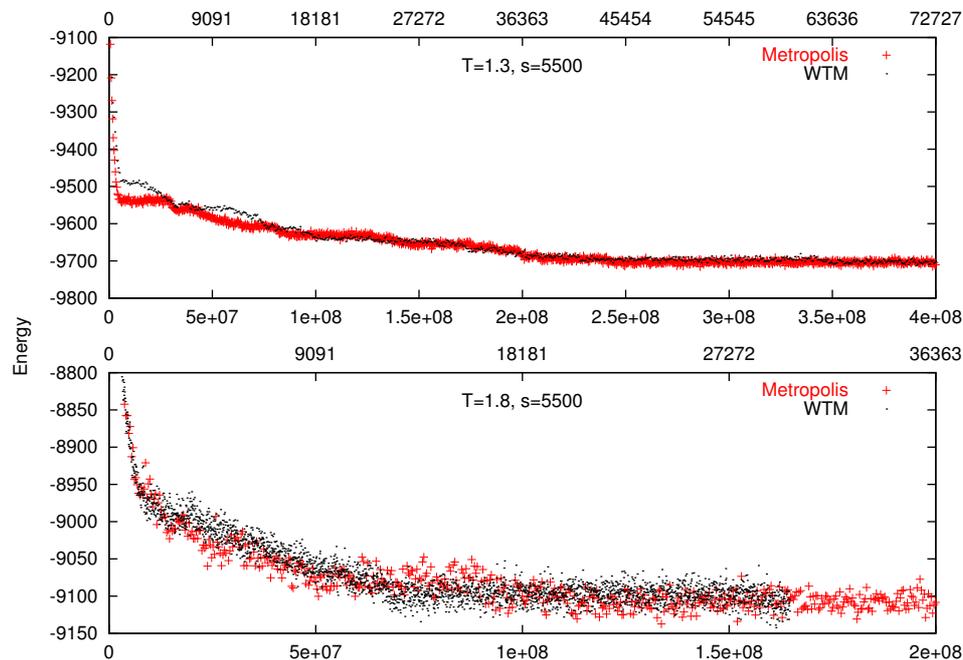


**Abbildung 4.2:** Die Abhängigkeit der WTM-Zeit von der Anzahl der *updates* für 2D Ising System mit  $N = 70 \times 70$  Spins: geordnetes antiferromagnetisches System für verschiedene  $\beta$  (rechts);  $\pm J$  Spinglas für  $\beta = 1.25$  (links) in Abhängigkeit vom gewählten Anfangszustand; rot - höhere Anregung, grün - Grundzustand, blau - Gleichgewichtszustand für  $\beta = 1.25$ .

Abb. 4.2; S. 44 ist das Verhalten für ein geordnetes antiferromagnetisches und ein Spinglas-System dargestellt. Für das geordnete System (rechtes Bild) sind die Kurven für verschiedene  $\beta$  gezeigt. Bei höherem  $\beta$  wächst die WTM Zeit schneller als bei kleineren, dies kann auf die Berechnungsweise der Wartezeit zurückgeführt werden. In dem linken Bild sind die Kurven für ein Spinglas gezeigt. Die blaue Kurve bezeichnet ein System im Gleichgewicht, die grüne strebt nach den Gleichgewicht von einem zufällig gewählten hochenergetischen Zustand und die rote startet von einem Grundzustand. Obwohl die Simulationen für dasselbe  $\beta$  durchgeführt sind, stellt man deutliche Unterschiede fest. Die Lage im Konfigurationraum beeinflusst das Verhalten.

### 4.2.3 Vergleich von Metropolis- und WTM- Zeit

In diesem Abschnitt werden die Zeiten der Simulationen bei der Metropolis- und WTM-Dynamik verglichen. Da die meisten Leser mit der Metropolis-Zeit vertraut sind, zeigen wir für einige Beispiele, wieviel Metropolis Schritte (MC) für eine WTM-Zeiteinheit (WS) benötigt würden. Es zeigt sich, dass das Verhältnis  $s = MC/WS$  unabhängig von der Temperatur der Simulationen ist und nur mit der Größe des Systems zusammenhängt. In Abb. 4.3; S. 45 ist die Relaxation der Energie für ein antiferromagnetisches System mit  $N = 70 \times 70$  gezeigt. Die roten Punkte stellen die Ergebnisse der Metropolis-, die schwarzen der WTM-Dynamik dar. Der Parameter  $s$  ist so gewählt, dass sich die beiden Kurven möglichst gut überlappen. Für dieses Beispiel ergibt sich  $s = 5500$ . Derselbe Wert wurde bei einem Spinglas-System derselben Größe gefunden. Für ein Spinglas-System mit  $N = 6 \times 6 \times 6$  ergab sich  $s = 200$  (Abb. 4.4; S. 46), für ein solches mit  $N = 8 \times 8 \times 8$  ent-

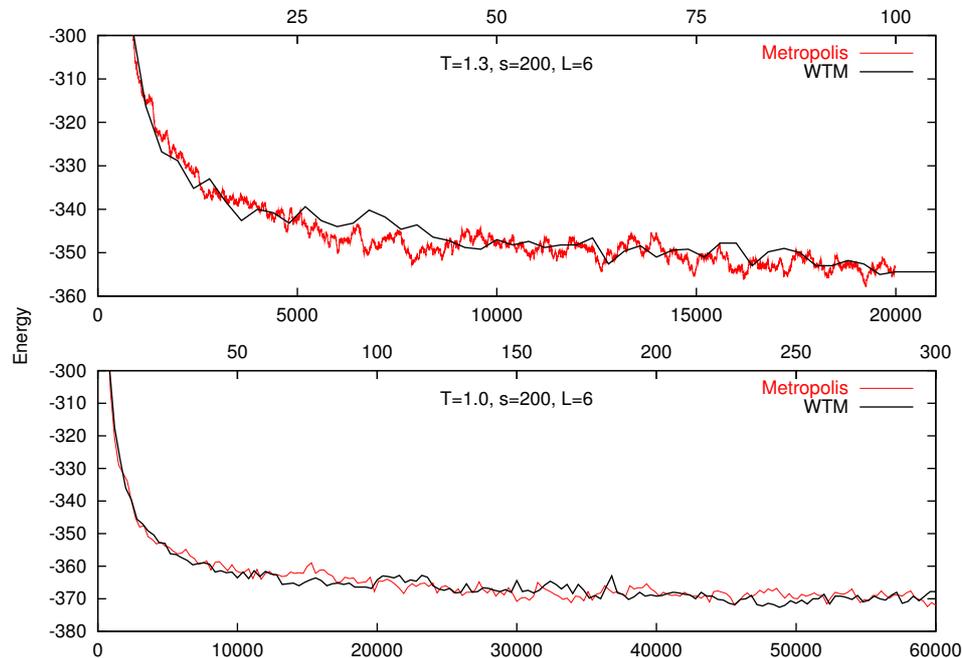


**Abbildung 4.3:** Vergleich der Relaxationszeiten (Energie vs. Zeit) bei einem geordneten antiferromagnetischen  $70 \times 70$  System für  $T = 1.3$  (oben) und  $T = 1.8$  (unten); obere Abszisse - WTM- Zeit, untere Abszisse - Metropolis Zeit (MC);  $s = 5500$  für beide Temperaturen, siehe Text.

sprechend  $s = 500$ . Obwohl die Abschätzung des Parameters relativ grob ist, ermöglicht sie es zu ermitteln, wieviel Metropolis-Schritte nötig wären, um dieselbe Energie zu erreichen, zu der man bei der angegebenen Anzahl der WTM Schritte gelangt. Aus den Ergebnissen kann schließen, dass ein WTM-Schritt ungefähr einem MC Schritt pro Spin entspricht.

#### 4.2.4 Zufallszahlengenerator

Der während aller Simulationen in der Arbeit gebrauchte Zufallsgenerator wurde von Marsaglia, Zaman und Tsanaga in [68] angegeben. Die C Implementation des Generators wurde aus [69] übernommen. Nach Angabe der Autoren erfüllt er alle bekannten statistische Tests. Die Periode des Generators beläuft sich auf  $2^{144}$  und ist somit für die Simulationen vollkommen ausreichend.



**Abbildung 4.4:** Vergleich der Relaxationszeiten (Energie vs. Zeit) bei einem ungeordneten 3D Spinglas-System ( $N = 6 \times 6 \times 6$ ) für  $T = 1.3$  (oben) und  $T = 1.0$  (unten); obere Abszisse - WTM- Zeit, untere Abszisse - Metropolis Zeit (MC);  $s = 200$  für beide Temperaturen, siehe Text.

### 4.3 Relaxation der Korrelationsfunktion

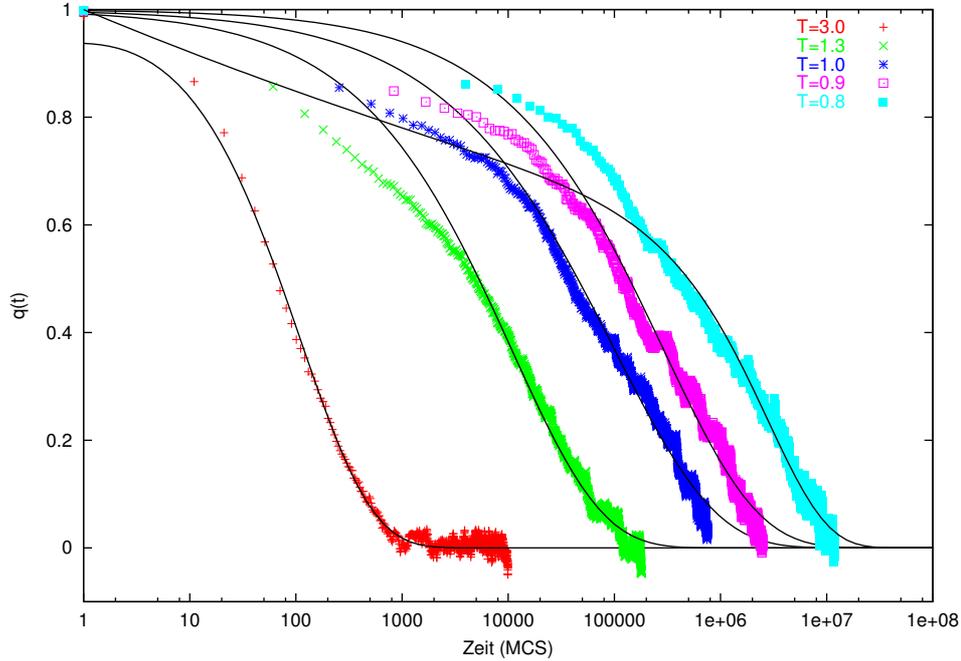
Komplexe Systeme weisen im allgemeinen eine nicht-exponentielle Dynamik auf. Kohlrausch hat schon 1854 einen phänomenologischen Ausdruck

$$Q(t) = C \exp(-(t/\tau)^\beta) \quad 0 < \beta < 1 \quad (4.6)$$

zur Beschreibung der Relaxation der Ladung in Kondensatoren (“Leidener Flasche“) angegeben. Seit William und Watts [70] wird die Beziehung (4.6) für dielektrische Relaxation benutzt und als KWW-Gesetz oder *stretched exponential law* bezeichnet. Verschiedene Anwendungen der Beziehung wurden von Phillips [8] beschrieben. Es scheint, dass diese Art von Relaxation in der Natur häufiger auftritt als die übliche Debyesche exponentielle Form ( $\beta = 1$ ) [71, 72].

Das dynamische Verhalten in  $3D \pm J$  Spingläsern wurde von Ogielski [65] genauer untersucht. Er fand heraus, dass die Korrelationsfunktion (4.1) im Gleichgewicht dem Gesetz

$$q(t) = C \exp(-(t/\tau)^\beta) t^{-x} \quad (4.7)$$

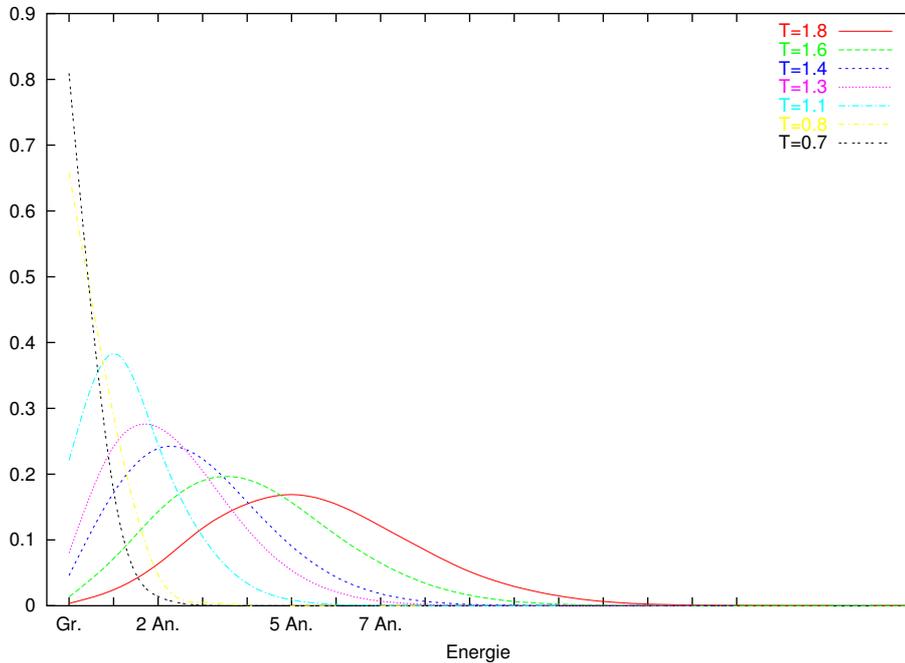


**Abbildung 4.5:** Die Relaxation der Korrelationsfunktion für das repräsentative System  $N = 4 \times 4 \times 4$ . (Zeiteinheiten in Monte Carlo Schritten pro Spin.)

