

Numerische Untersuchungen von Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtseigenschaften verdünnter Antiferromagnete

Vom Fachbereich Physik-Technologie der
Gerhard-Mercator-Universität – GH Duisburg
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation

von

Michael Staats

aus Duisburg

Referent: Prof. Dr. K. D. Usadel

Korreferent: Prof. Dr. Schreckenberg

Tag der mündlichen Prüfung: 23. August 1999

Zusammenfassung

Magnetische Modelle mit starker Unordnung sind Thema dieser Arbeit. Verdünnte Antiferromagnete in einem äußeren Feld (DAFF, *diluted antiferromagnets in a field*) sind von besonderem Interesse, sowohl aus theoretischer, als auch aus experimenteller Sicht. Es wird vermutet, daß das Random-Field Ising-Modell (RFIM) in der gleichen Universalitätsklasse wie der DAFF ist. Die Verifikation dieser Annahme ist eine wesentliche Voraussetzung für die experimentelle Überprüfung theoretischer Ergebnisse für das RFIM, für das es keine direkte experimentelle Realisation gibt.

Durch die Analyse exakt berechneter Grundzustände und von Monte Carlo-Simulationen mit Single-Spin-Flip- und Clusteralgorithmen werden in dieser Arbeit kritische Exponenten verdünnter Antiferromagnete an verschiedenen Stellen im Temperatur-Magnetfeld Phasendiagramm bestimmt. Die Ergebnisse zeigen, daß nur eine bestimmte Unterklasse von RFIM-Systemen in der gleichen Universalitätsklasse wie der DAFF ist, dies ist in Übereinstimmung mit anderen neueren Arbeiten. Besondere Beachtung verdienen die spezifische Wärme und ihr kritischer Exponent α , denn gerade bei diesen Größen weisen experimentell und analytisch bzw. durch Simulationen bestimmte Ergebnisse die größten Diskrepanzen auf. Die durchgeführten Untersuchungen weisen auf eine Divergenz der spezifischen Wärme am Phasenübergang hin, also auf einen positiven Wert des kritischen Exponenten α . Simulationen der Irreversibilitäten der spezifischen Wärme sind in Übereinstimmung mit neuesten Messungen.

Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Untersuchung der Dynamik von DAFF-Systemen im Nichtgleichgewicht. Die Relaxationsdynamik des DAFF ist von thermischer Aktivierung bestimmt. Durch eine grafische Auswertung von Spinkonfigurationen wird gezeigt, daß der Relaxationsmechanismus der Magnetisierung nach Feldausschalten vergleichbar dem des Zerfalls des antiferromagnetischen Ordnungsparameters nach Feldeinschalten ist. Die analytische Form des Abfalls der Magnetisierung ist ebenfalls übertragbar. Weiterhin wird gezeigt, daß auch im DAFF *Aging*-Effekte auftreten, wie sie aus vielen anderen ungeordneten Systemen bekannt sind.



Summary

Magnetic models with strong disorder are the topic of this work. Diluted antiferromagnets in an external field (DAFF) are of special interest, both from a theoretical, and from an experimental point of view. It is assumed that the random field Ising model (RFIM) is in the same universality class as the DAFF. The verification of this hypothesis is a substantial prerequisite for the transferability of experimental results for the DAFF to the RFIM, for which there is no direct experimental realization.

In this work critical exponents at various points in the temperature vs. magnetic field phase diagram are determined by the analysis of exact calculated ground states and of Monte Carlo simulations, which were carried out using single-spin-flip- as well as cluster-algorithms. The results show, that only a certain subclass of RFIM systems are in the same universality class as the DAFF. This is in agreement with recently published results. The specific heat and its critical exponent α deserve special attention. For these quantities there exist the largest discrepancies between experimental, analytical and simulation data. The investigations that were carried out in this work indicate a divergence of the specific heat at the phase transition, i. e. a positive value of the critical exponent α . Simulations of irreversibilities of the specific heat are in agreement with latest measurements.

Further emphasis is put on the investigation of the non-equilibrium dynamics of the DAFF. The relaxation dynamics of the DAFF is governed by thermal activation. It is shown by a graphical analysis of spin configurations that the relaxation mechanism of the magnetization after switching off the external field is comparable to that of the antiferromagnetic order parameter after switching on the field. The analytic form of the decay is likewise transferable. Further it is shown that also the DAFF exhibits *Aging* effects, as they are known from many other disordered systems.



Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	3
Summary	5
1 Einleitung	13
1.1 Ungeordnete Systeme	13
1.2 Computersimulationen	14
1.3 Verdünnte Antiferromagnete	16
1.3.1 Experimentelle Systeme	16
1.3.2 Modellsysteme	17
2 Grundlagen	19
2.1 Die Hamiltonfunktion des DAFF	19
2.2 Verwandte Systeme	20
2.3 Einfluß der Unordnung: Domänen	22
2.4 Phasendiagramme	24
2.5 Einfluß der Unordnung: Irreversibilitäten	29
2.6 Spinglasartige Dynamik	32
3 Kritische Exponenten für hohe Felder und tiefe Temperaturen	35
3.1 Der DAFF mit gaußverteilten Kopplungen	36
3.2 Meßgrößen	38
3.3 Die Meßdaten	39
3.4 Analyse der Meßdaten	42
3.4.1 <i>Finite-Size-Scaling</i>	42
3.4.2 Diskussion der Ergebnisse	50

4	Die spezifische Wärme	53
4.1	Keine Irreversibilitäten?	54
4.2	Simulationen	54
4.3	Gleichgewichtsverhalten	58
4.4	Diskussion des Gleichgewichtsverhalten	66
4.5	Nichtgleichgewichtsverhalten	71
4.6	Diskussion des Nichtgleichgewichtsverhalten	74
5	Relaxationsverhalten verdünnter Antiferromagnete	77
5.1	Simulationen zum Relaxationsverhalten	78
5.2	Analyse der Meßdaten	80
5.2.1	Vorüberlegungen	80
5.2.2	Skalierung der Daten	83
5.3	Diskussion der Ergebnisse	85
6	Wartezeitabhängiges Verhalten	87
6.1	Simulationen zum <i>Aging</i> -Verhalten	88
6.2	Auswertung und Diskussion der Ergebnisse	88
A	Skalentheorie	95
A.1	Grundlagen der Skalentheorie	95
A.1.1	Skalenhypothese	95
A.1.2	Kadanoff Block Scaling	97
A.1.3	<i>Finite-Size-Scaling</i>	98
A.2	Besonderheiten des Random-Field Ising-Modells	100
A.2.1	Das kritische Verhalten von $\partial M/\partial T$	100
A.2.2	Modifizierte Skalenrelation bei $T = 0$	102
	Literaturverzeichnis	103

Abbildungsverzeichnis

2.1	Das Mean-Field Phasendiagramm des RFIM	25
2.2	Das Mean-Field Phasendiagramm des DAFF	26
2.3	Phasendiagramm des RFIM mit Brechung der Replica-Symmetrie	28
2.4	Das Monte Carlo-Phasendiagramm des DAFF	29
2.5	Gemessene Irreversibilitäten in der Magnetisierung des DAFF	31
2.6	Relaxieren der Magnetisierung eines DAFF	33
3.1	Ordnungsparameter-Meßdaten der exakten Grundzustände [53].	40
3.2	Spezifische Wärme für $T = 1,0$	41
3.3	Skalenplot für den Ordnungsparameter des DAFF.	45
3.4	Skalenplot für die <i>staggered, disconnected</i> Suszeptibilität des DAFF.	46
3.5	Skalenplot für die Ableitung der inneren Energie	47
3.6	Skalenplot für M_{st} des DAFF für $T = 0,4$	48
3.7	Skalenplot 1 für M_{st} des DAFF für $T = 1,5$	49
3.8	Skalenplot 2 für M_{st} des DAFF für $T = 1,5$	50
3.9	Innere Energie des DAFF für $B = 0,8$	51
4.1	Die spezifische Wärme von $Fe_{0,58}Zn_{0,42}F_2$	55
4.2	Die spezifische Wärme von $Fe_{0,5}Zn_{0,5}F_2$	56
4.3	Die spezifische Wärme von $Fe_{0,93}Zn_{0,07}F_2$	57
4.4	Test des üblichen Single-Spin-Flip-Algorithmus	58
4.5	(M_{st}) -Skalenplot für den temperaturgetriebenen Phasenübergang	60
4.6	$(\chi_{dis,st})$ -Skalenplot für den temperaturgetriebenen Phasenübergang	61
4.7	Die spezifische Wärme	62
4.8	Systemgrößenabhängigkeit der spezifischen Wärme	62
4.9	Skalenplots für ein zweidimensionales Ising-Modell	64
4.10	Rohdaten $\partial M/\partial T$	65

4.11	Skalenplot 1 für $\partial M/\partial T$	65
4.12	Skalenplot 2 für $\partial M/\partial T$	66
4.13	Skalenplot 3 für $\partial M/\partial T$	67
4.14	Die innere Energie in einem <i>zfc-fc</i> Zyklus	73
4.15	Der antiferromagnetische Ordnungsparameter in einem <i>zfc-fc</i> Zyklus	73
4.16	Die spezifische Wärme in einem <i>zfc-fc</i> Zyklus	74
5.1	Magnetisierung aufgetragen über der Zeit nach Feldausschalten . .	80
5.2	Domänenkonfiguration	81
5.3	Änderungen im System nach Ausschalten des Feldes	82
5.4	Die Magnetisierung abhängig von der skalierten Zeit	84
5.5	Funktionale Abhängigkeit der Magnetisierung von der Zeit	84
5.6	Doppelt-logarithmische Auftragung $M(T \ln(t/\tau))$	86
6.1	Rohdaten für $C(t_w, t)$	89
6.2	Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen t/t_w	90
6.3	Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen $\ln(t/\tau)/\ln(t_w/\tau)$. .	91
6.4	Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen $\ln(t/\tau)/\ln(t_w/\tau)$ für Systeme der Größe $L = 30$	92

Tabellenverzeichnis

3.1	In Kapitel 3 bestimmte kritische Exponenten	52
4.1	Exponenten im Vergleich	72
5.1	Ergebnisse für die Konstanten in Gleichung 5.2 für $d = 2$ und $d = 3$	85

1 Einleitung

1.1 Ungeordnete Systeme

Ungeordnete Systeme stellen und stellen eine große Herausforderung sowohl in der theoretischen statistischen Physik als auch in experimenteller Hinsicht dar. Unter dem Begriff „Unordnung“ werden sehr viele Effekte zusammengefaßt, beispielsweise Verunreinigungen jeder Art, wie sie praktisch unvermeidbar sind, oder Systeme mit ortsabhängig statistisch verteilten Materialkonstanten wie strukturelle Gläser oder Spingläser. Insbesondere ungeordnete magnetische Systeme stellen seit Jahrzehnten einen Schwerpunkt der Forschung dar, dies gilt auch für diese Arbeit.

Während in geordneten, homogenen magnetischen Systemen viele Fragen abschließend geklärt werden konnten, gibt es auf dem Gebiet der ungeordneten Systeme wesentlich mehr offene Fragen. In homogenen Systemen existieren auch für nicht triviale Probleme wie das zweidimensionale Ising-Modell [1] exakte Lösungen [2], für viele andere Probleme wie das dreidimensionale Ising-Modell oder auch kompliziertere Spin-Modelle wie etwa das Heisenberg-Modell gibt es hochpräzise Simulationen und Näherungslösungen, z. B. ist die kritische Temperatur des dreidimensionalen Ising-Modells mit einer Genauigkeit von 10^{-6} bekannt [3]. Mean-Field Lösungen, bei denen Vielteilchenprobleme auf ein effektives Einteilchenproblem reduziert werden, sind in vielen Fällen recht einfach zu erhalten und liefern, abgesehen vom kritischen Verhalten, auch eine qualitativ gute Beschreibung des Verhaltens der zugrundeliegenden Vielteilchenprobleme.

Ganz anders stellt sich die Situation bei ungeordneten magnetischen Systemen dar, insbesondere bei Systemen mit eingefrorener (*quenched*) Unordnung. Diese Unordnung kann in vielerlei Form auftreten. Klassische ungeordnete Systeme sind die sogenannten Spingläser. In Spingläsern ist das Vorzeichen der Wechsel-

wirkung zwischen den magnetischen Momenten ortsabhängig, ösie kann, je nach Ort, ferro- oder antiferromagnetisch sein. Viele Eigenschaften von Spingläsern sind noch ungeklärt. Andere ungeordnete magnetische Systeme, die eine gewisse Verwandtschaft mit den Spingläsern aufweisen¹, sind z. B. Systeme, in denen magnetischen Momente nicht an allen Gitterplätzen vorhanden sind; diese verdünnten Systeme stehen im Mittelpunkt dieser Arbeit. Für derartige (und verwandte) Systeme sind bereits Mean-Field Lösungen [4,5,6] wesentlich komplizierter zu erhalten. So war beispielsweise ein Ausgangspunkt für Computersimulationen [7] zu dem in dieser Arbeit untersuchten verdünnten Antiferromagneten eine Mean-Field Lösung für ein verwandtes System, das *Random-Field Ising Modell* [6].

Weitere Arbeiten theoretischer Art beruhen auf der Renormierungsgruppen-Theorie [8,9,10], die z. B. Skalenrelationen die die kritische Exponenten miteinander in Verbindung setzen, herleiten. Zum Teil werden in diesen Arbeiten jedoch Annahmen etwa über die Domänenstruktur in ungeordneten Systemen gemacht, die nicht ohne weiteres einsichtig sind und in Experimenten und, wie im folgenden erläutert wird, in Simulationen überprüft werden können und müssen.

1.2 Computersimulationen

Um die Eigenschaften ungeordneter System zu untersuchen, sind Computersimulationen sehr wichtige, aus der heutigen statistischen Physik nicht mehr wegzudenkende Methoden. Sie bilden auch den Schwerpunkt dieser Arbeit. Computersimulationen, oft auch treffend als „Computorexperimente“ bezeichnet, stehen zwischen der klassischen theoretischen Physik und der Experimentalphysik. Genau wie in der klassischen theoretischen Physik muß man für eine Computersimulation ein passendes Modell wählen. Man hat so die Möglichkeit, Wichtiges von Ablenkendem zu trennen und die eigentlichen Ursachen für ein bestimmtes Verhalten herauszuarbeiten. Anders als bei analytischer Untersuchungen ist man jedoch nicht auf Vereinfachungen angewiesen, die möglicherweise wichtige Effekte unterdrücken oder gar Artefakte erzeugen. Man kann das Verhalten des Ausgangsmodells direkt studieren und damit analytische Ergebnisse verifizieren oder auch falsifizieren. Ebenso kann man durch die präzise Kontrolle und

¹mehr dazu im Kapitel 2

freie Wahl aller Modellparameter ein wesentlich ungestörteres und umfassenderes Bild vom Verhalten des Modells im gesamten Parameterraum erhalten, als es dem Experimentator möglich ist, der durch die aus seinen Proben und Apparaturen resultierenden Beschränkungen und Fehlerquellen eingeschränkt ist.