genügt, wenn die Temperaturen größer als die Spinglas-Übergangstemperatur ( $T_{sg}$ ) sind. (Der Faktor  $t^{-x}$  ist unerheblich [8].) In der Spinglasphase folgt das Verhalten dem Potenzgesetz

$$q(t) = C t^{-x}. \quad (4.8)$$

Die Gesetze gelten für hinreichend große Systeme mit wenigstens  $N = 16^3$  Teilchen. Die Exponenten  $x(T)$  und  $\beta(T)$  sind temperaturabhängig. Ogielski zeigte, dass für die Exponenten gilt:  $\beta(T) \rightarrow 1$  bei hoher Temperaturen und  $\beta(T) \rightarrow \beta(T_{sg})$  bei  $T \rightarrow T_{sg}$ . Für die kleineren Systeme können verschiedene Abweichungen vorkommen. Glotzer et al. [73, 74] haben gezeigt, dass das *stretched exponential law* im 2D und 3D aus der Überlagerung verschiedener nicht-exponentieller Gesetze folgt, denen die einzelnen Spins  $i$  unterliegen. Dabei kann man Regionen unterscheiden, die schneller oder viel langsamer als das gesamte System relaxieren. Die Regionen können natürlich mit verschiedenen Spingruppen aus Kap. 3.7 zusammenhängen und damit auch mit Tälern in der Energielandschaft. Das ist jedoch bisher noch nicht gezeigt worden. Für das repräsentative System haben wir die Korrelationsfunktion für



**Abbildung 4.6:** Verteilung der Energie im Gleichgewicht in Abhängigkeit vom Anregungsspektrum für ein Spinglas-System mit  $N = 4 \times 4 \times 4$  (Gr - Grundzustand; An - Anregung). Die Ordinatenwerte geben die Häufigkeiten für die Besetzung der Energieniveaus an. Die diskreten Werte des Spektrums werden jeweils durch Kurven verbunden.

fünf Temperaturen dargestellt. Anfangs wurde das System von einem zufälligen Zustand ins Gleichgewicht gebracht. (Für die kleinen Systeme erreicht man das Gleichgewicht relativ schnell für das ganze Temperaturspektrum, siehe Kapitel 4.5.) Dann wurde die Korrelation gemessen. Die Ergebnisse wurden über 100 verschiedene Läufe gemittelt. In Abb. 4.5; S. 47 sind die Ergebnisse dargestellt. Für die Temperaturen  $T = 0.8, 1.3$  erwies sich die Formel (4.7) und für  $T = 3.0, 1.0, 0.9$  die Formel (4.6) als die beste Anpassungsfunktion. Man beobachtet Abweichungen vom *stretched exponential* Verhalten für  $T < 0.9$ . Auch das Potenzgesetz liefert keine bessere Anpassung bei dieser Temperatur. Offenbar kommen hier Endlichkeiteffekte ins Spiel. In Abb. 4.6; S. 48 ist die Verteilung der Energie in Abhängigkeit vom Anregungsspektrum für verschiedene Temperaturen dargestellt. Für  $T < 0.8$  befindet sich das System fast immer im Grundzustand und in den ersten beiden Anregungen.

Für das 2D Spinglas-Modell ( $N = 70 \times 70$ ) ist die Korrelationsfunktion in

a					
T	3.0	1.3	1.0	0.9	0.8
$\tau$	91.39	10824	100849	292040	$3.146e + 06$
$\beta$	0.601	0.511	0.456	0.491	0.809
$x$	0.036	1	1	1	0.035

b					
T	2.0	1.1	1.0	0.8	0.7
$\tau$	12981	387245	$1.12e + 06$	$4.12e + 06$	$3.87426e + 08$
$\beta$	0.551	0.292	0.259	0.173	0.151841
$x$	1.081	1.091	1.081	1.325	1.0723

**Tabelle 4.2:** Werte der Parameter der Anpassung für das nicht-exponentielle Verhalten (4.6) der Korrelationsfunktion (a - repräsentatives System; b - 2D Spinglas-Modell  $L = 70$ ).

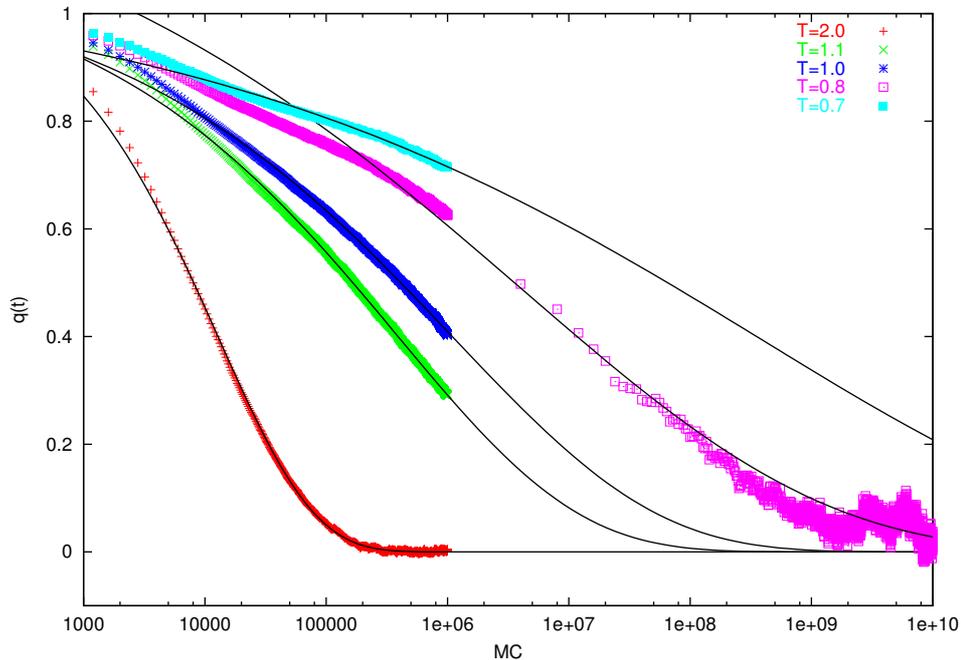
Abb. 4.7; S. 50 dargestellt. Sie folgt dem *stretched exponential* Gesetz (4.6). Die Tabelle 4.2 gibt Auskunft über die Parameter der Anpassung.

## 4.4 Die Tal- und Sattelcluster-Dynamik

Die Dynamik hängt eng mit einer komplexen Struktur der Energielandschaft zusammen. Auf der Basis einer genauen Kenntnis der Energielandschaft für niedrige Temperaturen (s. Kapitel 1) soll nunmehr die Dynamik des Systems untersucht werden und gleichzeitig dabei seine Wanderung durch den Konfigurationsraum betrachtet werden. Dabei ist es das Ziel, ein tieferes Verständnis der physikalischen Phänomene zu gewinnen, indem das Verhalten des Systems von einem mikroskopischen Gesichtspunkt beschrieben wird.

### 4.4.1 Flucht aus einem Tal.

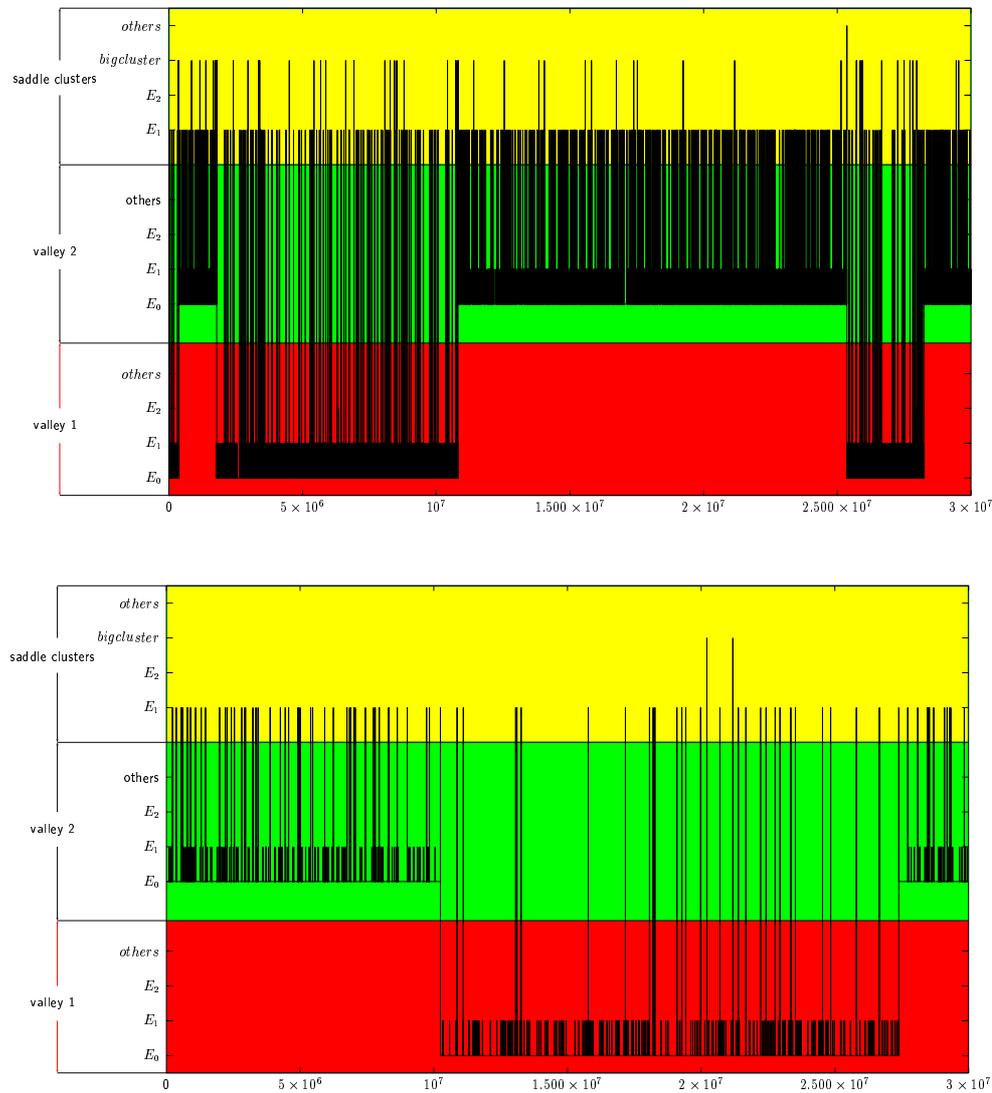
In diesem Abschnitt studieren wir das Verhalten der Korrelationsfunktion bei tiefen Temperaturen. Aus Abb. 4.6; S. 48 geht hervor, dass sich das System dann vorwiegend in uns bekannten niederenergetischen Regionen bewegt. Wir nutzen die Kenntnis aller Zustände bis zu der dritten Anregung und folgen dem System während des *random walk* bei jedem Schritt. Auf diese Weise wird der Einfluß der Größe und der Struktur der Cluster und Täler und ihre Konnektivität auf die Dynamik untersucht. Da die Dynamik oft als Aktivierung über Energiebarrieren interpretiert wird, messen wir die Zeit, die das System benötigt, um ein Tal zu verlassen und das andere zu erreichen.



**Abbildung 4.7:** Relaxation der Korrelationsfunktion für ein 2D Spinglas-Modell ( $L = 70$ ) vs. Zeit, gemessen in Monte Carlo Schritten.

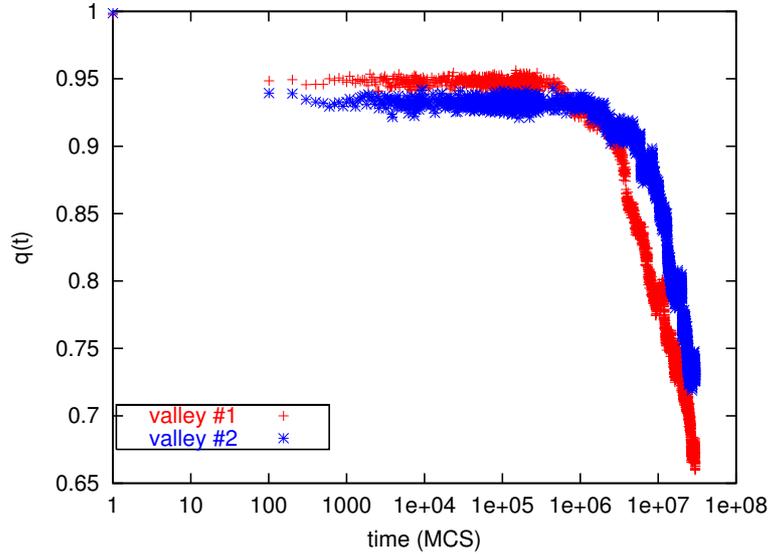
Die Zeitentwicklung des Systems im Konfigurationsraum kann als die progressive Erforschung der Täler und Cluster beschrieben werden. Wir verwenden den Monte Carlo Metropolis Algorithmus für verschiedene  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Als Zeiteinheit wird ein Monte Carlo Schritt gewählt. Das Ziel ist die Untersuchung der Überwindung der energetischen Barrieren. Zwei individuelle Läufe durch die Landschaft sind für unterschiedliche  $\beta$  in Abb. 4.8; S. 51 gezeigt. Wir beginnen mit einem willkürlichen Zustand in einem der Grundzustandscluster. Anfangs bewegt sich das System im Tal und berührt manchmal den Sattelcluster in der ersten Anregung. Nach der *Fluchtzeit*  $t_{esc}$  von der Größenordnung  $10^7$  MC verlässt das System das erste Tal und geht über den Sattelcluster in das zweite Tal hinein. Der Übergang wird durch die innere Struktur des Sattelclusters charakterisiert und hängt von dieser entscheidend ab, vgl. Abb. 3.7; S. 28. Man erkennt, dass das System bei höherer Temperatur viel aktiver ist und häufiger den Grundzustand verlässt. Einige weitere Beispiele für den Übergang sind in Anhang C; S. 87 dargestellt. Quantitativ kann er durch die Korrelationsfunktion (4.1) in der Form

$$q(t) = \frac{1}{N} \langle S_i^G(0) S_i(t) \rangle \quad (4.9)$$



**Abbildung 4.8:** Ein individueller Lauf durch die Landschaft für  $\beta = 2.0$  ( $T = 0.5$ ; oben) und  $\beta = 2.5$  ( $T = 0.4$ ; unten). Die Ordinate ist in zwei Täler (*valley1* und *valley 2*) und den Sattelcluster zwischen beiden (gelb) aufgeteilt, die energetische Anregungen werden jeweils hervorgehoben. Der Lauf beginnt einmal in dem linken (rot) und einmal in dem rechten Cluster (grün), siehe Abb. 3.4; S. 23.

beschrieben werden. Dabei bezeichnet  $S_i^G(0)$  den  $i$ -ten Spin aus der Startkonfiguration, die zufällig aus dem Grundzustandscluster des Tales #1 (#2) ausgewählt wurde. Die Klammer  $\langle \rangle$  kennzeichnet die Mittelung über 100



**Abbildung 4.9:** Spinkorrelationsfunktion vs. Zeit für das repräsentative System ( $L = 4$ ). Die Anfangskonfiguration wurde aus der Menge der Zustände des Grundzustandsclusters des Tales #1 bzw. #2 ausgewählt, ( $\beta = 2.5$ ).