Natürlich haben Computersimulationen auch Nachteile gegenüber klassischer Theorie und Experiment. So besteht das Ergebnis einer Simulation zunächst, genau wie im Experiment, aus Rohdaten, die analysiert und gedeutet werden müssen. Welche Mechanismen das Verhalten des Modells beeinflussen, kann nicht direkt den Daten entnommen werden, daher ist ein Vergleich und eine Interpretation der Daten auf Basis von grundlegenden theoretischen Annahmen und Ergebnissen nötig. Im Vergleich zum Experiment muß man sich darauf beschränken, die wichtigsten Eigenschaften etwa eines Kristalls in das Modell aufzunehmen. Die Bestimmung aller Materialeigenschaften *ab initio*, also parameterfrei aus den Grundgleichungen der Quantenmechanik, stellt ein großes Problem dar, dies gilt insbesondere für Temperaturen $T > 0$. Daher ist eine quantitative Beschreibung der Natur ohne die Zuhilfenahme experimentell bestimmter Materialeigenschaften praktisch kaum durchführbar. Auch muß immer überprüft werden, ob das Modell nicht unzulässig vereinfacht worden ist und gemessene Effekte dadurch gar nicht auftreten können. Hinzu kommen ganz praktische Probleme: In Simulationen werden im Vergleich zum Experiment extrem kleine Systeme betrachtet, sie enthalten 1 000 bis zu wenigen Millionen Freiheitsgrade, während experimentelle Systeme in der Größenordnung von 10^{23} Freiheitsgraden liegen. Desweiteren bereitet die benötigte Rechenzeit Probleme; gerade bei ungeordneten Systemen ist es in der Praxis sehr aufwendig, Daten über das thermische Gleichgewicht zu erhalten, da Equilibrierungszeiten sehr hoch sind.

Eine weitere numerische Methode, die in den letzten Jahren ebenfalls stark an Bedeutung gewonnen hat, ist die Berechnung exakter Grundzustände endlicher, ungeordneter Systeme [11, 12, 13]. Praktisch möglich wurde dies durch die Anwendung graphentheoretischer Methoden, die die Berechnung exakter Grundzustände in polynomialer Zeit erlauben, öder Rechenaufwand steigt mit einer Potenz der Systemgröße. Dies gilt jedoch nur für eine bestimmte Klasse ungeordneter Systeme ohne Frustration, die allerdings die in dieser Arbeit im wesentlichen betrachteten Systeme beinhaltet. Auf Vor- und Nachteile dieser Methode wird in Kapitel 4 noch genauer eingegangen.

1.3 Verdünnte Antiferromagnete

In dieser Arbeit werden ungeordnete Systeme mit Hilfe von Computersimulationen und anderen numerischen Methoden untersucht. Im Mittelpunkt stehen dabei verdünnte Ising-Antiferromagnete in einem äußeren Magnetfeld. Diese sind sowohl von experimentellem wie auch theoretischem Interesse. Deshalb, und wegen der erwähnten Verwandtschaft von Computereperiment und Laborexperiment wird Wert auf den Vergleich der Simulationsergebnisse sowohl mit analytischen Rechnungen als auch Experiment gelegt.

1.3.1 Experimentelle Systeme

Experimentelle Realisationen verdünnter Antiferromagneten sind $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ und $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$. In diesen Materialien haben die Eisen- bzw. Kobaltatome ein magnetisches Moment, die Austauschwechselwirkung zwischen ihnen ist so, daß sich eine antiferromagnetische Ordnung einstellt, öes ist energetisch günstiger, wenn die magnetischen Momente nächster Nachbarn bzw. benachbarter Schichten antiparallel stehen. Ein Teil dieser magnetischen Atome ist in diesen Materialien durch nichtmagnetische ersetzt, durch Zink bzw. Magnesium. Zusätzlich zeichnen sich diese Verbindungen durch eine sehr hohe Anisotropie aus, ödie magnetischen Momente stehen vorzugsweise parallel oder antiparallel zu einer bestimmten Richtung, im Falle von $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ etwa parallel zur c -Achse der Kristalle mit hexagonaler Einheitszelle (s. z. B. [14]). In den bisher genannten Systemen bilden die über magnetische Austauschwechselwirkung verbundenen Atome eine dreidimensionale Struktur. In $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ ist dies anders, dieses Material zeigt eine magnetische Schichtstruktur. Die Wechselwirkungen zwischen den magnetischen Atomen innerhalb einer Schicht sind um ein Vielfaches stärker als die Wechselwirkung zwischen den Schichten, so daß man hier von einem effektiv zweidimensionalen System sprechen kann. Damit kann man auch Simulationsergebnisse nicht nur drei-, sondern auch zweidimensionaler Systeme mit Experimenten vergleichen.

Im wesentlichen werden folgende experimentelle Untersuchungsmethoden eingesetzt: Mit optischen Methoden, z. B. der Faraday-Rotation kann die Magnetisierung gemessen werden [15]. Doppelbrechungsmessungen erlauben eben-

falls die Messung der Magnetisierung [16] und die Bestimmung der spezifischen Wärme [17]. Die Neutronenstreuung erlaubt die Messung vieler Größen, z. B. des antiferromagnetischen Ordnungsparameters, der dazugehörigen Suszeptibilität [18, 19] und der Korrelationslänge. Auch direkte Messungen physikalischer Größen sind möglich, die Magnetisierung kann mittels SQUID Magnetometrie [20] bestimmt werden, die spezifische Wärme mit Hilfe klassischer Kalorimetrie [17, 21] gemessen werden. Bei den in dieser Aufzählung zitierten Arbeiten handelt es sich im wesentlichen um neuere Artikel, in denen entsprechende Messungen beschrieben werden, sie sind nur als Beispiele zu verstehen. Auf sie wird innerhalb dieser Arbeit an verschiedenen Stellen verwiesen, um die durch Simulation erhaltenen Ergebnisse mit dem Experiment zu vergleichen. Allgemeinere Übersichtsartikel sind etwa [22, 23].

1.3.2 Modellsysteme

Die starke Anisotropie der oben genannten Materialien legt es nahe, das Ising-Modell zur theoretischen Beschreibung der verdünnten Antiferromagnete zu verwenden. Dies wurde in der Vergangenheit erfolgreich durchgeführt [5, 6, 24, 25, 26, 7]. In allen diesen Arbeiten wurde nicht das kompliziertere Kristallgitter der oben angesprochenen Materialien zugrunde gelegt, sondern ein einfach kubisches Gitter. Das erleichtert sowohl analytische Rechnungen als auch die Simulationen. Daraus wird die Zielsetzung dieser Berechnungen ersichtlich: Nicht die quantitative Reproduktion der Meßergebnisse steht im Vordergrund, sondern das Verständnis des qualitativen Verhaltens. Grundlegende Eigenschaften, wie die Existenz eines Domänenzustandes in bestimmten Bereichen des Phasendiagramms und damit verbundene Irreversibilitäten sind, wie Experiment, Theorie und Simulation zeigen, unabhängig von der untersuchten Kristallstruktur. Von besonderem Interesse ist dabei die Struktur des Phasendiagramms, ob und wo es Grenzlinien zwischen verschiedenen Phasen gibt und wie die Phasen durch einen Ordnungsparameter charakterisiert werden können. Das kritische Verhalten verdünnter Antiferromagnete an Phasenübergängen, ob und wie Meßgrößen wie die Suszeptibilität oder die spezifische Wärme divergieren, der Verlauf des Ordnungsparameters an der kritischen Temperatur, all dies sind Fragen, die intensiv untersucht werden.

Aus theoretischer Sicht sind verdünnte Antiferromagnete besonders interessant, weil sie als experimentelle Realisation eines in theoretischen Arbeiten weitaus häufiger untersuchten Modells gelten, des *Random-Field Ising-Modells* (RFIM). So gibt es Arbeiten die zeigen, daß verdünnte Antiferromagnete im äußeren Feld (*diluted antiferromagnets in a field*, DAFF) in der gleichen Universalitätsklasse wie das RFIM sind [27, 28], daß die kritischen Exponenten, die das Verhalten von Meßgrößen an Phasenübergängen beschreiben, die gleichen sind. Andererseits ist umstritten, in wie weit die Abbildung zwischen DAFF und RFIM gültig ist, sie gilt nur für kleine, aber von Null verschiedene Felder. Um dieses Problem zu klären, werden in dieser Arbeit Untersuchungen durchgeführt, die die Verwandtschaft dieser beiden Systeme belegen. Neueste Untersuchungen [29, 30], die während der Entstehung dieser Arbeit veröffentlicht wurden, geben detailliertere Hinweise dazu, auf die in dieser Arbeit an den entsprechenden Stellen eingegangen wird.

Nach einer Einführung in die Grundlagen werden nun im folgenden zunächst Gleichgewichtseigenschaften verdünnter Antiferromagnete bestimmt. Zuerst werden kritische Exponenten bei tiefen Temperaturen bestimmt, dazu werden exakt berechnete Grundzustände analysiert, und Monte Carlo-Simulationen durchgeführt, wobei die Systeme für die Simulation mit exakten Grundzuständen initialisiert werden. Anschließend wird mit Hilfe eines aufwendigeren Algorithmus, dem Swendsen-Wang Algorithmus, der thermisch getriebene Phasenübergang bei höheren Temperaturen untersucht. Dies leitet über zu Untersuchungen des Nichtgleichgewichtsverhaltens, auftretende Irreversibilitäten am Phasenübergang stehen zunächst im Mittelpunkt. In den dann folgenden Kapiteln wird die Dynamik verdünnter Antiferromagnete im Nichtgleichgewicht betrachtet, zunächst das Relaxationsverhalten, abschließend sogenanntes *Aging*-Verhalten.

2 Grundlagen

2.1 Die Hamiltonfunktion des verdünnten Antiferromagneten im äußeren Magnetfeld

Das Modell, das im Mittelpunkt dieser Arbeit steht, beschreibt einen *verdünnten Ising-Antiferromagnet in einem äußeren Magnetfeld*. Die zugehörige Hamiltonfunktion lautet

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \varepsilon_i \sigma_i. \quad (2.1)$$

Diese Hamiltonfunktion beschreibt die Energie eines Systems von Spins σ_i . Die Spins der in dieser Arbeit betrachteten Systeme sind entweder auf einem dreidimensionalen, einfach kubischen Gitter angeordnet, oder auf einem zweidimensionalen Quadratgitter. Die Variablen σ_i können die Werte $+1$ oder -1 annehmen, die oft auch als *Spin Up* bzw. *Spin Down* bezeichnet werden (*Ising-Modell*) [1].

Die Hamiltonfunktion besteht aus zwei Teilen, dem Austauschterm und der Kopplung ans äußere Magnetfeld. Im Austauschterm ist die Doppelsumme über i und j dabei so zu verstehen, daß nur über nächste Nachbarn in diesen Gittern summiert wird, und zwar so, daß keine Bonds zwischen Spins doppelt gezählt werden. Die Wechselwirkungskonstante J ist im folgenden negativ, die Energie wird minimiert, wenn nächste Nachbarn σ_i, σ_j unterschiedliches Vorzeichen haben, oder anschaulich gesehen, wenn benachbarte Spins in unterschiedliche Richtungen „zeigen“ (*Antiferromagnet*). Die *Verdünnung* wird durch die Variablen ε_i realisiert. Diese Variablen werden mit einer Wahrscheinlichkeit p auf 0 gesetzt, entsprechend mit der Wahrscheinlichkeit $1 - p$ auf 1. Es handelt sich dabei um „eingefrorene“ Variablen, die werden einmal mit den entsprechenden Werten initialisiert und ändern sich dann im Verlauf einer Simulation nicht mehr. Dies entspricht den experimentellen Systemen, in denen magnetische und unmagnetische

Atome ebenfalls nicht die Plätze tauschen können sondern einmal durch die Probenpräparation auf bestimmte Gitterplätzen fixiert werden.

Das äußere Magnetfeld ist mit B bezeichnet. Durch die Festlegung der Austauschkonstante $J = -1$ und der zusätzlichen Wahl der Boltzmann-Konstante $k_B = 1$ ergibt sich, daß alle Temperaturen und Magnetfelder reskaliert werden müssen. Alle Energien werden in Einheiten von $|J|$ angegeben, alle Temperaturen in Einheiten von $|J|/k_B$. Die Spins σ_i sind einheitenlos, damit hat das Magnetfeld B ebenfalls wie J die Dimension einer Energie und muß im Verhältnis zu J angegeben werden. Experimentell ist bestimmt worden, daß bei tiefen Temperaturen ab einer Feldstärke von $\approx 35 \cdot 10^3 \text{ kA/m}$, entsprechend einer magnetischen Flußdichte von $\approx 44 \text{ Tesla}$, in FeF_2 alle Spins trotz ihrer antiferromagnetischen Wechselwirkung parallel ausgerichtet werden können [31]. Bei einem reinen Ising-Modell ist dies in obigen Einheiten ab einem Wert $B = 6$ der Fall. Daher entspricht $B = 1$ in obigen Einheiten in etwa einer Flußdichte von $\approx 7,5 \text{ Tesla}$.

2.2 Verwandte Systeme

Ein dem DAFF verwandtes Modell ist das Random-Field Ising-Modell. Wie bereits erwähnt wurde, gibt es Arbeiten, die zeigen, daß in bestimmten Grenzfällen das RFIM und der DAFF in der gleichen Universalitätsklasse sind, ödie gleichen kritischen Exponenten aufweisen [27, 28].

Die Modellhamiltonfunktion des RFIM lautet

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i B_i \sigma_i. \quad (2.2)$$

Hierbei wird J im allgemeinen auf $+1$ festgelegt, also eine ferromagnetische Wechselwirkung zwischen den Spins σ_i . Die Doppelsumme im Austauschterm und der Wertebereich der Spins σ_i sind genau wie in Gleichung 2.1 definiert. Im Gegensatz zu verdünnten Antiferromagneten wird die Unordnung hier nicht durch Verdünnung realisiert, sondern durch ein ortsabhängiges Magnetfeld B_i . Genau wie die Verdünnung im DAFF ist diese Unordnung eingefroren. Theoretische Untersuchungen beschränken sich schwerpunktmäßig auf zwei unterschiedliche Vertei-

lungen der B_i : Die Gaußverteilung und die bimodale Verteilung, δ

$$p(B_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{B_i^2}{2\Delta^2}} \quad (2.3)$$

$$p(B_i) = \frac{1}{2} (\delta(B_i - \Delta) + \delta(B_i + \Delta)). \quad (2.4)$$

Die Stärke der Unordnung wird in beiden Fällen eindeutig durch den Parameter Δ bestimmt.