Läufe mit einem Startpunkt im gleichen Cluster.

Die Spinkorrelationsfunktion wird durch ein Plateau mit dem Wert  $q_{pl}$  charakterisiert, das nach etwa 100 Schritten erreicht wird. Dann folgt ein zeitabhängiger Abfall. Um die Korrelation zwischen der Struktur der Energielandschaft und der Dynamik zu untersuchen, vergleichen wir den Wert  $q_{pl}$  aus der Dynamik mit dem Wert, der sich aus der Kenntnis über die Zustände des Tales berechnen lässt. Die Spinkorrelationsfunktion innerhalb eines Tales kann durch einen mittleren Hammingabstand  $\bar{h}_{di}$  über alle Paare von Zuständen berechnet werden:

$$q_{pl}^{(ham)} = 1 - 2\bar{h}_d/N. \quad (4.10)$$

Aus Tabelle 4.3 ist zu ersehen, daß die Werte für  $q_{pl}$  und  $q_{pl}^{(ham)}$  übereinstimmen. Dabei wurde die Mittelung in (Gl. 4.10; S. 52) über alle Zustände im Grundzustandscluster durchgeführt. Das Plateau spiegelt die Dynamik innerhalb des Tales wider.

Der nachfolgende Abfall von  $q(t)$  stellt die Flucht aus dem Tal dar. Die Fluchtzeit  $t_{esc}$  hängt von der Temperatur ab. Wenn man die Abhängigkeit in einer sogenannten Arrheniusauftragung (gegen die reziproke Temperatur) dargestellt, dann ist es zu erwarten, dass die Steigung der dadurch gewonnenen Gerade die Energiebarriere  $\Delta E$  liefert. Mit anderen Worten,  $t_{esc}$  wird durch ein Gesetz  $\exp(\beta \Delta E_{eff})$  angepaßt. Wir fanden  $\Delta E_{eff} =$

**Tabelle 4.3:** Vergleich des Plateau-Wertes  $q_{pl}$  der Spinkorrelationsfunktion der Simulationen (Abb. 4.9; S. 52) mit der Berechnungen aus dem mittleren Hammingabstand (Gl. 4.10; S. 52)

	Abb. 4.9; S. 52	Gl. 4.10; S. 52
$q_{pl}$ (#1)	$0.947 \pm 0.004$	0.936
$q_{pl}$ (#2)	$0.932 \pm 0.004$	0.924
$\Delta q_{pl}$	$0.015 \pm 0.004$	0.012

$4.24 \pm 0.08$  ( $4.46 \pm 0.09$ ) für das Tal #1 (#2). Offensichtlich ist der effektive Wert  $\Delta E_{eff}$  größer als der tatsächliche, der in dem System  $\Delta E = 4$  beträgt. Außerdem ist  $\Delta E_{eff}$  größer für das Tal #2 als für #1. Das spiegelt die Tatsache wider, daß das System einfacher den Sattelcluster in der Richtung des Tales #2 verlassen kann als umgekehrt. Dies ist wiederum die Folge der unterschiedlichen Anzahl von Verbindungen.

## 4.5 Einstellung des Gleichgewichts und Energielaxation

### 4.5.1 Einleitung

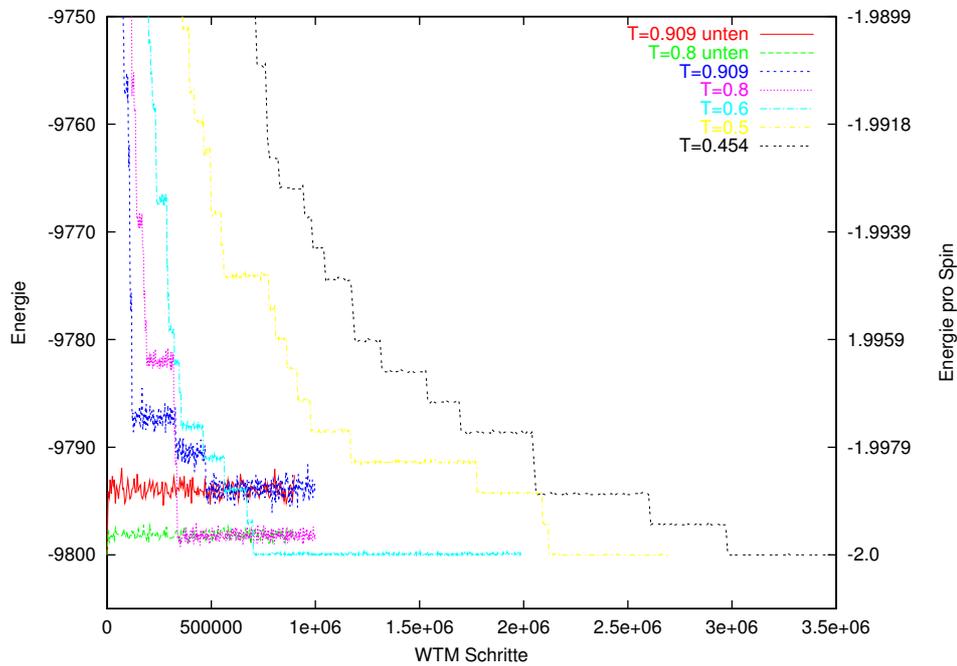
Um die thermodynamischen Eigenschaften eines Systems zu messen, muß man das System zuerst in das Gleichgewicht bringen. Bei den Monte Carlo Simulationen (MC) ist es daher unverzichtbar, vor dem eigentlichen Messprozess eine große Anzahl von Monte Carlo Schritten durchzuführen. Neben den physikalischen Eigenschaften eines Systems im Gleichgewicht ist oftmals auch der Weg von Interesse, auf dem Gleichgewichtszustand erreicht werden kann. Den Relaxationprozeß kann man anhand der Änderung der Energie bzw. der Spinkorrelationsfunktion verfolgen.

In diesem Abschnitt wird die Einstellung des Gleichgewichtes untersucht, indem man von zwei verschiedenen Zuständen startet. Als Anfangszustand wird zum einen ein Grundzustand und zum anderen ein Zustand aus einer höheren Anregung ( $E > 0$ ) verwendet und der Relaxationsprozess auf zwei getrennten Wegen beobachtet. Für endliche Temperaturen erfolgt dann die Annäherung an das Gleichgewicht einmal von höher und einmal von tiefer liegenden Energien aus. Die Gleichgewichtszustände müssen unabhängig von dem Startpunkt sein. Bei dem beschriebenen Vorgehen kann man das Erreichen des Gleichgewichts durch die Annäherung beider Kurven verfolgen. Als Gleichgewicht kann man dann die Situation bezeichnen, bei der die von

verschiedenen Startpunkten aus beobachteten Werte der erreichten physischen Größen gleich sind. In glasartigen Systemen und Spinglas-Modellen, bei denen der Konfigurationsraum aus mehreren, durch hohe Energiebarrieren getrennten Täler besteht, ist das jedoch nicht immer der Fall. Es ist möglich, dass sich das System in einem der Täler befindet. Dann wird nur ein lokaler Gleichgewichtszustand erreicht, der sich von dem globalen Gleichgewichtszustand unterscheidet. Im folgenden wird auf die angegebene Weise die Einstellung des Gleichgewichtes in geordneten antiferromagnetischen Systemen ( $2D$  mit  $L = 70$  und  $3D$  mit  $L = 12$ ) untersucht. Diese Systeme bestehen aus zwei getrennten Täler, die jedoch identisch sind. Man erwartet also, dass das System nach einer gewissen Zeit den Gleichgewichtswert erreichen wird. Danach werden ungeordnete  $2D$  und  $3D$  Systeme behandelt, bei denen das Erreichen des Gleichgewichts nicht offensichtlich ist.

## 4.5.2 Geordnete Systeme

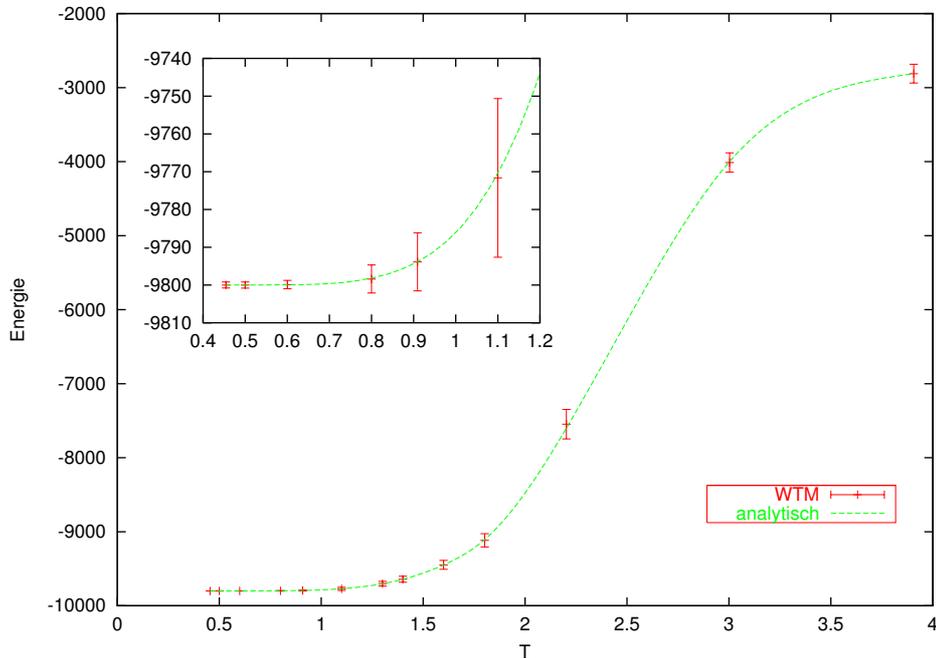
Die Systeme wurden im Temperaturbereich von  $T = 0.3$  bis  $T = 4.0$  untersucht. In Abb. 4.10; S. 55 ist die Energierelaxation für das antiferromagnetisches  $2D$  System dargestellt. Bei den Temperaturen  $T < 0.8$  wird für  $2D$  immer der Grundzustand erreicht und stets ein schnelles Erreichen des Gleichgewichts beobachtet. Die erhaltenen Gleichgewichtswerte der Energie kann man für  $2D$  mit analytischen Rechnungen für endliche geordnete Ising-Systeme nach Ferdinand und Fisher [75] vergleichen. In Abb. 4.11; S. 56 sind die analytischen und die aus der Simulationen erhaltenen Energiewerte dargestellt, die sehr gut übereinstimmen. Abb. 4.12; S. 57 zeigt die Relaxation der Energie für ein  $3D$  System ( $L = 10$ ). Obwohl das System kleiner ist als das in dem vorher untersuchten  $2D$  Fall und die Temperaturwerte nicht so tief liegen, braucht man viel mehr Zeit, um das Gleichgewicht zu erreichen. In diesem Fall bewegt sich das System schon bei  $T = 1.43$  zwischen dem Grundzustand und der ersten Anregung. Die noch tieferen Temperaturen erhöhen sich nur die Relaxationszeiten. Sowohl für  $2D$  als auch für  $3D$  sind charakteristische Relaxationsstufen zu beobachten. Im  $3D$  Fall beobachtet man zusätzlich ein Plateau, nach dem die Energie des Systems schnell sinkt. Das kann mit dem zeitweisen Einfrieren der Zustände erklärt werden. Es wurde gezeigt, dass für  $3D$  das Gleichgewicht nicht so schnell erreicht wird. Es besteht hier ein Zusammenhang mit der großen Energiedifferenz zwischen Grundzustand und ersten angeregten Zustand. Er beträgt  $\Delta E = D \cdot 4J$ , wobei  $D$  die Dimension des Systems ist.



**Abbildung 4.10:** Die Relaxation der Energie für das geordnete  $2D$  System ( $L = 70$ ). Bei den Temperaturen  $T = 0.909$  und  $T = 0.8$  ist auch die Relaxation von Grundzustand aus (unten) dargestellt, ansonsten ist der Endzustand der Grundzustand.

## 4.6 Ungeordnete Systeme

Die Relaxation der Energie für ein  $2D$  System ( $L = 70$ ) für Temperaturen  $T = 0.5$  und  $T = 0.6$  ist in Abb. 4.13; S. 58 dargestellt. Bei  $T = 0.6$  werden von beiden Startpunkten aus innerhalb der gewählten Beobachtungszeit die gleichen Energiewerte erreicht. Bei  $T = 0.5$  hängen die Endwerte vom Startpunkt ab. Das Gleichgewicht wird also nicht erreicht. Diese Beobachtungen lassen vermuten, dass die Energierelaxation nach einer langen (allerdings endlichen) Zeit zu verschiedenen Ergebnissen führt, je nachdem welcher Startpunkt gewählt wurde. Das Verhalten wurde genauer für die  $3D$  Systeme untersucht. Es ist zu berücksichtigen, daß man das System nur eine bestimmte Zeit  $t_{rl}$  relaxieren kann, die man mit einer realen Beobachtungszeit in Beziehung bringen könnte. Nach dieser Zeit beobachten wir die Energiewerte, die bei niedrigen Temperaturen vom Startpunkt abhängen. Dabei gibt  $E_{gr}$  die Energie für die Relaxation vom Grundzustand und  $E_{rd}$  die vom willkürlichen Zustand aus erreichte Energie an. Dann wird eine Energielücke



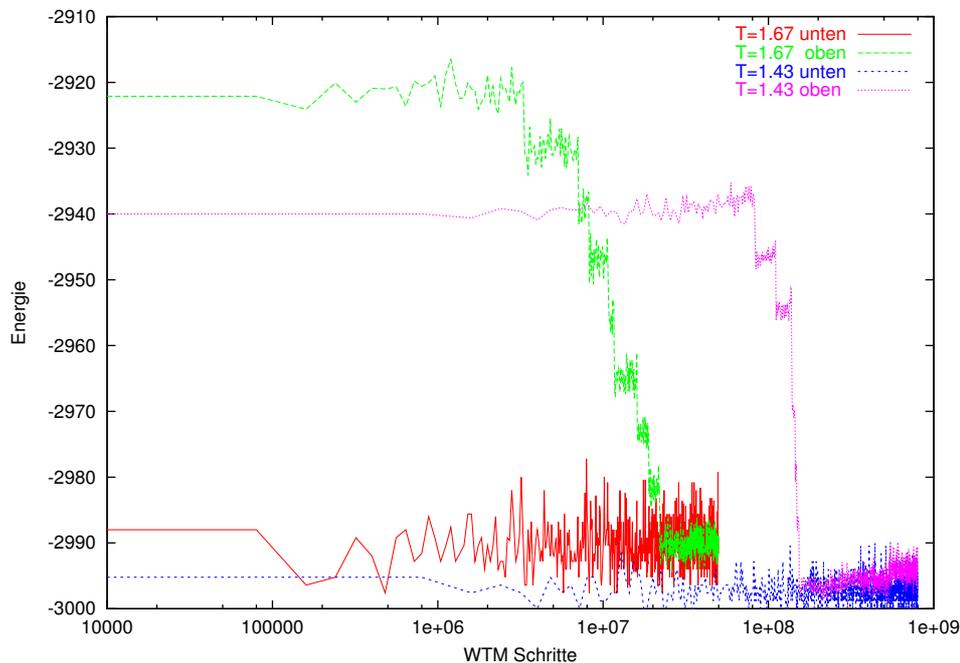
**Abbildung 4.11:** Gleichgewichtswerte der Energie als Funktion der Temperatur für ein geordnetes endliches  $2D$  System ( $L = 70$ ), analytisch berechnet nach [75] im Vergleich mit WTM Simulationen.