Ein experimentelles System, das solche Eigenschaften aufweist, ist bisher nicht bekannt. Deshalb ist auch die Frage, ob der DAFF und das RFIM in der gleichen Universalitätsklasse sind, sehr interessant, denn verdünnte Antiferromagnete existieren in der Natur, während in theoretischen Arbeiten der Schwerpunkt häufig auf dem RFIM liegt. Zu bedenken ist hier noch ein wichtiger Punkt: Die Unordnung im DAFF wird zwar durch die Verdünnung p bestimmt und im RFIM durch die Breite der Verteilung der Zufallsfelder, allerdings ist bei Vergleichen zwischen RFIM und DAFF zu beachten, daß die Rolle, die Δ im RFIM spielt, im DAFF vom äußeren Magnetfeld B übernommen wird. Dies ergibt sich aus den Abbildungen zwischen DAFF und RFIM [27, 28]. Anschaulich läßt sich das verstehen, in dem man den Einfluß der Unordnung und insbesondere die Mechanismen der Domänenbildung in beiden Systemen betrachtet.

Eine weitere Klasse von Systemen wird bezüglich bestimmter Eigenschaften ebenfalls oft mit verdünnten Antiferromagneten verglichen, die sogenannten Spingläser. Allgemein wird ein Ising-Spinglas durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.5)$$

beschrieben. Die Wechselwirkungskonstanten J_{ij} bestimmen den Charakter des Spinglases. Im Sherrington-Kirkpatrick-Modell [32, 33] ist die Wechselwirkung langreichweitig, handelt es sich um kurzreichweitige Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn spricht man häufig vom Edwards-Anderson-Modell [34]. Wesentliche Eigenschaft der Spingläser sind die sogenannten Frustrationseffekte, die durch die Verteilung der Wechselwirkungskonstanten entstehen. Die J_{ij} haben kein einheitliches Vorzeichen sondern sind zum Teil positiv, zum Teil negativ, dies hat ein entsprechend komplexes Verhalten zur Folge. Frustration be-

zeichnet den Effekt, daß ein Spin keinen Zustand hat, in dem alle Bindungen zu seinen Nachbarn energetisch günstig sind.

2.3 Einfluß der Unordnung: Domänen

Zunächst stellt sich die Frage, welchen Einfluß die Unordnung auf das Verhalten der beiden vorgestellten Systeme im Vergleich zu den geordneten Systemen ($p = 0$ bzw. $\Delta = 0$) hat. Es ist grundsätzlich zu klären, welche Parameterbereiche für p bzw. Δ überhaupt sinnvoll sind. Die maximale Verdünnung, jenseits der das physikalische System völlig verändert und komplett anderes Verhalten zeigen wird, ist durch die Perkulationsgrenze gegeben. Bei einer Konzentration der Spins unterhalb der Perkulationsgrenze gibt es in einem unendlichen System keinen unendlich großen Cluster von über Wechselwirkungen verbundenen Spins. Damit zerfällt das System in endlich große Bereiche, die nicht mehr miteinander wechselwirken; es ist kein Phasenübergang mehr möglich und die Physik des Systems ändert sich völlig. Die Perkulationsgrenze liegt für platzverdünnte, dreidimensionale, einfach kubische Gitter bei einer Konzentration der besetzten Plätze von ca. 31 % (entspr. einer Verdünnung von $p = 0,69$), für platzverdünnte, zweidimensionale Quadratgitter bei ca. 59 % (entspr. einer Verdünnung von $p = 0,41$) [35]. In dieser Arbeit werden ausschließlich Systeme betrachtet, in denen die Konzentration der magnetischen Momente oberhalb der Perkulationsgrenze liegen.

Eine ähnliche Grenze kann man auch für den Parameter Δ im RFIM angeben. Leicht einzusehen ist dies für die bimodale Verteilung. Sobald Δ größer ist als die Anzahl nächster Nachbarn, wird sich jeder Spin σ_i im Grundzustand immer parallel zum Feld B_i stellen, da das Zufallsfeld stärker als die Austauschwechselwirkung ist. Nicht so scharf definiert ist diese Grenze für die gaußverteilten Zufallsfelder, aber es ist ohne weiteres einsichtig, daß auch in diesem Fall zu große Werte von Δ das Verhalten des Modells komplett verändern.

Aber auch für Systeme mit hinreichend großen Konzentrationen bzw. schwachen Zufallsfelder, die hier ausschließlich untersucht werden, ist bereits die Frage nach dem Grundzustand keineswegs einfach zu beantworten.

So ist es denkbar, daß durch die Unordnung kein ferngeordneter Zustand, wie es im zwei- und dreidimensionalen Ising-Modell der Fall ist, sondern ein komple-

xerer Domänenzustand der Grundzustand ist. Tatsächlich ist dies unter gewissen Umständen auch der Fall. Zunächst soll anschaulich beschrieben werden, wie diese Domänen entstehen können. Im RFIM ist es z. B. möglich, daß über einen größeren Raumbereich die Zufallsfelder eine Vorzugsrichtung aufweisen. Ist dieser Raumbereich hinreichend groß, kann es energetisch günstiger sein, daß sich die Spins in diesem Raumbereich anders als ihre unmittelbare Umgebung orientieren, weil trotz der dadurch entstehenden Domänenwand die Energie minimiert wird. Im DAFF kann analog in einem Raumbereich ein Untergitter des einfach kubischen oder des Quadratgitters mit mehr Spins besetzt sein, als das andere Untergitter. Hier kann die Energie eventuell minimiert werden, wenn sich die Spins so orientieren, daß die Spins im stärker besetzten Untergitter in Richtung des angelegten äußeren Feldes zeigen, obwohl dadurch eine antiferromagnetische Domänenwand entsteht. Hier wird auch anschaulich verständlich, warum die Rolle von Δ vom äußeren Feld B im DAFF übernommen wird.

Das sogenannte Imry-Ma Argument [36] liefert ein Kriterium für die Stabilität von Domänen. Dabei wird angenommen, daß in einem sonst langreichweitig geordneten System eine Domäne existiert, in der die Spins genau entgegengesetzt zur sonst vorherrschenden Ordnung orientiert sind. Desweiteren soll sich diese Domäne durch einen charakteristischen Radius R beschreiben lassen. In einer d -dimensionalen Domäne im DAFF wird aus statistischen Gründen ein Überschuß von Spins in einem Untergitter herrschen, der proportional zur Wurzel des Volumens der Domäne ist, ðes wird eine Magnetisierung der Domäne von $M \sim \sqrt{R^d} = R^{d/2}$ vorhanden sein. Diese Magnetisierung koppelt an das äußere Magnetfeld B . Daher wird die Energie minimiert (vorausgesetzt die Magnetisierung ist parallel zum äußeren Feld). Zusätzlich ist jedoch auch eine Domänenwand entstanden, die im Austauschteil der Hamiltonfunktion eine Energieerhöhung verursacht, und zwar proportional zur Anzahl der gebrochenen Bonds, also der Oberfläche der Domäne, die proportional zu R^{d-1} ist. Die Energieänderung durch die Domäne ergibt sich also näherungsweise zu

$$\Delta E \approx JR^{d-1} - BR^{d/2} \quad (2.6)$$

An dieser Formel kann man nun ablesen, unter welchen Umständen Domänen stabil sein können und unter welchen nicht. Für $d = 1$ zeigt sich, daß Domänen

sich immer stabilisieren können, da der negative Term in Gleichung 2.6 mit einer größeren Potenz anwächst als der positive¹. Für $d = 3$ ergibt sich das umgekehrte Verhalten. Ein Problemfall stellt $d = 2$ dar: Hier wachsen beide Terme mit der gleichen Potenz an, daher liefert das Imry-Ma Argument in diesem Fall keine Aussage. Es hat sich aber zusätzlich herausgestellt, daß die Annahme, daß Domänen in den betrachteten Systemen eine so kompakte Struktur haben, sich also durch einen charakteristischen Radius beschreiben lassen, falsch ist: Die Domänen haben fraktale Struktur [37,7,13,38].

Dennoch konnte die untere kritische Dimension d_c für das RFIM bestimmt werden, die Dimension oberhalb der ein langreichweitig geordneter Zustand stabil ist. Für das RFIM ist $d_c = 2$. In $d = 3$ ist der Grundzustand für kleine Unordnungen langreichweitig ferromagnetisch geordnet, während in $d = 2$ bereits beliebig kleine Unordnung den Grundzustand in Domänen zerfallen läßt [39,40,41]. Das gleiche erwartet man auch für den DAFF: Bei einem beliebig kleinen äußeren Feld wird ein zweidimensionaler DAFF keinen geordneten Grundzustand aufweisen, ein dreidimensionaler jedoch schon.

Basierend auf diesen grundlegenden Erkenntnissen wurden mit Hilfe verschiedener Methoden Phasendiagramme für das RFIM und den DAFF bestimmt, von denen hier einige um einen Überblick zu geben, kurz beschrieben werden.

2.4 Phasendiagramme

In Abbildung 2.1 ist das mit Hilfe von numerisch gelösten, lokalen Mean-Field Gleichungen bestimmte Phasendiagramm des RFIM abgebildet [24]. Bei dieser Methode werden die Ising-Spins durch ihre mittlere Magnetisierung ersetzt, die gemäß der üblichen Mean-Field Gleichungen für einen Spin im äußeren Feld, das vom externen Feld und den nächsten Nachbarn erzeugt wird, selbstkonsistent berechnet wird. Teil (a) der Abbildung gilt dabei für die bimodale Verteilung für die Zufallsfelder, Teil (b) für gaussische Verteilung. Aus der gleichen Arbeit stammt Abbildung 2.2, in der das Mean-Field Phasendiagramm des DAFF abgebildet ist. Angeregt von diesen Arbeiten wurde, ausgehend von einem bond-

¹Die Diskussion ist für $d = 1$ auf den DAFF nicht anzuwenden, da die Perkolationsgrenze dann trivialerweise bei einer Konzentration von 100% liegt. Daher gilt dieses Argument in $d = 1$ nur für das RFIM.

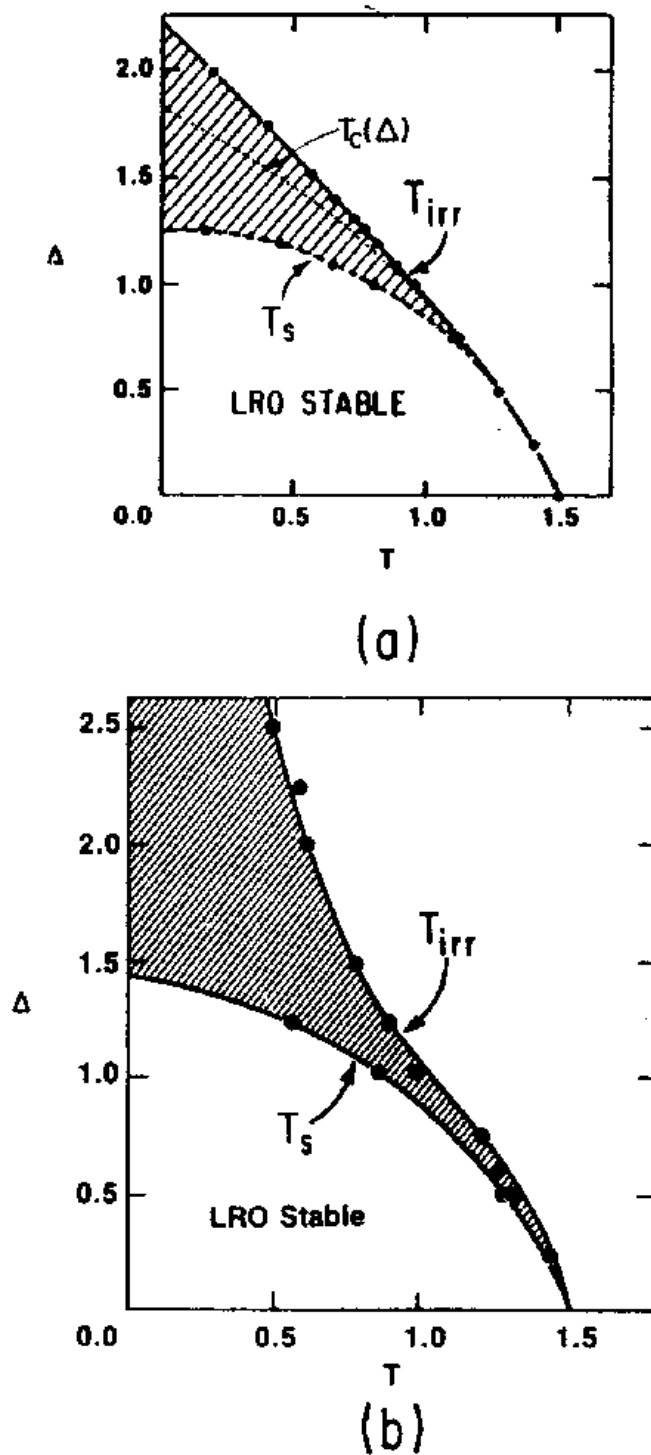


Abbildung 2.1: Das Mean-Field Phasendiagramm des dreidimensionalen RFIM. Teil (a) gilt dabei für eine bimodale Verteilung der Zufallsfelder, Teil (b) für eine gaussische Verteilung. Entnommen aus Ref. [24]

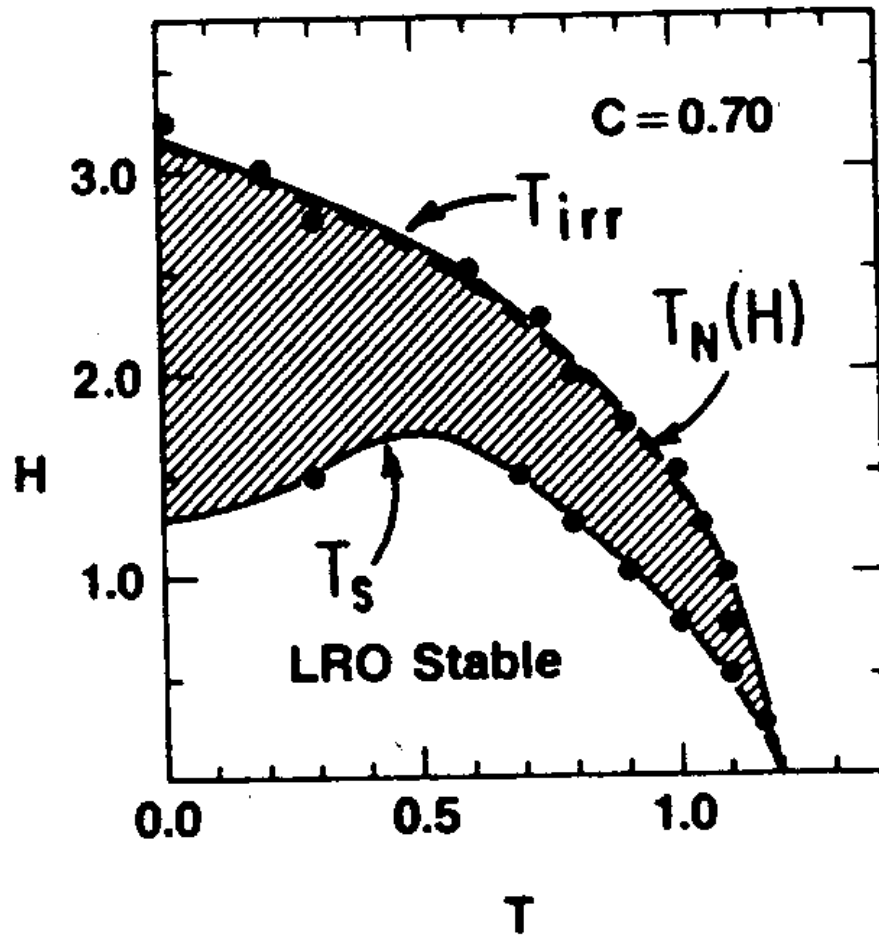


Abbildung 2.2: Das Mean-Field Phasendiagramm des dreidimensionalen DAFF [24].

verdünnten Antiferromagneten das Mean-Field Phasendiagramm mit Replica-Symmetriebrechung in Abbildung 2.3 berechnet [6]. Mit Hilfe von Monte Carlo-Simulationen ist das Phasendiagramm in Abbildung 2.4 in Ref. [42] bestimmt worden. Verwendet wurde in diesen Simulationen ein Single-Spin-Flip-Algorithmus (Glauber-Dynamik) mit der *heat bath* Flipwahrscheinlichkeit. Die Monte Carlo-Simulationen, die in dieser Arbeit verwendet wurden, gehen genauso vor, sofern keine anderen Algorithmen explizit erwähnt werden.

Alle diese Phasendiagramme zeigen die langreichweitige Ordnung für tiefe Temperaturen und kleine Werte der Verteilungsbreite Δ der Zufallsfelder bzw. des äußeren Feldes B , da es sich bei den betrachteten Systemen um dreidimensionale Systeme handelt. Zusätzlich zeigen diese Phasendiagramme oberhalb der langreichweitig geordneten Phase eine weitere Phase, die in Abbildung 2.4 mit SG , in Abbildung 2.3 mit $GLASS$ bezeichnet ist. Dies soll auf die Verwandtschaft zu Spingläsern hinweisen. Spingläser sind eine weitere Art ungeordneter Systeme, die ebenfalls eine wichtige Rolle in der statistischen Physik spielen. Hier soll kein Überblick über die gesamte Spinglas-Literatur gegeben werden (s. z. B. [43, 44]), lediglich die konkreten Eigenschaften, die zu der Bezeichnung SG geführt haben, sollen hier kurz beschrieben werden.

1987 wurde von de Almeida und Bruinsma [6] Replica-Symmetrie-Brechung, wie sie aus Spingläsern bekannt ist [43], auch im RFIM berechnet. Damit wurden die Mean-Field Phasendiagramme Abbildung 2.1 und Abbildung 2.2 um eine Interpretation der Phase oberhalb der langreichweitig geordneten Phase bereichert. Die aus der Spinglas Theorie bekannte Almeida-Thouless Linie [45] (AT-Linie) trennt die spinglasartige Phase von der paramagnetischen. Die AT-Linie kennzeichnet das Auftreten von Instabilitäten in der Mean-Field Lösung von Sherrington und Kirkpatrick, an dieser erwartet man das Einsetzen von Irreversibilitäten in bestimmten Heiz-Kühl Zyklen, denen man das System unterzieht.

Im weiteren wird die spinglasartige Phase auch häufig als „Domänenzustand“ bezeichnet werden, weil das System in dieser Phase fraktale, antiferromagnetisch geordneten Domänen bildet [7]. Es konnte durch exakte Grundzustandsberechnungen gezeigt werden, daß dieser Domänenzustand den Grundzustand darstellt [12].

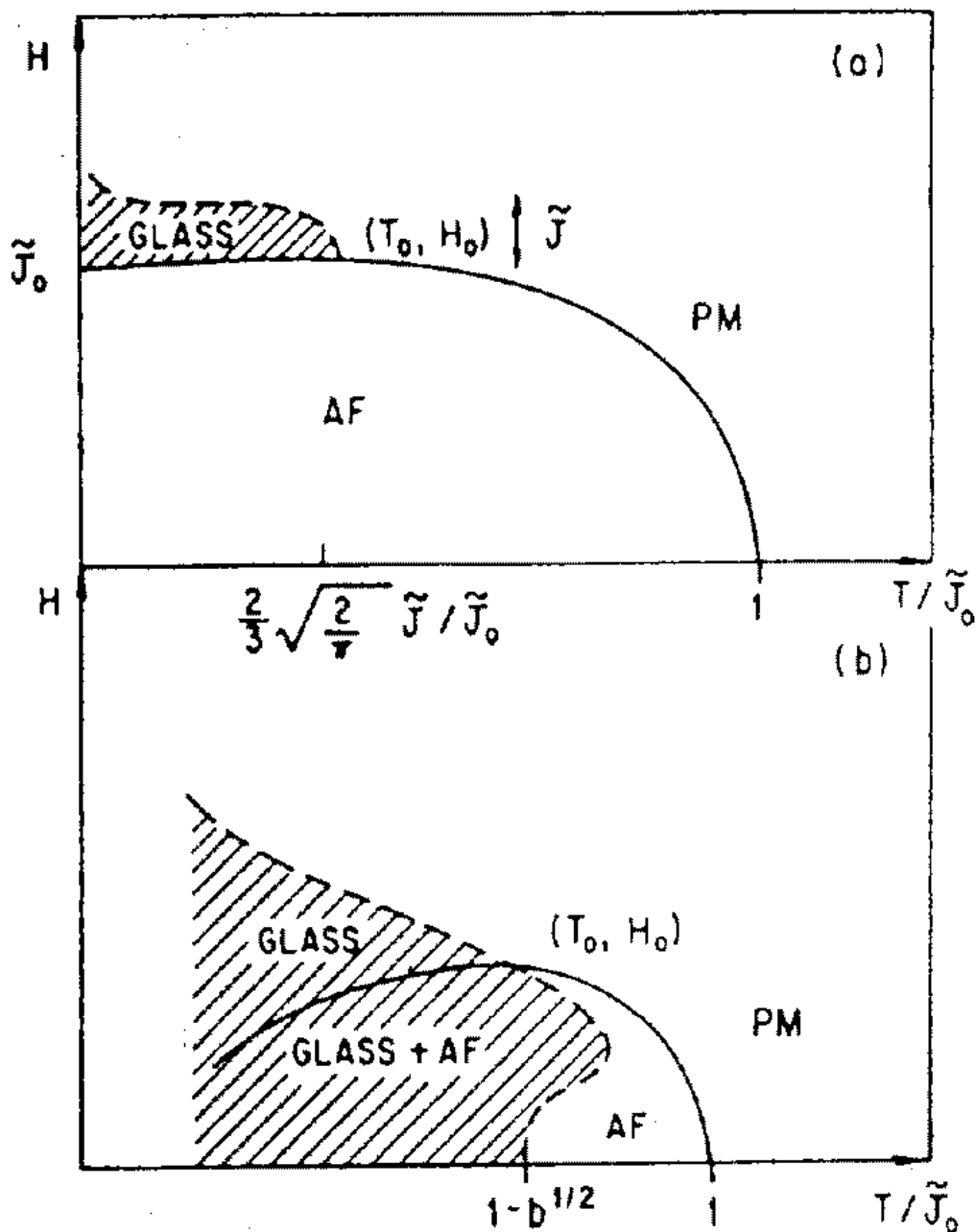


Abbildung 2.3: Das Phasendiagramm des RFIM, am Beispiel eines *Random Exchange* Antiferromagneten, berechnet mit einer Mean-Field Lösung mit gebrochener Replica-Symmetrie. Der obere Teil der Abbildung gilt für ein System mit schwacher Unordnung (die Streuung der zufälligen Austauschwechselwirkungen ist klein im Vergleich zu ihrem Mittelwert), der untere Teil für ein System mit stärkerer Unordnung [6].

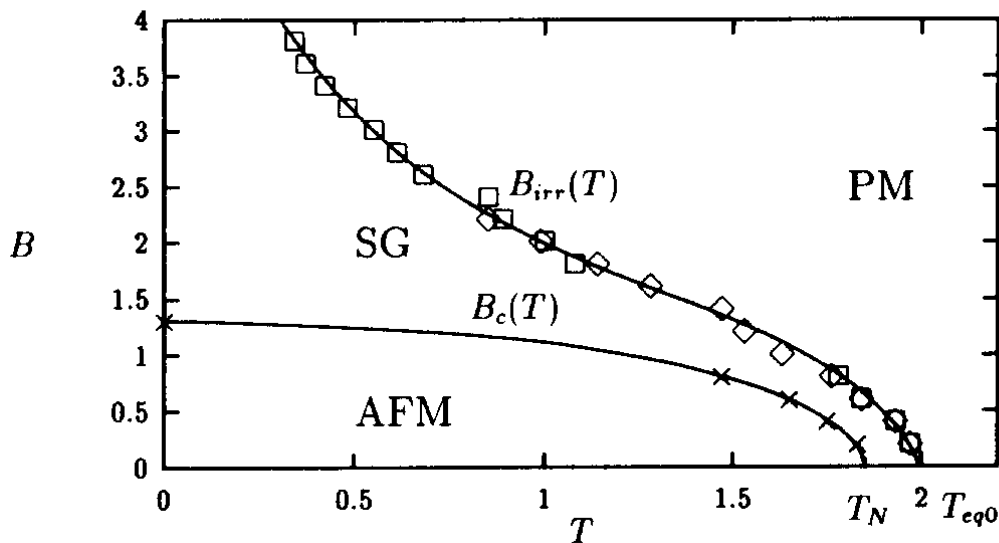


Abbildung 2.4: Das Phasendiagramm des dreidimensionalen DAFF, berechnet durch Monte Carlo-Simulation [42].

2.5 Einfluß der Unordnung: Irreversibilitäten

Spingläser, Random-Field Modelle und verdünnte Antiferromagnete im Feld zeichnen sich durch Irreversibilitäten in *zero-field-cooled* – *field cooled* (*zfc-fc*) Zyklen aus.

Beispielhaft betrachtet sei ein dreidimensionaler DAFF, der bei $T = 0$ und hinreichend kleinen äußeren Feldern einen langreichweitig geordneten Grundzustand hat. Im Experiment erreicht man diesen Zustand, wie im folgenden klarer werden wird, nur durch Kühlen ohne äußeres Feld. Danach kann man das äußere Feld wieder einschalten und das System wieder Heizen und Messungen durchführen. Diese Prozedur wird als *zero-field-cooled* bezeichnet, was, insbesondere im Zusammenhang mit der Bedeutung von *field-cooled*, etwas mißverständlich ist. Deshalb ist oft auch von *field-heating* (*fh*) die Rede. In einer Monte Carlo-Simulation ist das eigentliche Nullfeldkühlen nicht notwendig, man kann das System direkt in seinem langreichweitig geordneten Grundzustand initialisieren und dann mit dem Heizen beginnen.

Nach dem Heizen des Systems bei eingeschaltetem äußeren Feld (*fh*) kann man

das System nun wieder abkühlen. Dies ist die *field-cooling* (*fc*) Prozedur, auch während dieser kann man Messungen am System vornehmen, sei es im Experiment oder in einer Simulation.

Nun gilt es, zwei Fälle zu unterscheiden: Im einen Fall ist das äußere Feld so hoch, daß man sich in dem Bereich des Phasendiagramms befindet, in dem der Domänenzustand der Grundzustand ist, oder es ist niedriger, so daß man in dem Bereich ist, in dem die langreichweitige Ordnung der Grundzustand ist. In beiden Fällen treten Irreversibilitäten in physikalischen Meßgrößen auf. Im ersten Fall beruhen sie darauf, daß das System sich nach Einschalten des Feldes nicht mehr in seinem Grundzustand befindet. Man startet also die Simulation oder das Experiment² im falschen Ausgangszustand, der bei tiefen Temperaturen aufgrund der langsamen Dynamik (s. Kapitel 5 und 6) nicht in den Grundzustand relaxiert. Erst nach Erhitzen über eine bestimmte Temperatur T_{irr} und folgendem Abkühlen kann das System näherungsweise in seinen Grundzustand finden. Allerdings verhindern Einfriereffekte, wie auch im Falle kleinerer Felder, daß der exakte Grundzustand in einer Monte Carlo-Simulation, und vermutlich auch im Experiment, erreicht wird.

Im anderen Fall, also im Falle kleinerer Felder, entstehen ebenfalls Irreversibilitäten. Es handelt sich hier um es einen Nichtgleichgewichtseffekt beim Kühlen, das System friert in einem Domänenzustand ein. Im Gegensatz zu geordneten Systemen, wo man durch hinreichend langsames Abkühlen diesen Effekt vermeiden kann, ist dies bei den angesprochenen ungeordneten Systemen für alle realistischen Wartezeiten nicht möglich. In Abbildung 2.5 sind Meßwerte für die Magnetisierung eines DAFF in *fh-fc* Zyklen abgebildet [15]. Deutlich erkennbar sind hier die Unterschiede zwischen *fh* und *fc*. Simulationsergebnisse werden im Kapitel 4 vorgestellt.

Diese Effekte lassen sich durch die langsame Relaxationsdynamik der besprochenen Systeme verstehen.

²Experimentell ist diese Situation schwer zu erreichen, da die notwendigen Felder sehr hoch sind.