$\Delta E = E_{rd} - E_{gr}$  bestimmt. Die Energielücke sinkt mit wachsender Temperatur bis sie bei einer bestimmten Temperatur  $T_{rl}$  einen konstanten Wert (nahe Null) erreicht. Oberhalb dieser Temperatur wird das Gleichgewicht problemlos erreicht. Unterhalb der Temperatur sind die Energiewerte vom Startpunkt abhängig. Es wird dann die Abhängigkeit  $T_{rl}$  von der Systemgröße untersucht.

### 4.6.1 Methode

Zur Bestimmung der Temperatur  $T_{rl}$  wurde folgendes Verfahren angewendet:

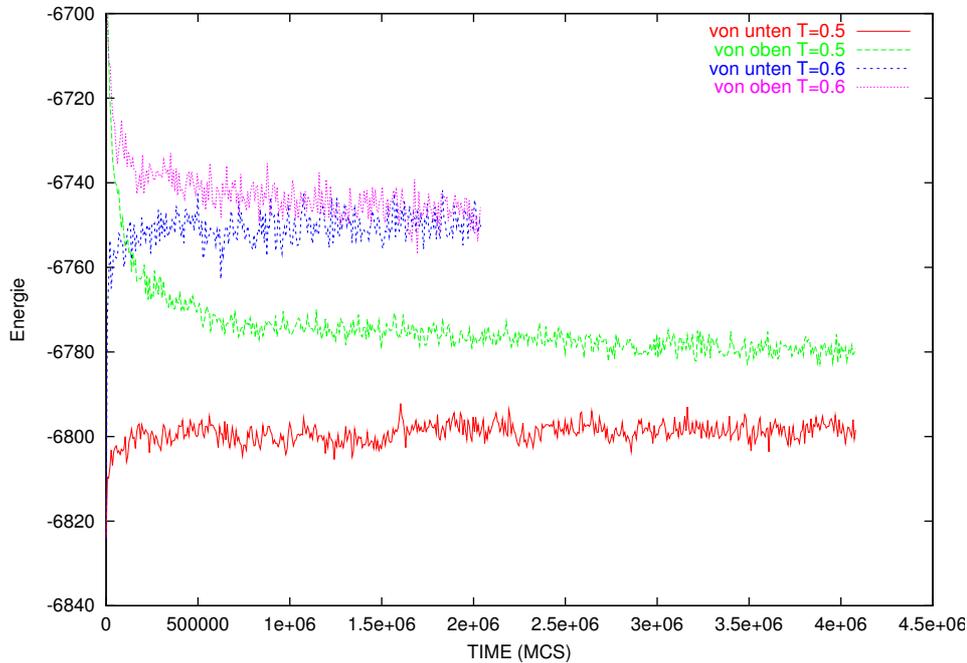
1. Zur Simulation der Dynamik wurde sowohl der Metropolis Algorithmus als auch *waiting time method* benutzt, siehe Abschnitt 4.2
2. Für jede Temperatur wurden Simulationen beginnend mit einem willkürlichen Zustand ( $E > 0$ ) (von oben) bzw. einem Grundzustand (von unten) durchgeführt. Es wurde über 20 verschiedene Läufe beim Start



**Abbildung 4.12:** Relaxation der Energie für das geordnete 3D System ( $L = 10$ ) von verschiedenen Startkonfiguration aus: oben - zufällig gewählter Zustand; unten - Grundzustand ( $T = 1.67$  und  $T = 1.43$ ).

von oben und von unten gemittelt. Bei jedem Lauf von oben wurde der willkürlichen Zustand neu gewählt. Bei jedem Start von unten war die Startkonfiguration immer dieselbe. Jedoch wurden zunächst 500 "leere" WTM Schritte gemacht, so dass sich das System ein wenig im Grundzustandscluster bewegen konnte und damit Zufälligkeiten durch die Wahl des Grundzustandes möglichst vermieden werden.

- Die Energien  $E_{rd}$  und  $E_{gr}$  geben Mittelwerte über ein Zeitintervall von  $7 \cdot 10^6$  bis  $8 \cdot 10^6$  WTM Schritten an. Diese Mittelung folgt nach der Mittelung über verschiedene Läufe. In Abb. 4.14 ist die Relaxation für ein  $L = 14$  System dargestellt. Für tiefe Temperaturen ist die Energielücke deutlich sichtbar.
- Es wurde die Temperatur bestimmt, bei der die Energielücke „konstant bleibt,, (ideal wäre „Null wird,,). Die Energielücke  $\Delta E(T)$  wurde als Funktion der Temperatur durch eine Gerade approximiert, siehe Abb. 4.15; S. 60. Die Temperatur  $T_{rl}$  wurde durch den Schnittpunkt mit der Abszisse bestimmt.

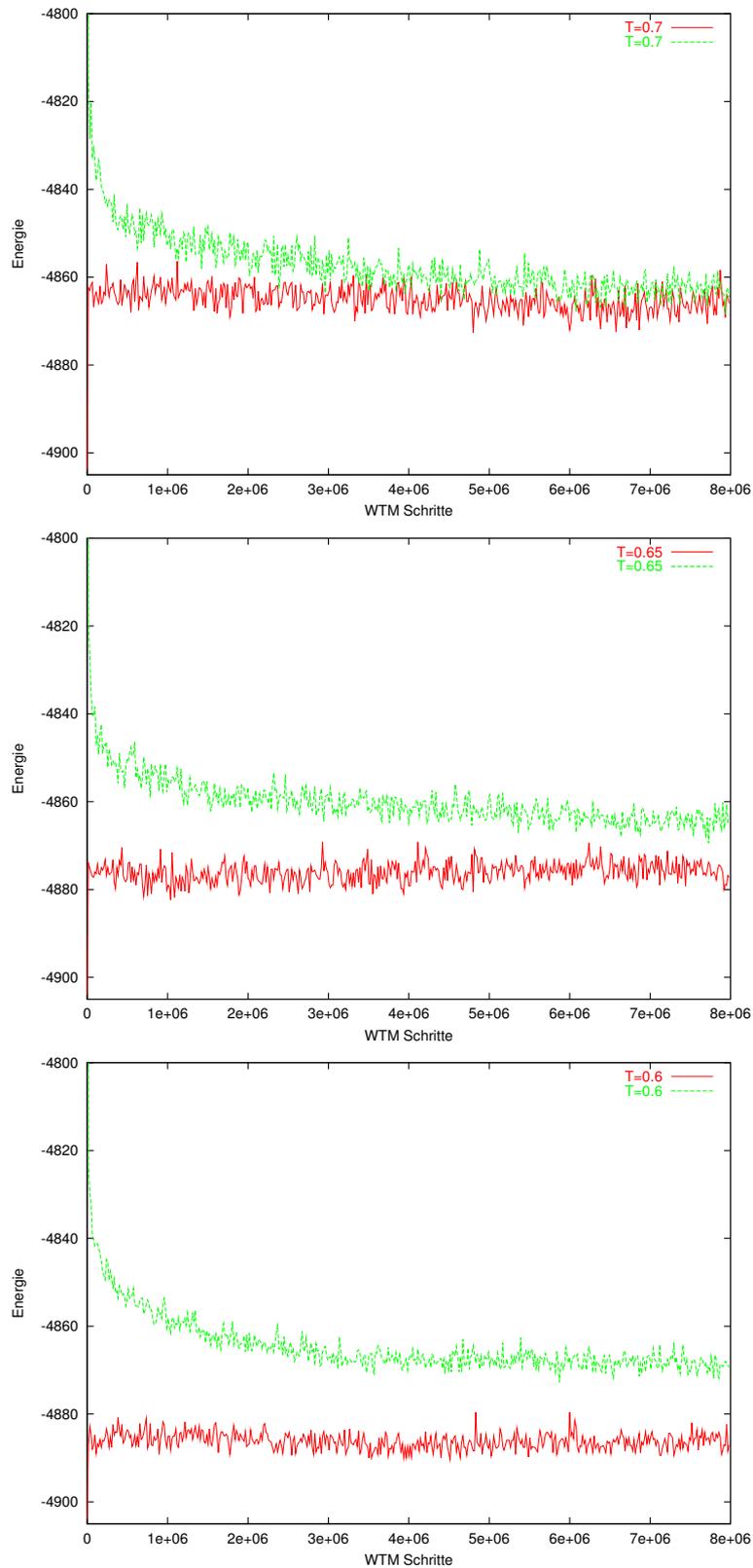


**Abbildung 4.13:** Relaxation der Energie für ein 2D Spinglas-Modell ( $L = 70$ ) von verschiedenen Startkonfiguration aus: oben - zufällig gewählter Zustand; unten - Grundzustand ( $T = 0.5$  und  $T = 0.6$ ), MCS bezeichnet Monte Carlo Schritte pro Spin.

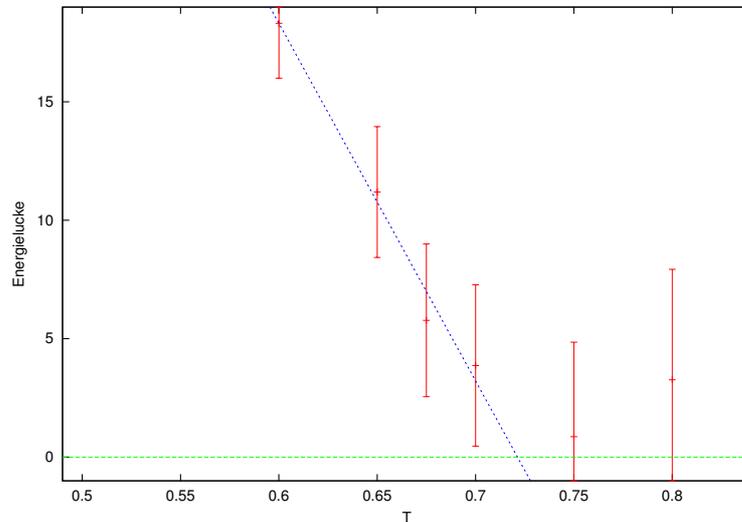
5. Dieses Verfahren wurde in Abhängigkeit von der Systemgröße  $L$  wiederholt. Für jedes  $L$  wurden mindestens 5 Systeme untersucht, über die gefundenen Werte  $T_{rl}$  wurde gemittelt.
6. Die untersuchten Systeme wurden so ausgewählt, dass ihre Grundzustandsenergie möglichst nahe am Mittelwert liegt (repräsentative Systeme).

## 4.6.2 Ergebnisse

Es wurden Systeme der Größe von A.K. Hartmann  $L = 4, 6, 8, 10, 12$  und  $14$  untersucht. Für  $L \geq 6$  wurden Daten verwendet, die mit *cluster exact approximation* [42] gewonnen und uns vom Autor zur Verfügung gestellt wurden. Für Systeme  $L \leq 6$  wird der Gleichgewichtswert  $E_{gr} = E_{rd}$  schnell erreicht, d.h. keine Energielücke. Erst bei den größeren Systemen war es möglich die



**Abbildung 4.14:** Relaxation (Energie vs. WTM Schritte) für ein  $3D \pm J$  Spinglas-Modell ( $L = 14$ ),  $E_0 = -4904$ ;  $T = 0.7; 0.65; 0.6$ .



**Abbildung 4.15:** Energielücke versus Temperatur. Die blaue Linie entsteht durch Anpassung an eine Gerade. Aus deren Koeffizienten lässt sich die Temperatur  $T_{rl} = 0.721 \pm 0.074$  bestimmen.