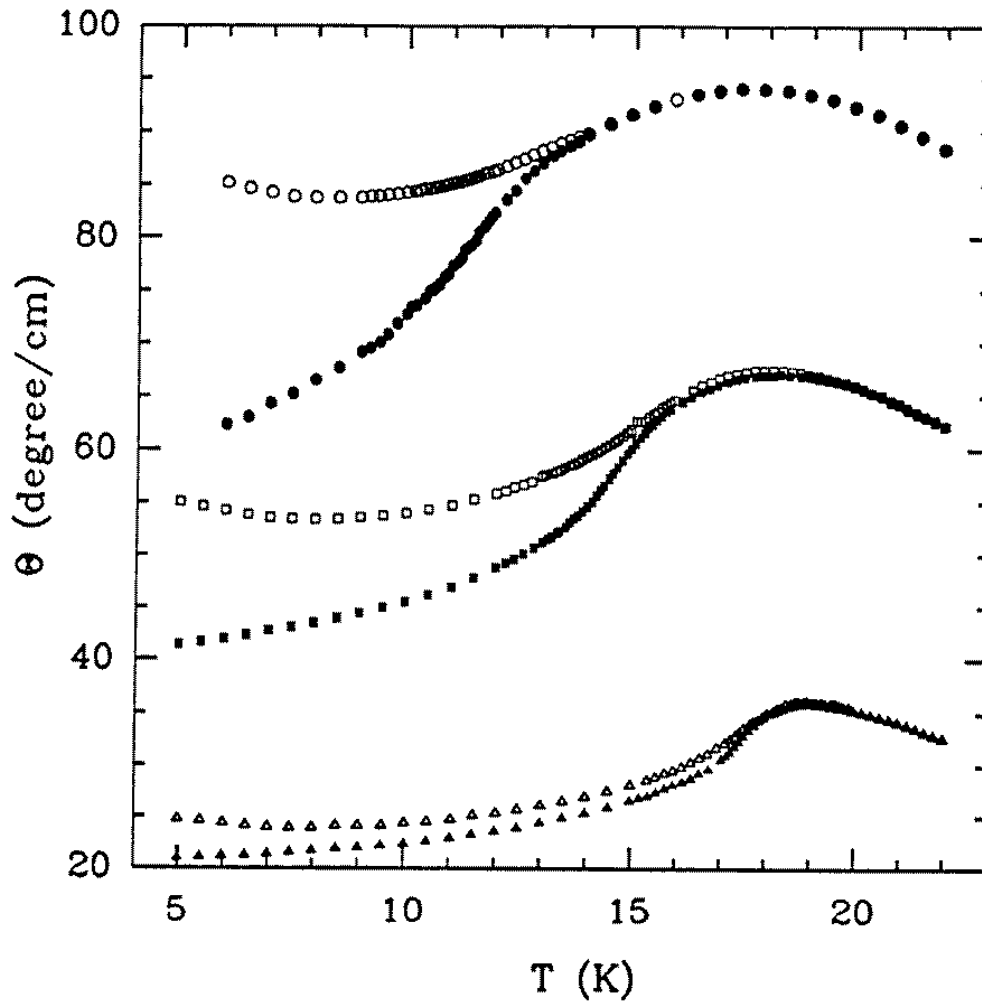


Abbildung 2.5: Irreversibilitäten in der Magnetisierung des DAFF, gemessen an $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ [15]. Aufgetragen ist der Faraday-Rotationswinkel, der proportional zur Magnetisierung ist, über der Temperatur. Die unteren Kurven entsprechen dabei der *zfc*-, die oberen der *fc*-Prozedur.

2.6 Spinglasartige Dynamik

Während man bei vielen Systemen hoffen kann, in Experiment und Simulation Gleichgewichtswerte zu messen, ist dies aufgrund der auftretenden und nicht zu verhindernden Irreversibilitäts-Effekte in den hier betrachteten ungeordneten Systemen nicht möglich. Da diese langsame Dynamik charakteristisch für Spingläser ist, führte dies mit zur Namensgebung der Domänenphase des DAFF, die einerseits durch exakte Grundzustandsberechnungen für $T = 0$ als Grundzustand nachgewiesen und andererseits durch Auftreten von Irreversibilitäten an der AT-Linie bei höheren Temperaturen begrenzt ist. Unter langsamer Dynamik ist hier ein nicht-exponentielles Relaxationsverhalten von Meßgrößen zu verstehen, etwa nach Aus- oder Einschalten des äußeren Feldes. Typischerweise werden Abhängigkeiten von der Zeit einem Potenzgesetz folgen, es gibt keine charakteristische Zeit, die die Dynamik beschreibt. Dies wurde in Simulationen für den DAFF zunächst bestätigt [46]; neuere Arbeiten legen ein komplexeres Verhalten nahe (s. Kapitel 5). Exemplarisch zeigt Abbildung 2.6 eine Kurve aus Ref. [46], die das Relaxieren der Magnetisierung eines DAFF zeigt, der in einem äußeren Feld präpariert worden ist und dann nach Abschalten des Feldes beobachtet wurde. Das lineare Verhalten im doppelt logarithmischen Diagramm deutet auf ein reines Potenzgesetz hin.

Ergebnisse zum Relaxationsverhalten, die sowohl auf Experimenten als auch auf Modellrechnungen beruhen, die die Mechanismen der Relaxation zu beschreiben versuchen, und ein vom reinen Potenzgesetz abweichendes Verhalten zeigen, wurden in neuerer Zeit veröffentlicht [20,47,48,49] und sind Thema des Kapitels 5.

Abschließend ist zu sagen, daß es numerisch und im Experiment schwierig ist, die genaue Lage der AT-Linie im Phasendiagramm durch das Auftreten von Irreversibilitäten zu bestimmen. Verdoppelt man etwa die Beobachtungszeit, so treten Irreversibilitäten später auf als bei kürzeren f_h - f_c Zyklen. Durch die langsame, nicht-exponentielle Dynamik ist es unklar, wie lange denn gemessen werden muß, um ein sicheres Ergebnis zu bekommen, denn es gibt keine charakteristische Zeitskala wie etwa eine Halbwertszeit bei exponentiellem Zeitverhalten. Daher ist bis heute nicht geklärt, ob der Anfang der AT-Linie auf der Temperatur-Achse mit dem kritischen Punkt des Phasenübergangs vom langreichweitig geordneten Zustand in den paramagnetischen Zustand zusammenfällt wie in Abbildung 2.3,

oder nicht, wie in Abbildung 2.4. Ebenso ist nicht geklärt, was genau beim Überschreiten der AT-Linie bei hohen Feldern geschieht, handelt es sich um einen Phasenübergang im thermodynamischen Sinne oder um ein Einfrieren der Dynamik, das keinem scharfen Phasenübergang entspricht?

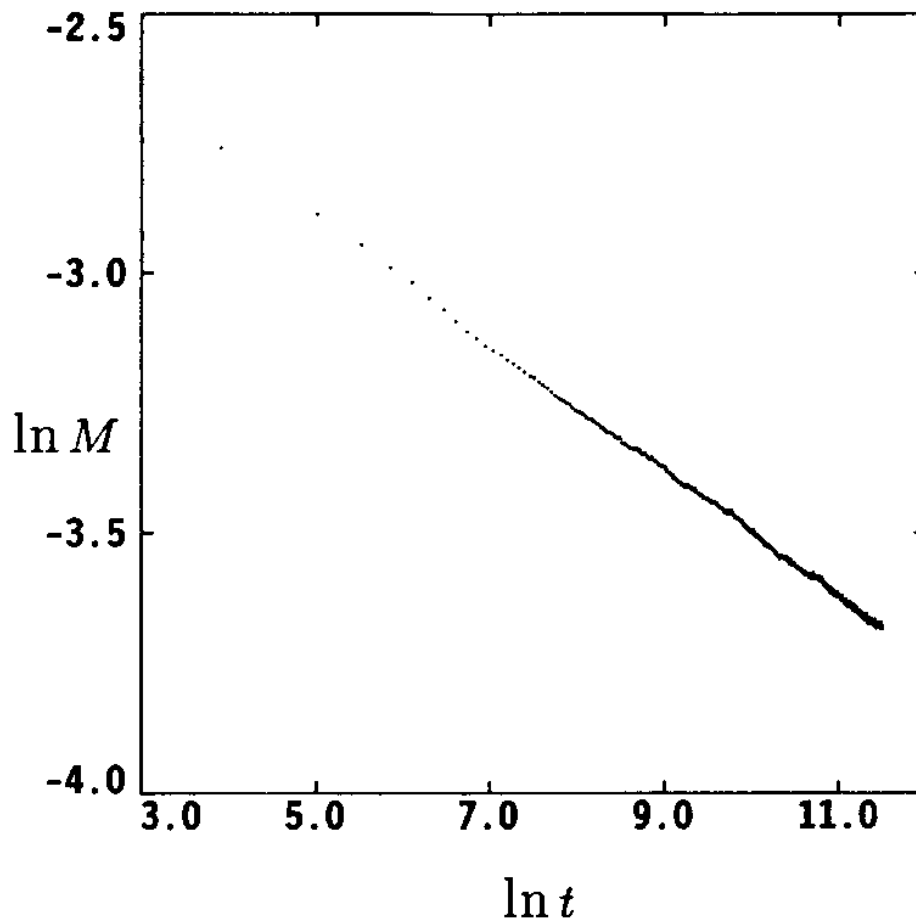


Abbildung 2.6: Relaxieren der Magnetisierung eines DAFF nach Abschalten des äußeren Feldes bei tiefen Temperaturen.

3 Bestimmung der kritischen Exponenten für hohe Felder und tiefe Temperaturen mit Hilfe exakter Grundzustände und Monte Carlo-Simulation

Ein bis heute nicht vollständig gelöstes Problem ist die Frage, ob verdünnte Antiferromagnete im Feld und das Zufallsfeld-Ising-System in der gleichen Universalitätsklasse sind, ödurch die gleichen kritischen Exponenten charakterisiert werden. Dieses Problem soll nun im folgenden mit Hilfe von *Finite-Size-Scaling*-Analysen von exakten Grundzuständen und Monte Carlo-Simulationsdaten untersucht werden. Untersucht wurden dreidimensionale Systeme, die bei tiefen Temperaturen einen feldgetriebenen Phasenübergang von der langreichweitig antiferromagnetisch geordneten Phase in einen Domänenzustand durchlaufen.

Ein Teil der zugrundeliegenden Meßdaten wurden mit Hilfe der Analyse exakter Grundzustände gewonnen. Diese Daten wurden von Jörg Esser zur Verfügung gestellt [13]. Die hier verwendeten exakten Grundzustände wurden mit Hilfe graphentheoretischer Methoden bestimmt. Diese erlauben für Systeme ohne Frustration (s. Kap. 2.2) eine Berechnung der Grundzustände in polynomialer Zeit, ödie zur Berechnung notwendige Zeit steigt nur mit einer Potenz der Systemgröße an, nicht exponentiell, wie es bei einem trivialen Verfahren, das alle möglichen Zustände untersucht, der Fall wäre. Das Spinsystem wird auf einen Transport-Netzwerk abgebildet und es kann gezeigt werden, daß die Bestimmung des maximalen Flusses durch dieses Netzwerk der Minimierung einer quadratischen Form äquivalent ist, die in die physikalisch interessierenden Hamiltonfunktionen transformiert werden kann [50, 51, 12, 13].

Darüberhinaus wurden die Grundzustandsdaten als Ausgangspunkt für Mon-

te Carlo-Simulationen verwendet [52]. Diese Methode stellt sicher, daß sich das System, zumindest zu Beginn der Simulation im Gleichgewicht befindet. Dies wäre ohne exakte Grundzustände nicht zu erreichen, denn für den in Frage kommenden Temperatur- und Feldbereich ist der Grundzustand der oben diskutierte Domänenzustand, den man durch Monte Carlo-Simulationen wegen der langsamen Dynamik nicht erreichen kann.

3.1 Der DAFF mit gaußverteilten Kopplungen

Der DAFF, wie er im Kapitel 2 definiert worden ist, hat für die Untersuchung bei $T = 0$ mit Hilfe exakter Grundzustände eine unangenehme Eigenschaft. Bei ganzzahligen Feldern und bei solchen, die aus Verhältnissen kleiner ganzer Zahlen bestehen, treten Sprünge in der Magnetisierung und anderen Meßgrößen auf. Dies kann für ganzzahlige Felder anhand einer einfachen Überlegung nachvollzogen werden: Betrachtet sei das System bei einem äußeren Feld $B < 1,0$. Alle Spins, die (wegen der Verdünnung) nur einen nächsten Nachbarn haben stehen auf Grund der Kopplung antiparallel zu diesem Nachbarn. Sobald das Feld größer als 1,0 wird, werden alle diese Spins sich in Feldrichtung drehen. Da dies ein makroskopischer Anteil der Spins ist, ergibt sich ein Sprung in der Magnetisierung, im Ordnungsparameter und anderen Meßgrößen.

Eine genauere Betrachtung zeigt, daß dies nicht der einzige solche Fall ist: Die ursprüngliche Hamiltonfunktion (2.1) besteht aus zwei Teilen, dem Austauschanteil $-J \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j$ und der Kopplung ans äußere Feld $-B \sum_i \varepsilon_i \sigma_i$. Da endliche Systeme eine diskrete Anzahl von Spins haben, sind sowohl die Summe des Austauschanteils als auch die des Feldanteils immer ganzzahlig. Ein beliebiger, endlicher Ausschnitt aus einem langreichweitig geordneten System hat nun wegen der statistischen Besetzung der Untergitter eine ganzzahlige Überschußmagnetisierung M^* , die parallel oder antiparallel zum angelegten äußeren Feld stehen kann. Wenn nun in diesem Bereich, der mit dem Rest des Systems mit S Bonds verbunden sei, sich alle Spin umkehren würden, so würde sich die Energie des Systems im Austauschanteil um $-2JS = +2S$, im Feldanteil um $\pm 2BM^*$, insgesamt also um $2(S \pm BM^*)$ ändern. So lange diese Energie positiv ist, ändert sich der Grundzustand des Systems nicht, erst wenn durch Erhöhen des Feldes B die Energie-

änderung negativ wird, wird der betrachtete Cluster komplett in Feldrichtung umklappen. Dies geschieht wenn $B = S/M^*$ ist. Im oben genannten anschaulichen Spezialfall ist $S = 1$ und $M^* = 1$. Kompliziertere Fälle mit höheren Werten von S und M^* existieren auch. Insbesondere für kleine ganze Zahlen S und M^* existieren makroskopisch merkbar viele Cluster, die alle bei Erreichen des Feldes $B = S/M^*$ umklappen und zu Sprüngen im Ordnungsparameter führen. Diese Sprünge erschweren die Auswertung im *Finite-Size-Scaling* ungemein.

Dies führte zur Definition eines verdünnten Antiferromagneten mit leicht „ausgeschmierten“ Bonds, die auf J. Esser zurückgeht [53]. Die Wechselwirkung J zwischen den Spins, die im Normalfall -1 ist, wird ortsabhängig, aber zeitunabhängig (*quenched*) mit einer Breite s und einem Abschneideparameter c gaußverteilt um -1 gewählt. Man verwendet eine modifizierte Form der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \epsilon_i \sigma_i \epsilon_j \sigma_j - B \sum_i \epsilon_i \sigma_i \quad (3.1)$$

mit

$$J_{ij} = -1 + \delta J$$

und der Verteilung

$$P(\delta J) \sim \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\delta J^2}{s^2}\right), \quad \text{Zusatzbedingung } \delta J \in [-0,2, 0,2],$$

für δJ .

Durch die nun nicht mehr ganzzahlige Summe im Austauschanteil wird das oben beschriebene Verhalten unterdrückt, die Daten werden wesentlich leichter auszuwerten. Als Voraussetzung geht in die Betrachtung jedoch ein, daß die Universalitätsklasse des DAFF durch diese Änderung nicht beeinflusst wird.

3.2 Meßgrößen

Bevor nun auf die Ergebnisse eingegangen wird, sollen die Meßgrößen¹, die im weiteren von Interesse sind, genau definiert werden. In den folgenden Formeln wird häufig die Größe σ_i stehen. Für den Fall des DAFF müßte, ausgehend von der Definition der Hamiltonfunktionen (2.1, 3.1) stattdessen $\varepsilon_i \sigma_i$ erscheinen, und so sind diese Formeln für den DAFF dann auch zu verstehen.

Die spitzen Klammern $\langle \cdot \rangle$ bezeichnen das thermodynamische Mittel, die eckigen Klammern $[\cdot]_{\text{av}}$ bedeuten ein Mittel über verschiedene Unordnungsconfigurationen. Folgende Größen werden im Laufe der Simulation ausgewertet:

- Zunächst werden drei Hilfsgrößen, die Magnetisierung pro Spin, die *staggered* Magnetisierung pro Spin und die innere Energie pro Spin einer bestimmten Spin- und Unordnungsconfiguration definiert:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (3.2)$$

$$m_{\text{st}} = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^{n(i)} \sigma_i \quad (3.3)$$

$$u = \frac{1}{N} \mathcal{H}, \quad (3.4)$$

wobei $n(i) = 0$ oder 1 , je nach dem, ob der Spin i im antiferromagnetischen Untergitter A oder B des Systems liegt.

- Der Ordnungsparameter des RFIM, die Magnetisierung:

$$M = [\langle m \rangle]_{\text{av}}. \quad (3.5)$$

- Der Ordnungsparameter des DAFF die *staggered* Magnetisierung:

$$M_{\text{st}} = [\langle m_{\text{st}} \rangle]_{\text{av}} \quad (3.6)$$

- Die Innere Energie:

$$U = [\langle u \rangle]_{\text{av}} \quad (3.7)$$

¹Soweit nicht anders angegeben, werden die gleichen Formelzeichen verwendet, wie sie in Kapitel 1 eingeführt worden sind.

- Die Spezifische Wärme:

$$c = \frac{N}{T^2} [\langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2]_{\text{av}} \quad (3.8)$$

- Die Suszeptibilität:

$$\chi = \frac{N}{T} [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]_{\text{av}} \quad (3.9)$$

- Die *staggered* Suszeptibilität:

$$\chi_{\text{st}} = \frac{N}{T} [\langle m_{\text{st}}^2 \rangle - \langle m_{\text{st}} \rangle^2]_{\text{av}} \quad (3.10)$$

- Die *disconnected* Suszeptibilität:

$$\chi_{\text{dis}} = N [\langle m \rangle^2]_{\text{av}} \quad (3.11)$$

- Die *disconnected, staggered* Suszeptibilität:

$$\chi_{\text{dis,st}} = N [\langle m_{\text{st}} \rangle^2]_{\text{av}} \quad (3.12)$$

3.3 Die Meßdaten

Für das *Finite-Size-Scaling* (s. Anhang A.1.3) werden Daten für verschiedene Systemgrößen benötigt. Dabei kommen solche physikalischen Daten in Frage, die kritisches Verhalten am Phasenübergang aufweisen. Die wichtigste Meßgröße ist der Ordnungsparameter. Weiterhin kommen verschiedene zweite Ableitungen thermodynamischer Potentiale in Frage, also etwa die spezifische Wärme und Suszeptibilitäten. Zuerst sollen hier die Meßdaten vorgestellt werden, die dann im Kapitel 3.4 analysiert werden.

Beim DAFF ist der Ordnungsparameter des betrachteten Phasenübergangs die sogenannte *staggered* Magnetisierung M_{st} , die die langreichweitige antiferromagnetische Ordnung mißt. Zunächst seien die Daten aus den exakten Grundzuständen, öfür $T = 0$, betrachtet. Für äußere Felder, die kleiner als ein kritisches

Feld B_c sind, ist der Ordnungsparameter von Null verschieden, um dann bei B_c zu verschwinden. In Abbildung 3.1 ist der Ordnungsparameter abhängig vom äußeren Feld für die Systemgrößen 10, 16, 20, 26 und 40 dargestellt. Für die Systemgröße 10 wurde dabei über insgesamt 580 verschiedene Realisierungen der Unordnung und verschiedene Grundzustände für eine bestimmte Unordnung gemittelt. Für die anderen Systemgrößen betragen diese Zahlen entsprechend 140, 70, 40 und 10. Sehr gut sind die *Finite-Size* Effekte zu erkennen: Je kleiner das System ist, desto stärker wird ein scharfer Phasenübergang unterdrückt.

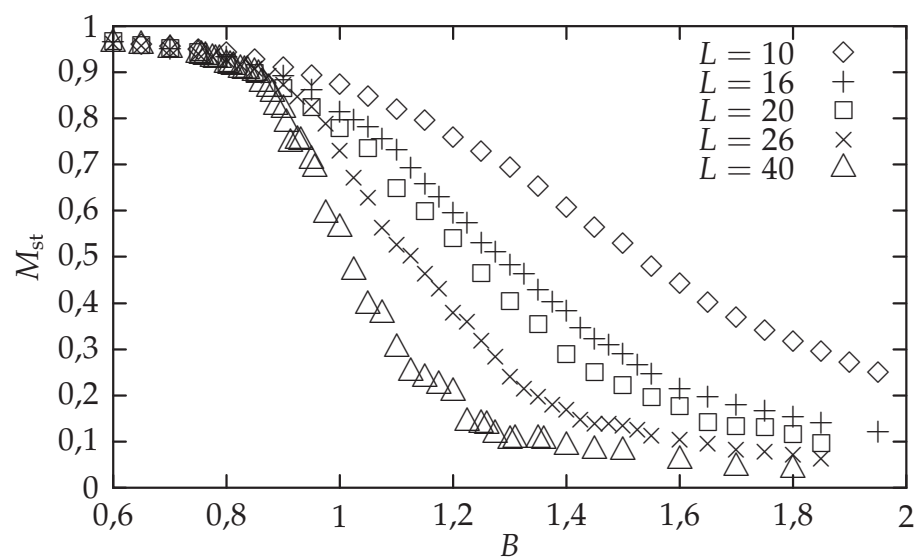


Abbildung 3.1: Ordnungsparameter-Meßdaten der exakten Grundzustände [53].

Exemplarisch für eine andere Größe sind in Abbildung 3.2 die Meßdaten für die spezifische Wärme, berechnet mit Hilfe von Monte Carlo-Simulationen, dargestellt. Technisch wurde dabei folgendermaßen vorgegangen: Das System wurde mit seinem exakten Grundzustand initialisiert. Dann wurde die Temperatur bei konstantem Feld erhöht. Dadurch erreicht man, daß sich das System im energetisch günstigsten Zustand befindet und beim Erhöhen der Temperatur zunächst Anregungen um diesen Zustand herum auftreten, öman befindet sich so lange im Gleichgewicht, bis bei höheren Temperaturen möglicherweise durch die komplizierte Struktur des Phasenraums Anregungen durch die Simulation nicht mehr

zugänglich sind, so daß man Nichtgleichgewichtseffekte bemerkt².

Diese Heizprozedur wurde für verschiedene äußere Felder durchgeführt. Geheizt wurde hier mit 15000 *Monte Carlo-Sweeps* pro Temperatur bei einem Temperaturschritt von 0,05. Ein *Monte Carlo-Sweep* entspricht dabei einem Update von allen Spins im System. Danach wurden die Daten gesammelt und abhängig vom äußeren Feld aufgetragen, also im Phasendiagramm entlang einer senkrechten Linie, die die Phasengrenzlinie schneidet. Die Auftragung und Auswertung ist dann genau die gleiche wie bei den Daten aus den exakten Grundzuständen und wird im folgenden Durchgeführt.

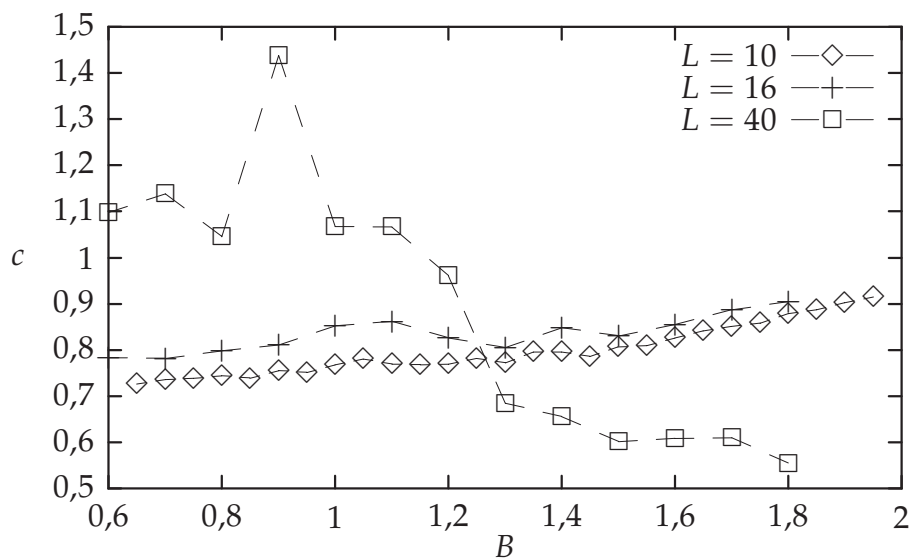


Abbildung 3.2: Spezifische Wärme: Meßdaten der Monte Carlo-Simulationen bei $T = 1,0$. Die gestrichelten Linien zwischen den Datenpunkten dienen nur dem Überblick.

²Natürlich verschwindet dieses Problem bei hinreichend hohen Temperaturen in der paramagnetischen Phase wieder, aber an diesem Bereich des Phasendiagramms ist man nicht interessiert.

3.4 Analyse der Meßdaten

Die Analyse der im vorigen Kapitel vorgestellten Meßdaten wird mit Hilfe von *Finite-Size-Scaling* durchgeführt. Diese Technik ist im Anhang [A.1.3](#) ausführlicher beschrieben.

3.4.1 *Finite-Size-Scaling*

Das $T = 0$ Problem

Bei Betrachtung der Formeln [3.5](#) bis [3.12](#) stellen sich zwei wichtige Fragen, wenn man bedenkt, daß die exakten Grundzustände für $T = 0$ bestimmt worden sind.

1. Was bedeutet das thermodynamische Mittel $\langle \cdot \rangle$ für $T = 0$?
2. Was passiert mit Größen, die ein $1/T$ in ihrer Definition enthalten?

Eine Antwort auf Frage 1 lautet: Bei $T = 0$ gibt es keine thermischen Fluktuationen, daher ist das thermische Mittel überflüssig und man kann es weglassen. In der Praxis wird es auch genauso gehandhabt. Bei genauerer Betrachtung stößt man jedoch auf ein fundamentales Problem, das sich prinzipiell nicht umgehen läßt, wenn man mit exakten Grundzuständen endlicher Systeme arbeitet: Es wurden zwei Grenzwerte, nämlich der thermodynamische Limes $N \rightarrow \infty$ und der Limes $T \rightarrow 0$ vertauscht. Eigentlich müßte man zuerst den thermodynamischen Limes ausführen, und dann die Temperatur gegen Null gehen lassen. Ein einfaches Beispiel zeigt, daß auch in viel einfacheren Systemen durch falsche Reihenfolge der Grenzwerte einige Grundzustände nicht gefunden werden: Ein einfacher, dreidimensionaler Ising-Antiferromagnet ist bei hinreichend kleinen äußeren Feldern bei $T < T_N$, also auch bei $T = 0$, langreichweitig geordnet. Die spontane Symmetriebrechung beim Phasenübergang erlaubt zwei Orientierungen der Untergitter. Dieses System ist ohne weiteres mit exakten Grundzuständen zu behandeln. Dies ändert sich jedoch, wenn man einen einzigen Spin, z. B. aus dem Untergitter B entfernt. Im thermodynamischen Limes ist dies irrelevant. Anders jedoch, wenn man zunächst endliche Systeme betrachtet und den exakten Grundzustand ausrechnet. Durch das kleine angelegte äußere Feld werden nur Grundzustände gefunden, in denen alle Spins des Untergitters A in Feldrichtung zeigen. Dies gilt

für alle endlichen Systemgrößen. In den exakten Grundzuständen fehlt in diesem Beispiel also die Hälfte aller Grundzustände im thermodynamischen Limes. Dieser Effekt ist nicht mit der spontanen Symmetriebrechung am Phasenübergang zu verwechseln, die in endlichen Systemen ebenfalls künstlich erzeugt werden muß, etwa durch ein geeignetes äußeres Feld, das man nach dem thermodynamischen Limes gegen Null gehen läßt. Dies beeinflußt nicht, daß das System zwei mögliche Grundzustände hat. In Ref. [54] wurde dieser Effekt genauer untersucht und es wurde gezeigt, daß im Prinzip angeregte Zustände ebenfalls betrachtet werden müssen. Dies ist ein weiterer Grund, warum Monte Carlo-Simulationen zusätzlich zu den exakten Grundzuständen wichtig sind, denn diese erlauben Anregungen über den Grundzustand hinaus.

Auf die zweite Frage kann man ebenso eine triviale Antwort geben: Größen, die Potenzen von $1/T$ enthalten, sind im Limes $T \rightarrow 0$ nicht definiert. Dies ist natürlich so nicht richtig, der dritte Hauptsatz der Thermodynamik besagt, daß die spezifische Wärme aller Körper am absoluten Nullpunkt 0 ist, damit also keine Divergenz vorliegt. Dennoch bleibt das praktische Problem bestehen: Wie kann man Größen bestimmen, die im Grenzübergang $T \rightarrow 0$ auf einen Term „0/0“ hinauslaufen und nur durch Konvergenz von Zähler und Nenner gegen 0 mit der gleichen Potenz definiert bleiben, wenn nur Daten für exakt $T = 0$ vorliegen? Hier gibt es mehrere Lösungsansätze. Eine Möglichkeit ist es, zunächst die Gleichungen 3.8 bis 3.12 nicht zu verwenden, sondern die ursprüngliche Definition dieser Größen als Ableitungen der inneren oder freien Energie nach der Temperatur zu verwenden. Skalenargumente [27, 55, 10] ergeben dann, daß es keine Rolle spielt, ob man nach der Temperatur oder dem äußeren (bzw. Random-Field) ableitet (s. auch Anhang A.2). Dies führt in letzter Konsequenz auf eine modifizierte Skalenrelation für $T = 0$ [56], die in Anhang A.2.2 genauer beschrieben wird. Für die spezifische Wärme ist es damit möglich, ihren kritischen Exponenten bei $T = 0$ zu bestimmen.