Temperatur  $T_{rl}$  zu bestimmen. In der Tabelle 4.4 sind die Ergebnisse dargestellt. Sie sind sowohl für die Mittelung über die repräsentativen Systeme bzw. für die Mittelung über alle Systeme angegeben. Für  $L = 12$  und  $14$  sind nur repräsentative Systeme. In Abb. 4.16; S. 61 ist  $\beta_{rl} = (T_{rl})^{-1}$  als Funktion der Systemgröße  $L$  dargestellt. Dabei wurden zwei Funktionen

$$f(L) = \beta_{\infty} + a \cdot \exp(-c \cdot L) \quad (4.11)$$

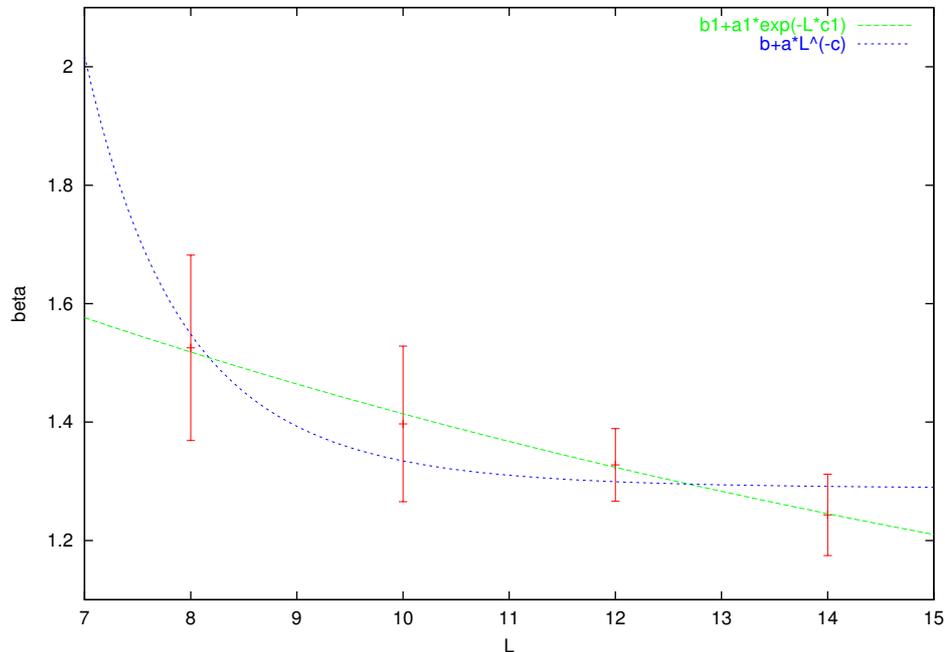
und

$$g(L) = \beta_{\infty} + a \cdot L^{-c}, \quad (4.12)$$

zur Anpassung benutzt. Die durch die beiden Anpassungen erhaltene Werte für  $T_{\infty}$  betragen:

$L$	repräsentative	alle
8	$0.655 \pm 0.103$	$0.613 \pm 0.105$
10	$0.716 \pm 0.094$	$0.742 \pm 0.101$
12	$0.753 \pm 0.046$	-
14	$0.804 \pm 0.055$	-

**Tabelle 4.4:** Die Temperaturwerte  $T_{rl}$  für verschiedene Systemgröße  $L$ , berechnet für repräsentative und alle verfügbaren Systeme.



**Abbildung 4.16:** Temperaturen  $T_{rl}$  in Abhängigkeit von der Systemgröße des Gitters. Die grüne Kurve entspricht der Anpassung (4.11) und die blaue der Anpassung (4.12).

- $T_{\infty} = 1.356$  für Anpassung mit der Funktion (4.11)
- $T_{\infty} = 0.776$  für Anpassung mit der Funktion (4.12)

Die beiden Werte für den thermodynamische Limes sind unterschiedlich, aber liegen interessanterweise im Bereich der Spinglas-Temperatur für 3D Systeme  $T_{sg} = 1.17$  [65]. Die Ergebnisse werden durch die Struktur der Energielandschaft der einzelnen Systemen stark beeinflusst, die eine starke Streuung von System zu System aufweist. Die unterschiedlichen Strukturen der Täler spiegeln sich in der Dynamik wider. Wenn z.B. die Startkonfiguration in einem Tal liegt, das durch hohe Energiebarrieren von anderen Tälern getrennt ist, dann wird die Dynamik in dem kleinen Tal durch dessen spezifische Eigenschaften geprägt. Die Abhängigkeit von dem Startpunkt in einem Grundzustandscluster können wir leider solange nicht ausschliessen, solange wir die niederenergetische Landschaft nicht genauer kennen. Ungeklärt bleibt z.Z. auch noch die Rolle der endlichen Beobachtungszeit, die als weiterer Parameter entscheidend in die Ergebnisse der Simulation eingeht. Es bleibt also zu untersuchen, was geschehen würde, wenn die Beobachtungszeit größer wird. Offen bleibt die Frage, ob das System das Gleichgewicht auch bei tieferen Temperaturen erreicht.



# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

Die komplizierte Struktur der Energielandschaft wurde am Beispiel des  $\pm J$  Spinglas-Modells untersucht. Sie ist in glasartigen Systemen der Schlüssel zum Verständnis einer verlangsamten Dynamik. Es wurde ein enger Zusammenhang zwischen der Dynamik und der Energielandschaft nachgewiesen. Die Energielandschaft wird in  $\pm J$  Spinglas Modellsystemen durch Cluster charakterisiert, die infolge ihrer Konnektivität größere Objekte (z.B. Täler) bilden. Einzelne Cluster, aber auch ganze Täler, sind miteinander durch sogenannten Sattelcluster verknüpft. Die physikalischen Eigenschaften werden durch die Strukturen der Verknüpfungen und durch die innere Struktur der Cluster geprägt. Zur Beschreibung der Energielandschaften wurde die genaue Kenntnis der Zustände benutzt. Auf der Grundlage des *branch-and-bound* Verfahrens war es möglich, für kleine Systeme alle Zustände bis zu der dritten Anregung zu bestimmen. Danach wurden die Konfigurationen so sortiert, dass die Beziehungen zwischen ihnen, wie z.B. Nachbarschaften und Clusterzugehörigkeiten, einfach zu finden waren. So war es möglich, die Energielandschaft aufzubauen. Da manche Cluster hinsichtlich ihrer Verbindungen gleichartig sind, kann man vielfach auf die Darstellung von Einzelheiten verzichten. Daher wurden Cluster, die dieselbe Konnektivität besitzen, zu Gruppen zusammengefasst. Aus der Sicht der Dynamik sind nur die Clustergruppen relevant.

Es gelang, die exakte Landschaft für Systeme bis  $L = 6$  aufzubauen. Für größere Systeme ist es zur Zeit unmöglich, alle niederenergetischen Zustände zu finden.

Eine alternative Möglichkeit, die Struktur zu beschreiben, erhält man durch Untersuchung der Verteilung der Overlap. An der Gestalt der Verteilung erkennt man, ob die niederenergetische Struktur kompliziert oder einfach ist. Bei genaueren Untersuchungen ist es sogar möglich, die Anzahl der existierenden Täler abzuschätzen. Die Untersuchungen der Overlap bei

8555  $3D$  Systemen ( $L = 4$ ) weisen darauf hin, dass bei kleineren Grundzustandsenergien die Struktur durch zwei spiegelsymmetrische Täler geprägt ist. Mit wachsender Grundzustandsenergie wird die Struktur der Systeme immer komplizierter. Aus der Menge der 8555 Systeme wurde ein repräsentatives System gewählt, dessen Eigenschaften mit den mittleren Eigenschaften über alle Systeme in etwa übereinstimmen. Einige konkrete Untersuchungen wurden auf dieses System beschränkt.

Eine weitere wichtige Komponente der Energielandschaft ist die innere Struktur der Sattelcluster. Ein Sattelcluster besteht aus wenigstens drei Gruppen von Konfigurationen. Zwei Gruppen enthalten Konfigurationen, die mit den Grundzustandsclustern verbunden sind, und die dritte Gruppe verbindet die beiden. Es passiert oft, dass die Konfigurationsgruppen, die verschiedene Grundzustandscluster verbinden, weit voneinander entfernt liegen. Dies wurde als ein wichtiger Aspekt erkannt, der zu einer Verlangsamung dynamischer Prozesse führt.

Der andere Aspekt der Energielandschaft ist ihr Zusammenhang mit dem Realraumbild. Das Realraumbild ist als die Lage der Spins auf dem Gitter zu verstehen. Spins kann man zu verschiedenen Spindomänen zusammenfassen, die dann auf natürliche Weise die Struktur der Energielandschaft generieren. Für die Größe der einzelnen Cluster sind die freien Spins verantwortlich. Es wurde bestätigt, dass die Existenz einzelner Täler durch Spindomänen erklärt werden kann. Dabei wird durch das kollektive Umdrehen aller Spins in einer solcher Domäne ein anderer Cluster in einem anderen Tal erzeugt. Neben dem Zusammenhang von Spindomänen und Energielandschaft konnte der Einfluss von bestimmten zusammenhängenden Strukturen freier Spins genauer aufgeklärt werden. Hier ergeben sich Ansatzpunkte für weitergehende Untersuchungen.

Die Dynamik wurde vor allem durch das Verhalten der Spinkorrelationsfunktion untersucht. Schon bei so kleinen Systemen wie die mit  $L = 4$  ist der Einfluss der einzelnen Bausteine der Energielandschaft wie Cluster und Täler sehr deutlich zu sehen. Es wurde gezeigt, dass die Größe der Cluster einen entscheidenden Einfluss auf das Plateau der zeitabhängigen Korrelationsfunktion ausübt. Die gesamte Struktur der Täler und des Sattelclusters verlängert die Fluchtzeit und verlangsamt damit die dynamischen Prozessen. Die effektiven Energiebarrieren sind größer als die tatsächliche Energiebarrieren in den Systemen.

Nicht beantwortet werden konnte die Frage, wie sich die effektive Energiebarriere mit der Größe des Systems verändert. Hierzu müssten noch größere Systeme untersucht werden. Weitere Fortschritte kann man erwarten, wenn es gelingt, noch effektivere Algorithmen zu finden und wenn in der Zukunft Computer mit größerer Rechenleistung zur Verfügung stehen.

# Literaturverzeichnis

- [1] K. Binder and A.P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58:801, 1986.
- [2] K.H. Fisher and J.A. Hertz. *Spin Glasses*. University Press, Cambridge, 1999.
- [3] J.A. Mydosh. *Spin Glasses. An Experimental Introduction*. Taylor & Francis, London, 1993.
- [4] A.P. Young. Spin glasses: a computational challenge of the 21st century. *Comp. Phys. Comm.*, 146:107, 2002.
- [5] D. S. Fisher and D.A. Huse. Equilibrium behavior of the spin-glass ordered phase. *Phys. Rev. B*, 38:386–411, 1988.
- [6] G. Parisi. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 43:1754, 1979.
- [7] G. Parisi. Order parameter for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1946, 1983.
- [8] J.C. Phillips. Stretched exponential relaxation in molecular and electronic glasses. *Rep. Prog. Phys.*, 59(9):1113, 1996.
- [9] U. Buchenau. Energy landscape - a key to concept in the dynamics of glass formers. cond-mat/0209172, III Workshop. Nonequilibrium Phen. in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials, Pisa 2002.
- [10] J. Krawczyk and S. Kobe. Low-temperature dynamics of spin glasses: Walking in the energy landscape. *Physica A*, 315:302, 2002.
- [11] S.F. Edwards and P.W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F*, 5:965, 1975.
- [12] G. Toulouse. Theory of the frustration effect in spin glasses. *Comm. on Phys.*, 2:115, 1977.

- [13] T. Klotz. *Grundzustands- und thermodynamische Eigenschaften von dreidimensionalen Ising Systemen*. Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, 1992.
- [14] T. Klotz. *Zur Phasenraumstruktur in ungeordneten  $\pm J$  Ising-Spinsystemen*. PhD thesis, Technische Universität Dresden, 1996.
- [15] S. Wright. The roles of mutation, inbreeding, crossbreeding and selection in evolution. In D.F. Jones, editor, *International Proceedings of the Sixth International Congress on Genetics*, volume 1, pages 356–336, 1932.
- [16] Bärbel M. R. Stadler and P. F. Stadler. Generalized topological spaces in evolutionar theory and combinatorial chemistry. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **42**, 42:577, 2002.
- [17] M. Goldstein. Viscous liquids and the glass transition: A potential energy barrier picture. *J. Chem. Phys.*, 57:3728, 1969.
- [18] A. Heuer. Properties of a glass-forming system as derived from its potential energy landscape. *Phys. Rev. Lett.*, 78:4051, 1997.
- [19] S. Büchner and A. Heuer. The potential energy landscape of a model glass former: thermodynamics, anharmonicities, and finite size effects. *Phys. Rev. E*, 60:6507, 1999.
- [20] C.A. Angell. Formation of glasses from liquids and biopolymers. *Science* **267**, 267:1924, 1995.
- [21] L. Angelani, G. Parisi, G. Roucco, and G. Viliani. Potential energy landscape and long time dynamics in a simple model glass. 61:1681, 2000.
- [22] J. Christian Schön and P. Sibani. Properties of the energy landscape of network models for covalent glasses. *J. Phys. A*, 31:8165–8178, 1998.
- [23] Sharon C. Glotzer, Naeem Jan, and Peter H. Poole. The potential energy landscape of the  $\pm j$  ising spin glass. *J. Phys.: Condens. Matt.*, 12:6675, 2000.
- [24] T. Klotz, S. Schubert, and K. H. Hoffmann. The state space of short-range Ising spin glasses: the density of states. *Europ. Phys. J.B.*, 2:143, 1998.
- [25] T. Klotz and S. Kobe. Exact low-energy landscape and relaxation phenomena in Ising spin glasses. *Acta Phys. Slovaca*, 44:347, 1994.

- [26] P. Sibani. Evolution dynamics in terraced NK landscapes. *Europhys. Lett.*, 48:196–202, 1990.
- [27] F. Krzakala and O.C. Martin. Discrete energy landscapes and replica symmetry breaking at zero temperature. *Europhysics Letters*, 53:749–755, 2001.
- [28] E. S. Rodrigues and P. M. C. de Oliveira. Spin-glass energy landscape. *J. Stat. Phys.*, 74:1265, 1994.
- [29] Nicolas Giovambattista, Francis W. Starr, Francesco Sciortino, Sergey V. Buldyrev, and H. Eugene Stanley. Transitions between inherent structures in water. cond-mat/0201028, to be publ. in *Phys. Rev. E*.
- [30] F.H. Stillinger and P.G. Debenedetti. *J. Chem. Phys.*, 116:3353, 2002.
- [31] F. Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *J. Phys. A*, 15:3241, 1982.
- [32] I. Bieche, R. Mayrand, R. Rammal, and J.P. Uhry. On the ground states of the frustration model of a spin glass by a matching method of graph theory. *J. Phys. A*, 13:2553, 1980.
- [33] R. G. Palmer and J. Adler. Ground state for large samples of two-dimensional Ising spin glasses. *Int. J. Mod. Phys. C*, 10:667, 1999.
- [34] J.W. Landry and S.N. Coppersmith. Ground states of two-dimensional  $\pm J$  Edwards-Anderson spin glasses. *Phys. Rev. B*, 65:134404, 2001.
- [35] I. Morgenstern and K. Binder. Magnetic correlation in two-dimensional spin glasses. *Phys. Rev. Lett. B*, 27:4522, 1982.
- [36] Ho-Fai Cheung and W. McMillan. Equilibrium properties of the two-dimensional random  $\pm J$  Ising model. *J. Phys. C*, 16:7027, 1983.
- [37] P. Stolorz. Recursive approaches to the analysis for short-range disordered systems in the low-temperature regime. *Phys. Rev. B*, 48:3085, 1993.
- [38] C. De Simone, M. Diehl, M. Jünger, P. Mutzel, G. Reinelt, and G. Rinaldi. Exact ground states in spin glasses: New experimental results with a branch-and-cut algorithm. *J. Stat. Phys.*, 84:1365, 1996.
- [39] C. De Simone, M. Diehl, M. Jünger, P. Mutzel, G. Reinelt, and G. Rinaldi. Exact ground states of two-dimensional  $\pm J$  Ising spin glasses. *J. Stat. Phys.*, 80:487, 1995.