Eine andere Möglichkeit ist es, bei den entsprechenden Größen auf eine Auswertung bei $T = 0$ zu verzichten und Monte Carlo-Simulationen bei höheren Temperaturen zu verwenden. Dies bringt jedoch auch ein Problem mit sich: Bei tiefen Temperaturen ist eine Monte Carlo-Simulation nicht besonders effizient, bei höheren Temperaturen verliert man unter Umständen den Vorteil, mit einem Grundzustand die Simulation begonnen zu haben. Dennoch wird dieser Ansatz hier im

weiteren verfolgt, allerdings ist auf Grund der mäßigen Qualität der Daten sowohl für die spezifische Wärme als auch für die Suszeptibilität eine Auswertung nur beschränkt möglich. Insbesondere die spezifische Wärme wird im Kapitel 4 ausführlicher mit Monte Carlo-Methoden analysiert.

Kritisches Verhalten

Man erwartet nicht für alle Meßgrößen in beiden Systemen (DAFF und RFIM) kritisches Verhalten. Beim RFIM ist die homogene Magnetisierung der Ordnungsparameter, beim DAFF dagegen die *staggered* Magnetisierung. So erwartet man nur für die jeweils zugehörigen Suszeptibilitäten kritisches Verhalten. Die bereits erwähnten Skalenargumente [27, 55, 10] besagen, daß das kritische Verhalten an der betrachteten Linie im Phasendiagramm nicht davon abhängt, ob man die Temperatur oder das Feld variiert, daher ergeben sich folgende Erwartungen:

	DAFF		RFIM	
Ordnungsparameter	M_{st}	$\sim (B - B_c)^\beta$	M	$\sim (\Delta - \Delta_c)^\beta$
Suszeptibilität	χ_{st}	$\sim (B - B_c)^{-\gamma}$	χ	$\sim (\Delta - \Delta_c)^{-\gamma}$
Spezifische Wärme	c	$\sim (B - B_c)^{-\alpha}$	c	$\sim (\Delta - \Delta_c)^{-\alpha}$
Disconnected Suszeptibilität	$\chi_{\text{dis,st}}$	$\sim (B - B_c)^{-\bar{\gamma}}$	χ_{dis}	$\sim (\Delta - \Delta_c)^{-\bar{\gamma}}$

Zunächst werden nun die Daten für $T = 0$ betrachtet. Für die Analyse des Ordnungsparameters des DAFF wurde die *Finite-Size-Scaling* Gleichung (s. Anhang A.1.3)

$$M_{\text{st},L} = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}_{\text{st}} \left((B - B_c) L^{1/\nu} \right) \quad (3.13)$$

verwendet. Abbildung 3.3 zeigt den Skalenplot für M_{st} . Dargestellt sind die Meßdaten aus Abbildung 3.1. Der bestmögliche Datenkollaps wurde mit den Werten $B_c = 0,8 \pm 0,05$, $\nu = 1,1 \pm 0,1$ und $\beta = 0,02 \pm 0,01$ erreicht. Hier sei angemerkt, daß bei der Bestimmung der Exponenten zunächst alle Skalenplots mit Verbindungslinien zwischen den Meßpunkten und ohne Symbole für die Meßpunkte erstellt worden sind, denn die Qualität des Datenkollaps läßt sich so wesentlich besser beurteilen. Abgebildet sind in dieser Arbeit, bis auf wenige Ausnahmen, Plots, in denen ausschließlich die Meßpunkte eingetragen sind, denn nur diese wurden ja wirklich gemessen.

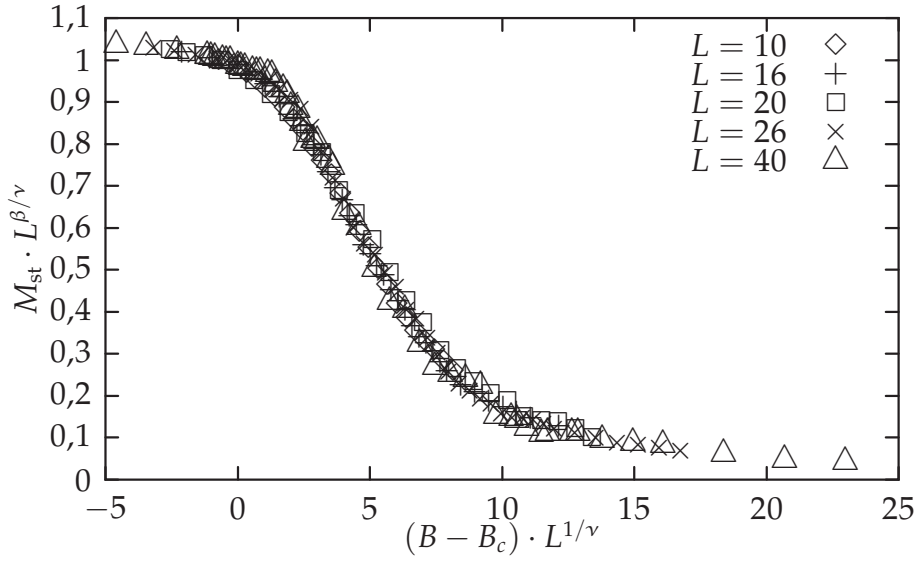


Abbildung 3.3: Skalenplot für den Ordnungsparameter des DAFF. Dargestellt sind die Grundzustandsmeßwerte ($T = 0$), die Werte aus den exakt berechneten Grundzuständen.

Die *staggered, disconnected* Suszeptibilität wurde gemäß folgender Gleichung analysiert:

$$\chi_{\text{dis},L} = L^{\bar{\gamma}/\nu} \tilde{\chi}_{\text{dis}} \left((B - B_c) L^{1/\nu} \right) \quad (3.14)$$

Abbildung 3.4 zeigt den Skalenplot. Hier wurden die gleichen Werte für B_c und ν wie in Abbildung 3.3 eingesetzt. Mit diesen Werten ergab sich der beste Datenkollaps mit $\bar{\gamma} = 3,4 \pm 0,4$. Da die Qualität der Daten für M_{st} und $\chi_{\text{dis},\text{st}}$ vergleichbar ist, ist es hier nicht notwendig, genau darauf zu achten, die bereits vorher bestimmten Werte ν und B_c einzusetzen, dies hat auf das Ergebnis keinen Einfluß.

Die Bestimmung der kritischen Exponenten der spezifischen Wärme bei $T = 0$ scheint zunächst unmöglich, da die spezifische Wärme am absoluten Nullpunkt verschwindet. Man kann aber versuchen, das kritische Verhalten der spezifischen Wärme zu berechnen, in dem man das kritische Verhalten der Ableitung der inneren Energie nach dem äußeren Feld bestimmt. Nach Ref. [56] gilt für das kritische Verhalten der inneren Energie:

$$\frac{\partial U}{\partial B} - u_1 = L^{\alpha/\nu} \tilde{U} \left((B - B_c) L^{1/\nu} \right), \quad (3.15)$$

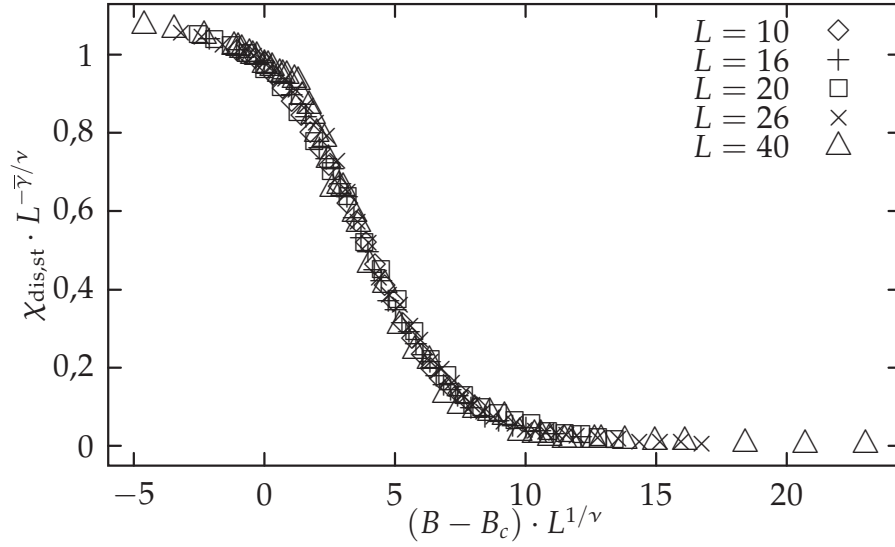


Abbildung 3.4: Skalenplot für die *staggered, disconnected* Suszeptibilität des DAFF. Dargestellt sind die Werte für $T = 0$ aus den exakten Grundzuständen.

siehe dazu auch Anhang A.2.2. Den mit Hilfe dieser Funktion erstellten Skalenplot zeigt Abbildung 3.5. Hier wurden ebenfalls die gleichen Werte für B_c und ν eingesetzt, wie sie oben bestimmt worden sind. Dies ist wichtig, denn bei ungenaueren Daten, wie sie hier vorliegen, ist es sinnvoll, möglichst viele Größen aus anderen Daten zu berechnen. Zusätzlich ist u_1 so bestimmt worden, daß $\frac{\partial U}{\partial B} - u_1 = 0$ am Wendepunkt der Kurven gilt, so genau es bei den auf Grund der numerischen Differentiation schon recht stark verrauschten Daten möglich war. Entsprechend weist der Skalenplot nicht die Qualität der Abbildungen 3.3 und 3.4 auf. Man muß aber bedenken, daß ohne eine Reskalierung der Daten die Kurven völlig unterschiedlich wären (für den Ordnungsparameter ist dies in Abbildung 3.1 sichtbar) und daher die Exponenten durchaus, wenn auch mit größeren möglichen Fehlern, bestimmt werden können³. In diesem Fall ergibt sich der Wert $\alpha_{T=0} = -0,5 \pm 0,2$. Ganz bewußt wurde der Exponent hier mit dem Index $T = 0$ versehen, um zu betonen, daß er für $T = 0$ aus Gleichung 3.15 bestimmt worden ist. Wie gezeigt wurde [56], unterscheidet sich der Exponent vom

³Andererseits sei auch auf die Bestimmung von α in Kapitel 4 verwiesen, wo gezeigt wird, daß man mit geeigneten Annahmen verschiedene Werte für α aus den gleichen Daten mit vergleichbarer Qualität des Skalenplots erhalten kann.

Exponenten α der spezifische Wärme. Hier sei auf die Diskussion des kritischen Verhaltens in Kapitel 4 sowie den Anhang A.2.2 verwiesen.

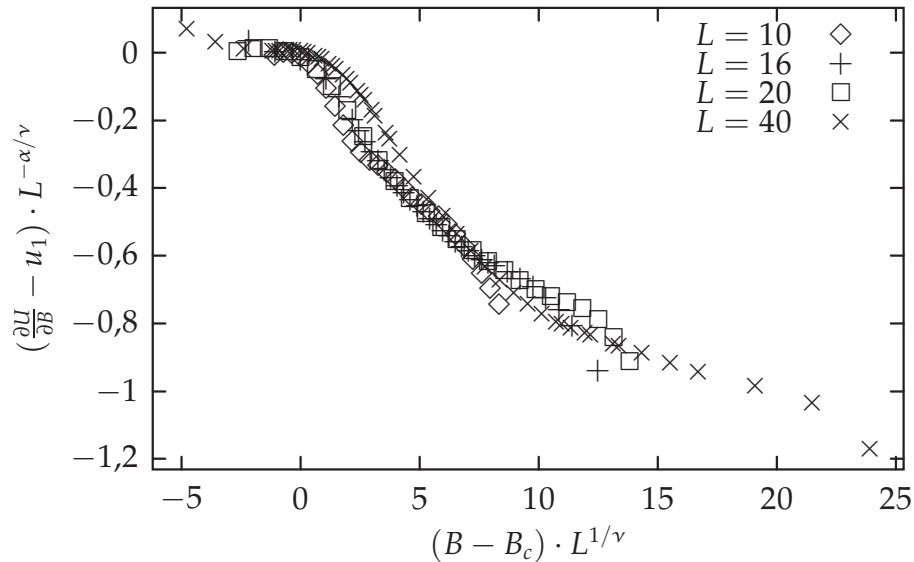


Abbildung 3.5: Skalenplot für die Ableitung der inneren Energie des DAFF für $T = 0$.

Alle bisher diskutierten Exponenten stammen aus der Auswertung der exakten Grundzustände. Um Werte für Temperaturen größer als 0 zu erhalten, müssen nun die Ergebnisse der Monte Carlo-Simulationen ausgewertet werden. Obwohl die Simulation mit den exakten Grundzuständen begonnen wurde, ergeben sich dennoch einige prinzipielle Probleme. Für sehr niedrige Temperaturen ist eine Monte Carlo-Simulation immer sehr ineffizient, denn thermische Anregungen werden sehr selten auftreten und man wird im wesentlichen die gleichen Meßwerte wie für die Grundzustände erhalten. Wenn die Temperaturen jedoch zu hoch sind, ist es kein Vorteil mehr, mit dem exakten Grundzustand angefangen zu haben. In diesem Fall ist es wegen der langsamen Dynamik des Systems genauso schwer, Gleichgewichtsmessungen durchzuführen, wie bei einer anderen Initialisierung. Nur in einem Zwischenbereich, in dem thermische Anregungen bereits existieren, der Gleichgewichtszustand aber im Phasenraum in der „Nähe“ des Grundzustandes liegt, sind gute Ergebnisse zu erwarten. Die Monte Carlo-Simulation kann auch bei Initialisierung mit exakten Grundzuständen nicht im ganzen Phasenraum Gleichgewichtsergebnisse liefern. Aber man kann feststellen,

ob das kritische Verhalten für kleine Temperaturen sich vom Verhalten bei $T = 0$ unterscheidet, wie etwa beim zweidimensionalen Ising-Antiferromagneten, wo sogar ein Unterschied in der Ordnung des Phasenübergangs auftritt.