- [40] H. Bialy and M. Obrich. *Optimierung. Eine Einführung mit Anwendungsbeispielen*. Fachbuchverlag Leipzig, 1975.
- [41] A. Hartwig, F. Daske, and S. Kobe. *Comp. Phys. Commun.*, 32:133, 1984.
- [42] A.K. Hartmann. Cluster-exact approximation of spin glass ground states. *Physica A*, 214:141, 1995.
- [43] A. Hartmann. *Struktur der Grundzustände ungeordneter Ising-Systeme*. PhD thesis, Ruprechts-Karls-Universität Heidelberg, 1998.
- [44] Bernd A. Berg, Ulrich H.E. Hansmann, and Tarik Celik. Ground state properties of the 3d Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 50:16444, 1994.
- [45] Bernd A. Berg. Multicanonical simulations step by step. [cond-mat/0206333](#).
- [46] Jian-Sheng Wang. Efficient Monte Carlo simulation methods in statistical physics. [cond-mat/0103318](#), Manuscript for MCQMC2000 conference proceedings.
- [47] Zhi Fang Zhan, Lik Wee Lee, and Jian-Sheng Wang. A new approach to the study of the ground-state properties of 2d Ising spin glass. *Physica A*, 285:239, 2000.
- [48] A.K. Hartmann. Ground-state landscape of 2d  $\pm J$  Ising spin glasses. *Eur. Phys. J. B*, 8:619, 1999.
- [49] A.K. Hartmann. Ground-state clusters of two, three and four-dimensional  $\pm J$  Ising spin glasses. *Phys. Rev. E*, 63:016106, 2001.
- [50] E. E. Vogel, A.J. Ramirez-Pastor, and F. Nieto. Detailed structure of configuration space and its importance on ergodic separation of  $\pm J$  Ising lattices. *Physica A*, 310:384, 2002.
- [51] A.K. Hartmann and H. Rieger. *Optimization algorithms in physics*. Wiley-VHC Verlag, Berlin, 2002.
- [52] J.J. Moreno, H.G. Katzgraber, and A.K. Hartmann. Finding low-temperature states with parallel tempering, simulated annealing and simple Monte Carlo. *Int. J. Mod. Phys. C*, 14. to be publ.
- [53] E. Marinari, G. Parisi, and J.J. Ruiz-Lorenzo. Numerical simulations of spin glass systems. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, 1997.

- [54] J.R.L. de Almeida and D.J. Thouless. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model. *J. Phys. A*, 11:983, 1978.
- [55] G. Parisi. A sequence of approximated solution of the S-K model for spin glasses. *J. Phys. A*, 13:L115, 1980.
- [56] F. Tanaka and S.F. Edwards. *J. Phys. F*, 10:2769, 1980.
- [57] D.J. Thouless, P.W. Anderson, and R.G. Palmer. Solution of 'solvable model of spin glasses'. *Phil. Mag.*, 35:593, 1977.
- [58] A.J. Bray and M.A. Moore. Scaling theory of the ordered phase of spin glasses. In L. van Hemmen and I. Morgenstern, editors, *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics.*, Heidelberg, 1986. Springer-Verlag.
- [59] A.K. Hartmann. A new method for analyzing ground-state landscapes: ballistic search. *J. Phys. A*, 33:657, 2000.
- [60] S. Kobe and E. E. Vogel. Microscopic description of real and configuration spaces for  $\pm J$  Ising lattices. In *Actas X Simposio Chileno de Fisica*, Valparaiso, Nov 1996.
- [61] D. Stauffer and A. Aharony. *Perkolationstheorie. Eine Einführung.* Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1995.
- [62] G. Hed, A.K. Hartmann, D. Stauffer, and E. Domany. Spin domains generate hierarchical ground states. *Phys. Rev. Lett.*, 86:3148, 2001.
- [63] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.P. Bouchaud, and L.F. Cugliandolo. Slow dynamics and aging in spin-glasses. In *Complex Behaviour of Glassy Systems*, volume 492, page 184. Spinger Lectures Notes in Physics, 1997.
- [64] J.P Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mezard. Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems. In A.P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields.* World Scientific, 1997.
- [65] A.T. Ogielski. Dynamics of three-dimensional Ising spin glasses in thermal equilibrium. *Phys. Rev. B*, 32:7384, 1985.
- [66] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics* **21**, 1087-1092, (1953).
- [67] J. Dall and P. Sibani. Faster Monte Carlo simulations at low temperatures. The waiting time method. *Comp. Phys. Comm.*, 141:260, 2001.

- [68] G. Marsaglia, A. Zaman, and W.W. Tsang. Toward a universal random number generator. *Statist. Prob. Lett* **8**, 35-39, (1990).
- [69] R. Wieczorkowski and R. Zielński. *Komputerowe generatory liczb losowych*. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 1997.
- [70] G. Williams and D.C. Watts. *Trans. Faraday Soc.*, 66:80, 1970.
- [71] W. Götze and L. Sjörger. Relaxation processes in supercooled liquids. *Rep. Prog. Phys.*, 55:241, 1992.
- [72] R. G. Palmer, D. L. Stein, E. Abrahams, and P. W. Anderson. Models of hierarchically constrained dynamics for glassy relaxation. *Phys. Rev. Lett.*, 53:958–961, 1984.
- [73] Sharon C. Glotzer, Naeem Jan, Turab Lookman, and Allan B. Dynamical heterogeneity in the Ising spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 78:3394, 1997.
- [74] Peter H. Poole, Sharon C. Glotzer, Antonio Coniglio, and Naeem Jan. Emergence of fast dynamics on cooling toward the Ising spin glass transition. *Phys. Rev. E*, 57:7350, 1998.
- [75] A. E. Ferdinand and M. E. Fisher. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice. *Phys. Rev.*, 185:832, 1969.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Ein $4 \times 4 \times 4$ System mit periodischen Randbedingungen. Die durchgezogenen Linien stellen die ferromagnetischen, die gestrichelten die antiferromagnetischen Wechselwirkungen dar. . . . .	5
2.2	Zwei Zustände mit jeweils einer gebrochenen Bindung. . . . .	6
3.1	Verteilung des Overlap $P(q)$ für verschiedene Grundzustandsenergien (Grundzustandsenergien pro Spin) für $3D$ Systeme ( $L = 4$ ): $E = -100 (-1.5625), -104 (-1.625), -108 (-1.6875), -112 (-1.75), -116 (-1.8125), -120 (-1.875), -124 (-1.9375), -128 (-2.0)$ . Es wurde über verschiedene Realisierungen der Wechselwirkungen entsprechend der Tabelle 3.2 gemittelt. . . . .	17
3.2	Verteilung des Overlap $P(q)$ für alle berechnete Systeme und für das repräsentative System. Die Verteilung des repräsentativen Systems enthält zwei Maxima. Die eine (linke) entspricht dem Overlap zwischen zwei getrennten Clustern ( $\bar{q}_{dd}^{c1,c2} = 0.223$ ), die in dem System auftreten, die andere ist durch den Overlap zwischen relativ benachbarten Konfigurationen in Clustern geprägt ( $\bar{q}_{di}^{c1,c2} = 0.929$ ). Die schwarzen Linien bezeichnen die Lage der berechneten $q$ Werte. . . . .	18
3.3	Schematische Darstellung von Clustern im Konfigurationsraum. Jede Konfiguration kann maximal $N$ Nachbar haben, im mikrokanonischen Cluster ist diese Anzahl durch die Nebenbedingung, dass alle Konfigurationen zur gleichen Energie gehören müssen, begrenzt. Cluster 1 (c1) enthält 12 und Cluster 2 (c2) enthält 18 Konfigurationen. . . . .	21
3.4	Schema der Energielandschaft des repräsentativen $4 \times 4 \times 4$ Systems. . . . .	23
3.5	Schematische Struktur für die beiden Grundzustandscluster und den verbindenden Sattelcluster des repräsentativen Systems $4 \times 4 \times 4$ . $E_{c1}$ und $E_{c2}$ bezeichnen jeweils Mengen von Konfigurationen im Sattelcluster, die eine direkte ("Ein-Spin-Flip") Verbindung zu den Clustern c1 bzw. c2 haben. . . . .	26

- 3.6 Verteilung des Overlap für den Sattelcluster (alle Sattelzustände (oben); nur Zustände in Ec1 und Ec2 (unten, rot); alle Zustände außer denen in Ec1 und Ec2 (unten, blau)). Die senkrechten schwarzen Linien markieren  $\overline{q}_{dd}^{Ec1, Ec2} = 0.268$  und  $\overline{q}_{di}^{Ec1, Ec2} = 0.876$ , siehe Text. . . . . 27
- 3.7 Übergangprofil des Sattelclusters dargestellt als die Anzahl der Konfigurationen vs. Hammingabstand gemessen von einem Bezugszustand (siehe Text). Der gelbe Bereich markiert alle Zustände in dem Sattelcluster. Die Konfigurationen, die die Verbindung mit den Grundzustandclustern haben, sind grün (Ec2) und rot (Ec1) gekennzeichnet. . . . . 28
- 3.8 Darstellung des Wechselwirkungsgitters und der Lage der freien Spins für zwei Cluster des repräsentativen Systems nach [14]. Durch die Farbe blau werden die Spins in c1 (c2) gekennzeichnet, die in 8 (12) Konfigurationen als frei auftreten. Durch die Farbe rot werden die in allen Konfigurationen des Clusters als frei auftretende Spins gekennzeichnet. . . . . 29
- 3.9 Schematische Darstellung der Struktur der Grundzustände nach [62].  $d1$  und  $d2$  stellen die Spindomäne dar. Mit BFS bezeichnete Spins gehören keiner der Domänen an. Die Aufspaltung der Zustände in  $C$  und  $\overline{C}$  entspricht der Spiegelsymmetrie. . . 30
- 3.10 Spindomänen im repräsentativen System. Man vergleicht die Richtungen der einzelnen Spins in den Clustern  $c1, \overline{c2}$ . Die blauen Punkten bezeichnen die freien Spins. Die gelben Punkte bezeichnen Spins, die in beiden Clustern in entgegengesetzten Richtungen stehen, entsprechend bezeichnen die roten Punkte Spins in gleicher Richtung. . . . . 31
- 3.11 Die Energielandschaft für ein System  $L = 6$  bis zur ersten Anregung. Es ist nur die Hälfte aller Zustände ohne ihre Spiegelzustände dargestellt. Es existieren weiterhin metastabile Zustände in der ersten Anregung, diese sind jedoch nicht gezeigt. . . . . 33
- 3.12 Darstellung des Wechselwirkungsgitters und der Lage der freien Spins (BFS, farbig) für zwei Cluster des  $L = 6$  Systems. Durch die Farbskala wird die Anzahl der Konfigurationen markiert, in denen ein Spin als frei auftritt (z.B. bedeutet die Farbe rot, dass der Spin in allen Konfigurationen als frei auftritt). . 35

3.13	Spindomänen im $L = 6$ System analog zum Abb. 3.10; S. 31. Die Richtungen der einzelnen Spins in den Clustern $c2$ mit $\overline{c1}$ (oben) und $c2$ mit $\overline{c2}$ (unten) werden verglichen. Die blauen Punkte bezeichnen die freien Spins. Die gelben Punkte bezeichnen Spins, die in beiden Clustern in entgegengesetzten Richtungen stehen, entsprechend bezeichnen die roten Punkte Spins in gleicher Richtung. . . . .	36
3.14	Spindomäne im $L = 6$ System analog zur Abb. 3.13; Vergleich der Cluster: $c1$ mit $c2$ (oben) und $c1$ mit $\overline{c1}$ (unten). . . . .	37
4.1	Rate der Akzeptanz - das Verhältnis der Anzahl der akzeptierten Zustände zu allen neu erzeugten für verschiedene $\beta$ eines $2D$ Spinglas-Modells ( $N = 70 \times 70$ ) vs. MCS. Die Anzahl der neu akzeptierten Zustände fällt stark mit wachsendem $\beta$ . . . .	42
4.2	Die Abhängigkeit der WTM-Zeit von der Anzahl der <i>updates</i> für $2D$ Ising System mit $N = 70 \times 70$ Spins: geordnetes antiferromagnetisches System für verschiedene $\beta$ (rechts); $\pm J$ Spinglas für $\beta = 1.25$ (links) in Abhängigkeit vom gewählten Anfangszustand; rot - höhere Anregung, grün - Grundzustand, blau - Gleichgewichtszustand für $\beta = 1.25$ . . . . .	44
4.3	Vergleich der Relaxationszeiten (Energie vs. Zeit) bei einem geordneten antiferromagnetischen $70 \times 70$ System für $T = 1.3$ (oben) und $T = 1.8$ (unten); obere Abszisse - WTM- Zeit, untere Abszisse - Metropolis Zeit (MC); $s = 5500$ für beide Temperaturen, siehe Text. . . . .	45
4.4	Vergleich der Relaxationszeiten (Energie vs. Zeit) bei einem ungeordneten $3D$ Spinglas-System ( $N = 6 \times 6 \times 6$ ) für $T = 1.3$ (oben) und $T = 1.0$ (unten); obere Abszisse - WTM- Zeit, untere Abszisse - Metropolis Zeit (MC); $s = 200$ für beide Temperaturen, siehe Text. . . . .	46
4.5	Die Relaxation der Korrelationsfunktion für das repräsentative System $N = 4 \times 4 \times 4$ . (Zeiteinheiten in Monte Carlo Schritten pro Spin.) . . . . .	47
4.6	Verteilung der Energie im Gleichgewicht in Abhängigkeit vom Anregungsspektrum für ein Spinglas-System mit $N = 4 \times 4 \times 4$ (Gr - Grundzustand; An - Anregung). Die Ordinatenwerte geben die Häufigkeiten für die Besetzung der Energieniveaus an. Die diskreten Werte des Spektrums werden jeweils durch Kurven verbunden. . . . .	48
4.7	Relaxation der Korrelationsfunktion für ein $2D$ Spinglas-Modell ( $L = 70$ ) vs. Zeit, gemessen in Monte Carlo Schritten. . . . .	50

4.8	Ein individueller Lauf durch die Landschaft für $\beta = 2.0$ ( $T = 0.5$ ; oben) und $\beta = 2.5$ ( $T = 0.4$ ; unten). Die Ordinate ist in zwei Täler ( <i>valley1</i> und <i>valley 2</i> ) und den Sattelcluster zwischen beiden (gelb) aufgeteilt, die energetische Anregungen werden jeweils hervorgehoben. Der Lauf beginnt einmal in dem linken (rot) und einmal in dem rechten Cluster (grün), siehe Abb. 3.4; S. 23. . . . .	51
4.9	Spinkorrelationsfunktion vs. Zeit für das repräsentative System ( $L = 4$ ). Die Anfangskonfiguration wurde aus der Menge der Zustände des Grundzustandsclusters des Tales #1 bzw. #2 ausgewählt, ( $\beta = 2.5$ ). . . . .	52
4.10	Die Relaxation der Energie für das geordnete $2D$ System ( $L = 70$ ). Bei der Temperaturen $T = 0.909$ und $T = 0.8$ ist auch die Relaxation von Grundzustand aus (unten) dargestellt, ansonsten ist der Endzustand der Grundzustand. . . . .	55
4.11	Gleichgewichtswerte der Energie als Funktion der Temperatur für ein geordnetes endliches $2D$ System ( $L = 70$ ), analytisch berechnet nach [75] im Vergleich mit WTM Simulationen. . . .	56
4.12	Relaxation der Energie für das geordnete $3D$ System ( $L = 10$ ) von verschiedenen Startkonfiguration aus: oben - zufällig gewählter Zustand; unten - Grundzustand ( $T = 1.67$ und $T = 1.43$ ). . . . .	57
4.13	Relaxation der Energie für ein $2D$ Spinglas-Modell ( $L = 70$ ) von verschiedenen Startkonfiguration aus: oben - zufällig gewählter Zustand; unten - Grundzustand ( $T = 0.5$ und $T = 0.6$ ), MCS bezeichnet Monte Carlo Schritte pro Spin. . . . .	58
4.14	Relaxation (Energie vs. WTM Schritte) für ein $3D \pm J$ Spinglas-Modell ( $L = 14$ ), $E_0 = -4904$ ; $T = 0.7$ ; $0.65$ ; $0.6$ . . . . .	59
4.15	Energielücke versus Temperatur. Die blaue Linie entsteht durch Anpassung an eine Gerade. Aus deren Koeffizienten lässt sich die Temperatur $T_{rl} = 0.721 \pm 0.074$ bestimmen. . . . .	60
4.16	Temperaturen $T_{rl}$ in Abhängigkeit von der Systemgröße des Gitters. Die grüne Kurve entspricht der Anpassung (4.11) und die blaue der Anpassung (4.12). . . . .	61
A.1	Abhängigkeit der mittleren Anzahl der Iterationen, die gebraucht werden, um festzustellen, dass eine Konfiguration schon existiert, von der Anzahl der berücksichtigten freien Spin. . . . .	81
C.1	Die Flucht aus dem Tal erfolgt nur über den Sattelcluster in der ersten Anregung. . . . .	87

C.2	Die Situation ist identisch mit der vorherigem Übergang abgesehen davon, dass das System dreimal den größten Cluster in der zweiten Anregung berührt. . . . .	88
C.3	Hier erfolgt den Übergang über den größten Cluster in der zweiten Anregung. Dabei wird der Sattelcluster in der ersten Anregung zwischenzeitlich auch berührt. . . . .	88



# Tabellenverzeichnis

3.1	Energie $e_o$ und Entropie $s_o$ pro Spin für den Grundzustand von Spinglas-Modellen der Dimension $D$ , berechnet mit verschiedenen Methoden. Die Werte sind Extrapolationen auf ein unendlich großes Gitter. $L_{max}$ gibt die maximale Länge der quadratischen und kubischen Gitter an, mit der die Extrapolation durchgeführt wurde. . . . .	14
3.2	Charakteristische Eigenschaften der Grundzustände für 8555 Systeme der Größe $4 \times 4 \times 4$ , dabei wurde jeder Zustand und sein spiegelsymmetrischer Zustand nur einmal gezählt (s. Kap. 2.). Die Werte sind für Systeme mit unterschiedlicher Grundzustandsenergie $E_0$ angegeben ( $n_{sys}$ - Anzahl gefundenen Systeme, $\bar{s}_o$ - mittlere Entropie pro Teilchen, $\bar{n}_{Cl}$ - mittlere Anzahl der Cluster, $\bar{n}_{GS}$ - mittlere Anzahl aller Zustände). Die letzte Zeile gibt die Werte gemittelt über alle 8555 Systeme an.	16
3.3	Charakteristik der Struktur der ersten Anregung für 8555 Systeme der Größe $4 \times 4 \times 4$ analog zu Tab 3.2: Mittlere Anzahl der Konfigurationen ( $\overline{St}_{Anr}$ ), Cluster ( $\overline{Cl}_{Anr}$ ), Konfigurationen in Sattelclustern ( $\overline{St}_{Sdl}$ ), Sattelcluster ( $\overline{Cl}_{Sdl}$ ), metastabilen Zustände ( $\overline{St}_{Ms}$ ), metastabilen Cluster ( $\overline{Cl}_{Ms}$ ). . . . .	16
3.4	Die Anzahl der Verbindungen zwischen den beiden Grundzustandcluster c1 und c2 und ihren Tal- und Sattelclustern in der höheren Anregungen. Ein Tal bezeichnet alle Cluster, die zu den Clustern im Grundzustand c1 bzw. c2 gehören. Sattelcl bezieht sich in der ersten Anregung ( $E_1$ ) nur auf den einen existierenden Sattelcluster, in der zweiten Anregung ( $E_2$ ) sind die Verbindungen zu beiden Sattelclustern berücksichtigt. . . .	24

4.1	Vergleich der Gleichgewichtsenergie für verschiedene Werte des Parameters $\beta$ für Metropolis Algorithmus und Waiting Time Method für ein $2D$ antiferromagnetisches System $L = 70$ (Grundzustandsenergie $E_0 = -9800$ ). Als Anfangszustand wurde eine zufällige Konfiguration mit einer Energie $> 0$ gewählt. Es wurde über 50 verschiedene Läufe gemittelt. . . . .	43
4.2	Werte der Parameter der Anpassung für das nicht-exponentielle Verhalten (4.6) der Korrelationsfunktion (a - repräsentatives System; b - $2D$ Spinglas-Modell $L = 70$ . . . . .	49
4.3	Vergleich des Plateau-Wertes $q_{pl}$ der Spinkorrelationsfunktion der Simulationen (Abb. 4.9; S. 52) mit der Berechnungen aus dem mittleren Hammingabstand (Gl. 4.10; S. 52) . . . . .	53
4.4	Die Temperaturwerte $T_{rl}$ für verschiedene Systemgröße $L$ , berechnet für repräsentative und alle verfügbaren Systeme. . . .	60
B.1	Die Klassifikation der BFS-Struktur. AQT bezeichnet die Quotienten des Auftretens für freie Spins. . . . .	85

# Anhang A

## Bestimmung der Konfigurationen eines Clusters.

Anhang In diesem Anhang wird der Algorithmus *ClusterBau* (siehe unten) für die exakte Berechnung aller zu einem Cluster gehörigen Zustände vorgestellt. Bei bekannter Spinanzahl  $N$  und gegebenen Wechselwirkungen  $J_{ij}$  steht zu Anfang eine einzige Konfiguration  $S^0$  zur Verfügung. Die Konfiguration wird zu einer anfangs leeren Konfigurationenschar  $A$  addiert (Zeile #2), in der alle gefundene Konfigurationen gespeichert werden. Gleichzeitig wird der Wert des Zählers der erzeugten Zustände  $n_{erz} := 1$  gesetzt. In der Zeile #3 beginnt der eigentliche Algorithmus. Die Schleife wird so lange durchlaufen, bis die Anzahl der erzeugten Konfigurationen  $n_{erz}$  gleich der Anzahl der untersuchten  $n_{unt}$  ist. Man nimmt dann die  $n_{unt}$ -te Konfiguration aus der Schar  $A$  und sucht nach freien Spins. Sobald ein solcher gefunden wurde (Zeile #6), dreht man ihn um. Nachdem die nächste Konfiguration erzeugt wurde (Zeile #8), überprüft man in der Prozedur *Check* (Zeile #9), ob ein solcher Zustand schon existiert. Ist dies nicht der Fall, wird die Konfiguration zu der Menge der erzeugten Konfiguration  $A$  hinzugefügt und der Zähler der erzeugten Zustände  $n_{erz}$  um Eins vergrößert. Sobald bei der Konfiguration  $S^{n_{unt}}$  alle freie Spins gefunden wurden, wird der Zähler der untersuchten Zustände  $n_{unt}$  um Eins vergrößert und die nächste Konfiguration aus der Menge  $A$  untersucht. Der größte Bedarf an Rechenzeit entsteht durch den vielfachen Aufruf der Prozedur *Check*. Der Grund dafür ist, daß man jede erzeugte Konfiguration mit den schon bestehenden vergleichen muss. Dadurch wird die Prozedur  $n_{ch}$ -mal aufgerufen, d.h.

$$n_{ch} = \sum_{\alpha=1}^{n_{kon}} k_{fr}^{\alpha} \sim n_{kon}$$

Dabei ist  $n_{kon}$  die Anzahl der Zustände in einem Cluster und  $k_{fr}^{\alpha}$  die Anzahl freier Spins in der Konfiguration  $S^{\alpha}$ .

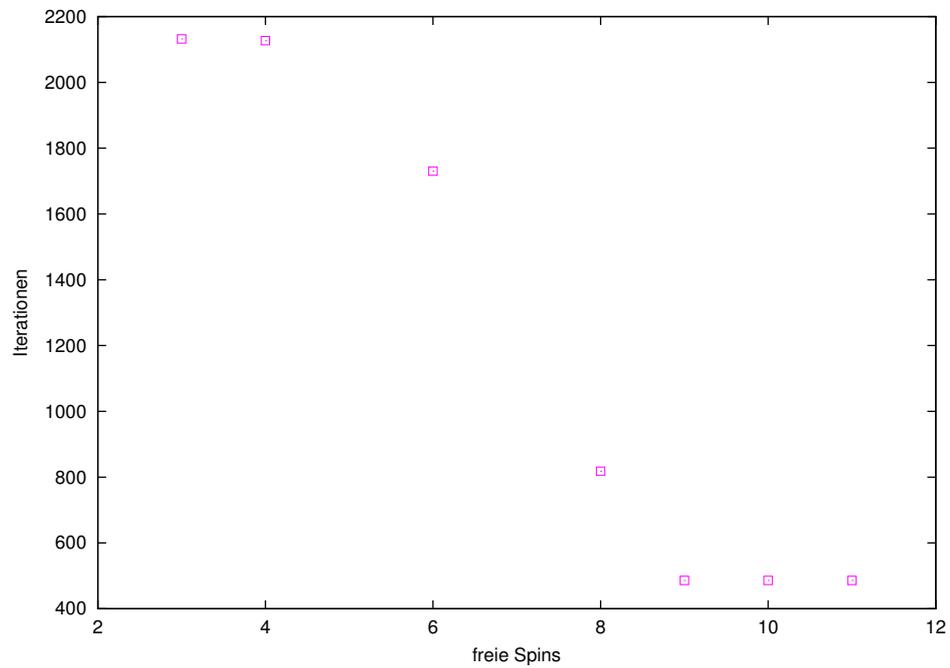
**Algorithmus** ClusterBau( $s^0, J, N$ )

```

begin
   $n_{unt} := 0; n_{erz} := 0;$            1 - Initialisierung der Variablen
   $A(n_{erz}) := s^0; n_{erz} := n_{erz} + 1;$  2
  while ( $n_{unt} \neq n_{erz}$ )           3
  begin
     $s^\alpha := A(n_{unt});$            4
    for  $i=1$  to  $N$                    5
    begin
      if ( $\sum_j J_{ij}s_j^\alpha = 0$ )       6 - Finden eines freien Spin
      then
         $s_i^\beta := s_i^\alpha;$            7
         $s_i^\beta := -s_i^\beta;$          8 - erzeugt eine Konfiguration
        if ( $\text{Check}(A, s^\beta)$ )       9 - prüft, ob sie neu ist
        then                            10 - wenn ja, hinzufügen zu
           $A(n_{erz}) := s^\beta;$          der Menge der gefundenen
           $n_{erz} := n_{erz} + 1;$        Konfigurationen
        end                            11
       $n_{unt} := n_{unt} + 1;$ 
    end
  end                                   12
end

```

Es ist leider nicht möglich, die Anzahl der Aufrufe der Prozedur zu verringern. Der einzige Weg, um Rechenzeit zu sparen, besteht darin, die Prozedur *Check* so geschickt zu konstruieren, dass die Anzahl der Vergleiche  $n_{vg}$  möglichst klein wird. Ansonsten bleibt die Anzahl der Vergleiche  $n_{vg} \sim n_{kor}$ . Die Rechenzeit wächst damit mit der Größe des Clusters wie  $O(n_{kor}^2)$ . Die Reduzierung der Anzahl der Vergleiche  $n_{vg}$  kann durch geeignete Gruppierung der gefundenen Zustände erreicht werden. Man gruppiert nach der Magnetisierung, das führt zu  $n_{vg} \sim n_{kor}/n_{mag}$ . ( $n_{mag}$  kann Werte zwischen 1 und  $N$  annehmen). Natürlich kommt der Wert  $n_{mag} = N$  nie in einem Grundzustand vor. Die nächste Gruppierung kann auf Grund der unterschiedlichen Konfigurationen der freien Spins durchgeführt werden. Wenn man  $n$  freie Spin berücksichtigt, dann ist  $n_{vg} \sim n_{kor}n_{mag}^{-1} 2^{-n}$ . Auf diese Weise kann die Rechenzeit deutlich verringert werden. Trotz der Verbesserungen wächst die Zeit immer noch mit  $n_{kor}$  wie  $O(n)$ . Dies macht die Berechnungen für grosse Cluster praktisch unmöglich. In Abb. A.1; S. 81 ist die Abhängigkeit der mittleren Anzahl der Iterationen (während deren Durchführung festgestellt worden ist, dass eine Konfiguration schon existiert) von der Anzahl der berücksichtigten Spins  $n$  zu sehen. Man sieht, dass die Anzahl der Iterationen fast um den Faktor 5 abnimmt, wenn die Spinanzahl von 3 auf 9 steigt. Eigentlich sollte das Faktor  $2^9/2^3 = 2^6$  sein. Das wäre der Fall, wenn



**Abbildung A.1:** Abhängigkeit der mittleren Anzahl der Iterationen, die gebraucht werden, um festzustellen, dass eine Konfiguration schon existiert, von der Anzahl der berücksichtigten freien Spin.

die Konfigurationen gleichmäßig in der Gruppen verteilt sind. Dies ist leider fast nie der Fall.



# Anhang B

## Die Grundzustandsstrukturen der freien Spins (BFS)

Anhang Benachbarte freie Spins (BFS) bilden im Realraum interessante Strukturen. Eine solche BFS-Struktur wird durch einen so genannten Entartungsgrad charakterisiert. Zunächst konzentrieren wir uns auf einigen Eigenschaften der freien Spins im Grundzustand. In Kapitel 3.4.1 wurde schon erwähnt, dass das auf einen freien Spin wirkende effektive Feld verschwinden muss:

$$h_i^{eff} = \sum_j J_{ij} S_j = 0. \quad (\text{B.1})$$

Im Grundzustand muss für zwei benachbarte freie Spins  $S_a$  und  $S_b$  noch eine zusätzliche Bedingung erfüllt werden:

$$S_a \cdot S_b \cdot J_{ab} = -1. \quad (\text{B.2})$$

Um diese Bedingung zu erläutern, wird z.B der Spin  $S_a$  umgedreht ( $S_a \rightarrow -S_a$ ). Daraus folgt, dass der Spin  $S_b$  nicht mehr frei ist. Nur ein Summand in (B.1) verändert sein Vorzeichen und damit ist nunmehr

$$h_b^{eff} \neq 0. \quad (\text{B.3})$$

Im Grundzustand muss für jedes  $i$  gelten:

$$S_i \cdot h_i^{eff} \geq 0, \quad (\text{B.4})$$

ansonsten würde die Energie nach dem Umdrehen von  $S_i$  erniedrigt werden können. Daraus folgt mit (B.3):

$$S_b \cdot h_b^{eff} > 0. \quad (\text{B.5})$$

Man kann die Ungleichung (B.5) umschreiben zu

$$S_b \cdot h_b^{eff} = S_b \cdot (-S_a \cdot J_{ab} + S_x \cdot J_{xb}) > 0, \quad (\text{B.6})$$

da sich die anderen Termen in der Summe (B.1) (außer  $S_a \cdot J_{ab}$  und einem der  $S_x \cdot J_{xb}$ ) kompensieren. Daraus folgt

$$-S_a \cdot S_b \cdot J_{ab} > 0 \Rightarrow S_a \cdot S_b \cdot J_{ab} = -1. \quad (\text{B.7})$$

Damit haben wir die Beziehung (B.2) nachgewiesen.

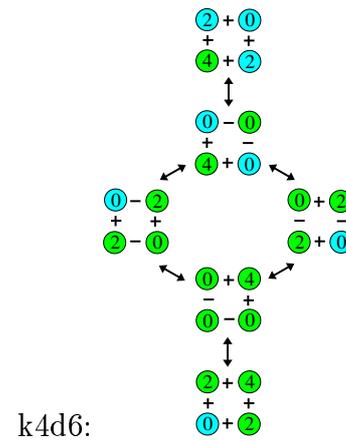
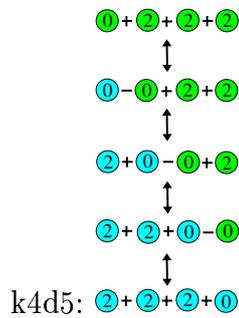
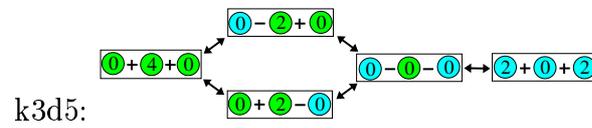
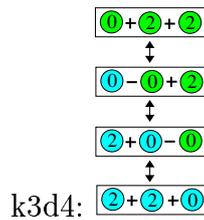
Im weiteren werden wir einen Spinzustand als farbigen Kreis mit einer Zahl kennzeichnen. Die Zahl gibt  $S_a h_a^{eff}$  für den Spin  $S_a$  an. In den Strukturen steht immer zwischen zwei Spins  $S_a$  und  $S_b$  ein Zeichen, das den Wert  $j_{ab} = S_a \cdot S_b \cdot J_{ab}$  angibt. Die Farben der Spinzustände informieren uns nur über dem Übergang zwischen zwei Zuständen. Man kann in einer Konfiguration die Spins willkürlich auswählen, solange die Auswahl nicht den Werten  $S_a h_a^{eff}$  und  $j_{ab}$  widerspricht. Dann aber muss man konsequent bei Veränderung der Farbe bei einem Spin seinen Zustand ändern. Die BFS-Struktur bezeichnen wir mit dem Symbol  $kx dy$ , dabei gibt  $x$  die Anzahl der Spins in der Struktur und  $y$  den Entartungsgrad. In der Tabelle B.1 werden die Bezeichnungen der gefundenen BFS und ihre charakteristische Eigenschaften dargestellt. Bis  $k = 3$  Spins entstehen nur Ketten von Spins. Bei vier Spins entsteht zusätzlich eine kompliziertere BFS-Struktur, nämlich ein Ring. Ein Ring wie k4d6 wurde schon von Vogel und Kobe [60] diskutiert. Es ist am einfachsten, eine BFS-Struktur im Realraumbild eines Clusters durch die Anzahl dort auftretenden Spins und die Häufigkeit des Auftretens derselben  $y$  kennzeichnen. Die Kenntnis der BFS-Strukturen ermöglicht uns die Berechnung des Auftretens Quotienten (AQT) von einzelnen Spin. In der Struktur k2d3 ist AQT  $2 : 2$ . Das bedeutet, dass jedes Spin in der BFS mit derselben Häufigkeit auftritt und zwar in  $\frac{2}{3}$  der Konfigurationen (3 ist der Entartungsgrad der Struktur). Daraus kann man auch die Anzahl der Konfigurationen berechnen, in denen das Spin frei ist:  $n = \frac{2}{3} \cdot n_{cl}$ . In folgenden sind alle Konfigurationen der oben erwähnten Strukturen dargestellt, beginnend von dem trivialen k1d2.

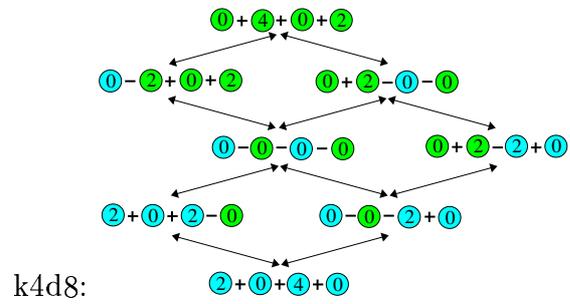
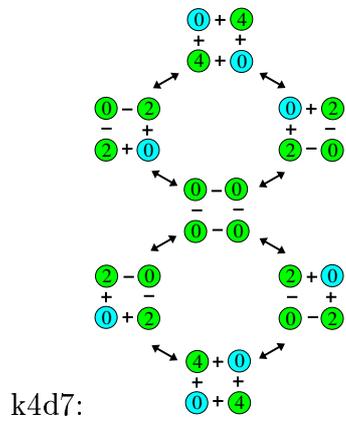
k1d2: 

k2d3: 

Struktur	Entartungsgrad	Spinanzahl	AQT
k1d2	$g_1 = 2$	1	1 : 1
k2d3	$g_2 = 3$	2	2 : 2
k3d4	$g_3 = 4$	3	2 : 2 : 2
k3d5	$g_4 = 5$	3	4 : 2 : 4
k4d5	$g_5 = 5$	4	2 : 2 : 2 : 2
k4d6	$g_6 = 6$	4	4 : 2 : 2 : 4
k4d7	$g_7 = 7$	4	4 : 4 : 4 : 4
k4d8	$g_8 = 8$	4	6 : 4 : 4 : 6

**Tabelle B.1:** Die Klassifikation der BFS-Struktur. AQT bezeichnet die Quotienten des Auftretens für freie Spins.

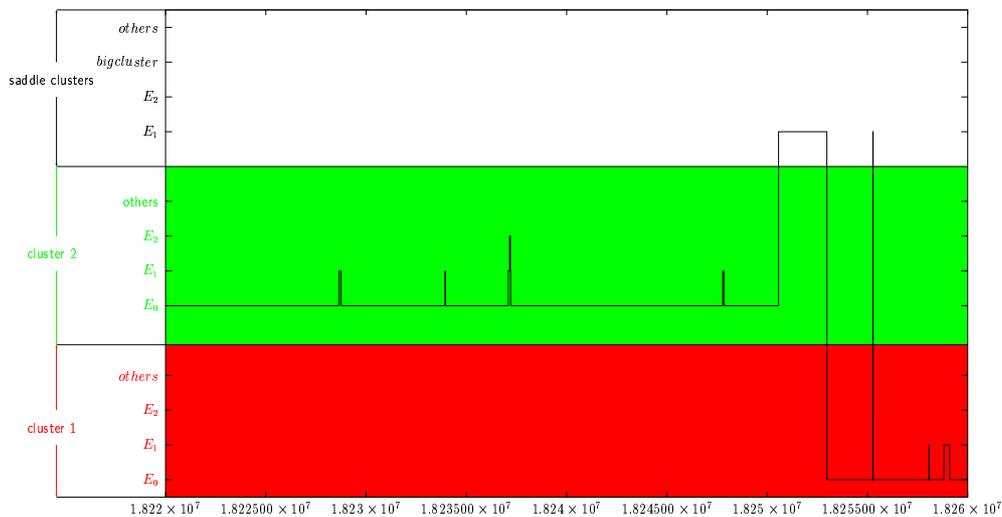




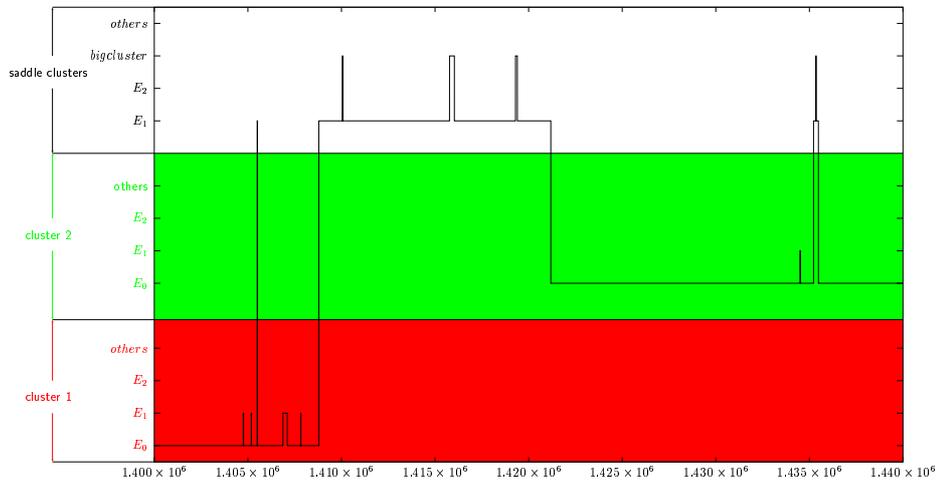
# Anhang C

## Übergang zwischen zwei Tälern

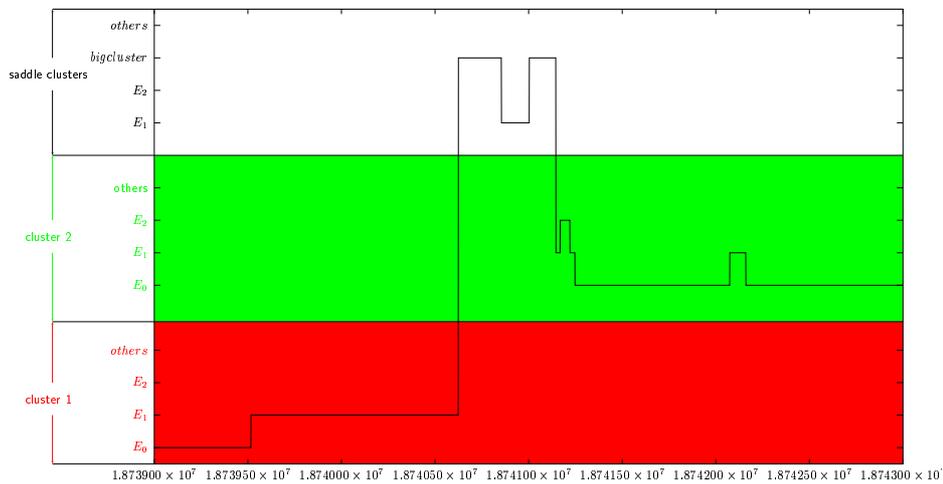
Anhang Der Übergang zwischen zwei Tälern kann auf verschiedene Weise geschehen. Wir möchten hier drei Beispiele für den Übergang darstellen. Auf allen Abbildungen ist den Übergang von einem Tal durch angeregte Zustände zu dem anderen Tal bei  $T = 0.56$  zu sehen. Die Beschreibung der Achsen entspricht der in Abb. 4.8; S. 51.



**Abbildung C.1:** Die Flucht aus dem Tal erfolgt nur über den Sattelcluster in der ersten Anregung.



**Abbildung C.2:** Die Situation ist identisch mit der vorherigem Übergang abgesehen davon, dass das System dreimal den größten Cluster in der zweiten Anregung berührt.



**Abbildung C.3:** Hier erfolgt den Übergang über den größten Cluster in der zweiten Anregung. Dabei wird der Sattelcluster in der ersten Anregung zwischenzeitlich auch berührt.