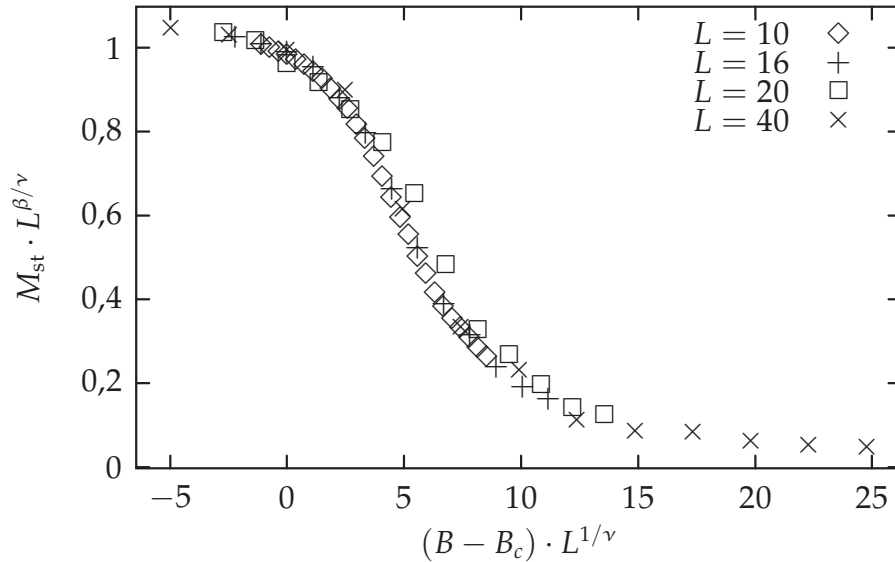


Abbildung 3.6: Skalenplot für M_{st} des DAFF für $T = 0,4$.

Der Skalenplot für den antiferromagnetischen Ordnungsparameter des DAFF bei einer Temperatur von $T = 0,4$ ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Wie man sieht, ist die Qualität vergleichbar mit Abbildung 3.3. In diesem Plot wurden die kritischen Exponenten eingesetzt, die für die Grundzustände ermittelt wurden. Es wurde lediglich versucht, durch Ändern von B_c eine Optimierung des Plots zu erreichen, innerhalb der anzunehmenden Fehler wurde bei dieser Temperatur kein Unterschied zu den Grundzuständen festgestellt. Auch für eine Temperatur von $T = 1,0$ ist mit diesen Parametern noch ein guter Skalenplot zu erhalten, allerdings liefert auch ein geringfügig kleiner gewähltes B_c ein gutes Ergebnis, aber der Unterschied ist im Rahmen der möglichen Fehler von B_c nicht signifikant. Daran kann man erkennen, daß die Grenzlinie zwischen langreichweitig geordneter Phase und dem Domänenzustand im Phasendiagramm bei tiefen Temperaturen sehr flach verläuft. Für $T = 1,5$ zeigt sich, daß man die Krümmung der Phasengrenzlinie erreicht hat (vergl. Abbildung 2.4). Hier ist es nicht mehr möglich, mit den Parametern von tieferen Temperaturen einen Datenkollaps zu erreichen. Es ist je-

doch möglich, mit ungeänderten Exponenten einen, im Rahmen des Rauschens der Monte Carlo-Daten, akzeptablen Skalenplot zu erstellen, jedoch ergeben geänderte Exponenten einen verbesserten Plot. In Abbildung 3.7 ist der Skalenplot mit ungeänderten Exponenten ν und β abgebildet, es ergibt sich $B_c = 0,62 \pm 0,02$.

Dagegen zeigt Abbildung 3.8 einen deutlich besseren Skalenplot für $T = 1,5$.

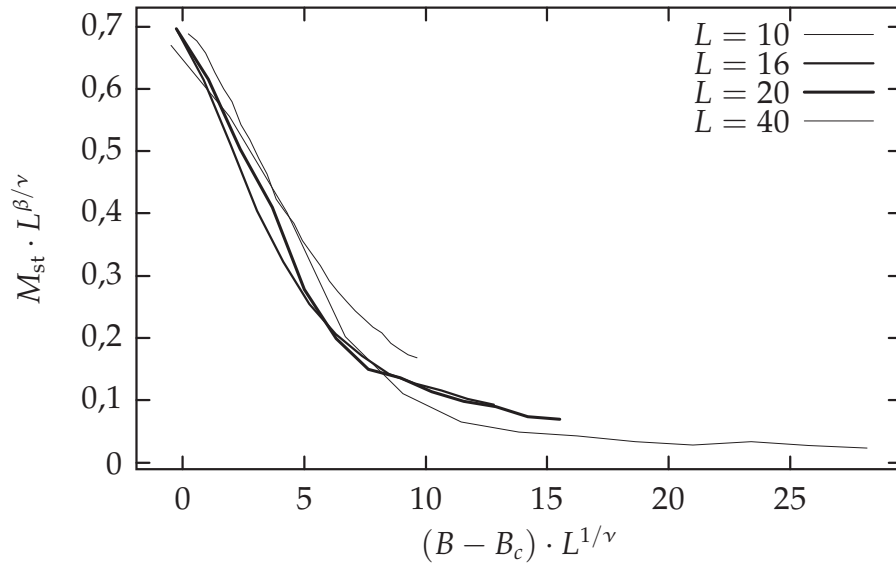


Abbildung 3.7: Skalenplot für M_{st} des DAFF für $T = 1,5$. Eingesetzt wurden die Exponenten, wie sie für kleinere Temperaturen bestimmt worden sind. Hier sind ausnahmsweise keine Meßpunkte, sondern nur Verbindungslinien eingezeichnet, um den Unterschied zu Abbildung 3.8 zu verdeutlichen.

Allerdings ergeben sich dabei unrealistisch hohe Werte etwa für B_c , das hier im Vergleich mit tiefen Temperaturen noch nicht wesentlich abgesunken ist, es ist $B_c = 0,79 \pm 0,02$. Als Werte für die Exponenten sind hier $\nu = 0,83 \pm 0,1$ und $\beta = 0,3 \pm 0,05$ eingestellt. Um die Abbildungen 3.7 und 3.8 besser vergleichen zu können, sind in ihnen ausnahmsweise nicht die Meßpunkte eingetragen, sondern die Verbindungslinien. Dies erlaubt eine bessere Beurteilung des Datenkollapses. Die Meßpunktdichte ist genauso groß wie in den anderen Skalenplots.

Große Probleme bereitet die Auswertung der spezifischen Wärme aus den Monte Carlo-Simulationen. Die Meßdaten sind in Abbildung 3.2 dargestellt. Wie die stark verrauschten Daten zeigen, ist es sehr schwer, für kleinere Systemgrößen ein Maximum oder einen Wendepunkt zu erkennen, die den kritischen Punkt be-

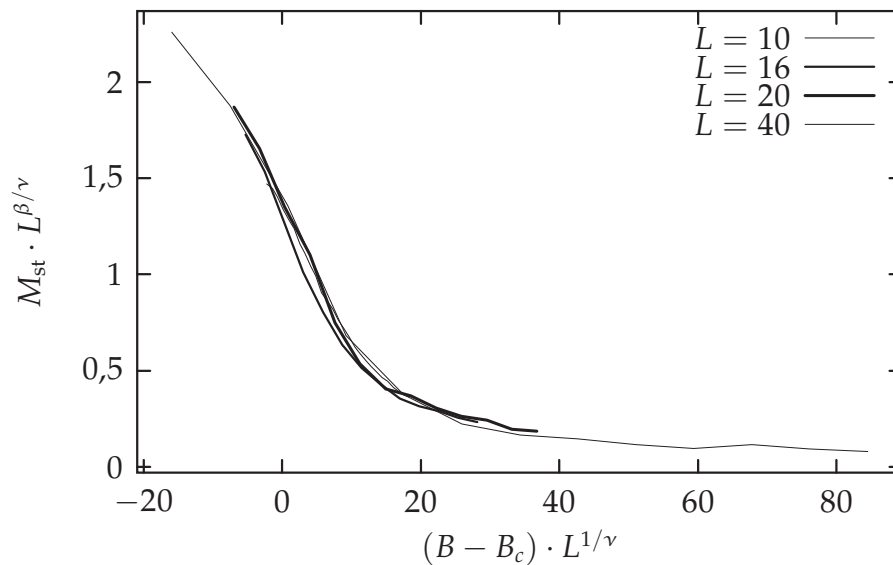


Abbildung 3.8: Skalenplot für M_{st} des DAFF für $T = 1,5$. Hier sind die Exponenten eingestellt, die den besten Datenkollaps ergeben. Ebenfalls wie in Abbildung 3.7 sind hier nur Verbindungslinien gezeichnet.

zeichnen. In einer *Finite-Size-Scaling* Analyse kann mit diesen Daten kein zufriedenstellender Datenkollaps für alle Systemgrößen erreicht werden. Daher wird an dieser Stelle ganz darauf verzichtet, die spezifische Wärme auszuwerten und auf das Kapitel 4 verwiesen. Dort wird, allerdings für höhere Temperaturen, eine detailliertere Analyse der Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsdaten der spezifischen Wärme mit aufwendigeren Methoden durchgeführt.

3.4.2 Diskussion der Ergebnisse

Die Ergebnisse, die in diesem Kapitel beschrieben wurden, lassen zwei wichtige Schlußfolgerungen zu.

Es konnte gezeigt werden, daß das kritische Verhalten für $T = 0$ und $T > 0$ durch die gleichen kritischen Exponenten beschrieben werden kann⁴. Bis hin zu Temperaturen von etwa $T = 1,0$ lassen sich gute Skalenplots der gemessenen Daten mit einem Satz von Exponenten erzielen. Es ist zu überprüfen, ob mit der Mon-

⁴Das Verhalten der spezifische Wärme muß hierbei gesondert betrachtet werden, denn der bestimmte Exponent $\alpha_{T=0}$ ist nicht mit dem kritischen Exponenten der spezifische Wärme identisch, siehe Ref. [56], die Diskussion in Kapitel 4 und den Anhang A.2.2.

te Carlo-Simulation nicht Grundzustandseigenschaften gemessen worden sind. Dies wäre möglich, wenn bei tiefen Temperaturen praktisch keine Spin-Flips akzeptiert würden, sich das System also gar nicht ändert. Daß dies nicht der Fall ist, zeigt Abbildung 3.9. Dargestellt ist hier die innere Energie während eines Auf-

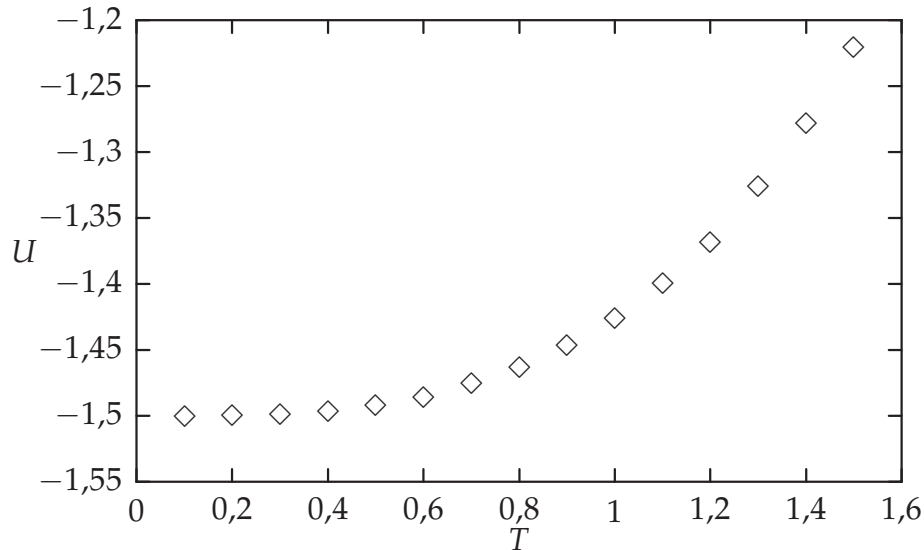


Abbildung 3.9: Innere Energie des DAFF beim Aufheizen im äußeren Feld von $B = 0,8$.

heizvorgangs bei einem äußeren Magnetfeld von $B = 0,8$, exemplarisch hier ohne Mittelung über mehrere verschiedene Verdünnungskonfigurationen. Eindeutig ist die deutliche Energieerhöhung bei Temperaturen von $T = 1,0$ im Vergleich zum Grundzustand zu erkennen, die Monte Carlo-Simulation ist nicht wegen der zu tiefen Temperatur und wenig akzeptierten Spinflips ineffizient, sondern thermische Anregungen existieren im System. Für höhere Temperaturen zeigen die Abbildungen 3.7 und 3.8 allerdings, daß mit Hilfe der Monte Carlo-Simulation in diesem Temperaturbereich keine sinnvollen Daten über das kritische Verhalten mehr gewonnen werden können, es tritt hier der bereits angesprochene Effekt ein, daß Nichtgleichgewichtseffekte das kritische Verhalten unterdrücken.

Desweiteren konnte durch Vergleich mit Ergebnissen für das RFIM gezeigt werden, daß der DAFF im Rahmen der Genauigkeit, die diese Untersuchungen zulassen, in der gleichen Universalitätsklasse wie das RFIM ist⁵. Wie bereits er-

⁵Nach neuesten Veröffentlichungen muß man dies allerdings auf das RFIM mit gaußverteilten

wähnt gilt dies sowohl für $T = 0$ als auch für Temperaturen größer als Null. Die Universalitätsklasse unterscheidet sich für $T = 0$ nicht von der für höhere Temperaturen.

Die Ergebnisse für die Exponenten sind in Tabelle 3.1 zusammengefaßt, die Daten für das RFIM stammen aus Ref. [13] und sind auf die gleiche Weise berechnet worden. Beim RFIM ist es zusätzlich möglich, den Exponenten der Suszeptibilität γ zu bestimmen, beim DAFF sind die Daten der Suszeptibilität so stark verrauscht, daß eine sinnvolle Auswertung nicht möglich ist.

Die Diskussion der Werte der Exponenten, mit all ihren Folgen bezüglich der Gültigkeit von Skalenrelationen, die die kritischen Exponenten verbinden, wird auf das Ende des Kapitels 4 verlegt, wo auch für den DAFF ein Ergebnis für α bei höheren Temperaturen vorgestellt wird. In diesem Zusammenhang sei auch auf Tabelle 4.1 verwiesen, die einen vollständigen Vergleich der Exponenten auch mit experimentell bestimmten Werten liefert.

	DAFF	RFIM
ν	1,1 $\pm 0,1$	1,0 $\pm 0,1$
$\alpha_{T=0}$	-0,5 $\pm 0,2$	-0,55 $\pm 0,2$
β	0,02 $\pm 0,01$	0,05 $\pm 0,04$
$\bar{\gamma}$	3,4 $\pm 0,4$	2,9 $\pm 0,3$

Tabelle 3.1: In diesem Kapitel bestimmte kritische Exponenten.

Zufallsfeldern einschränken [29, 30].

4 Die spezifische Wärme

Die spezifische Wärme verdünnter Antiferromagnete ist aus vielen Gründen eine interessante Größe. Zum einen kann man versuchen, das kritische Verhalten der spezifischen Wärme zu untersuchen, auch wenn die Vergangenheit gezeigt hat, daß eben dieses nur sehr schwer zugänglich ist, zum anderen kann das Nichtgleichgewichtsverhalten selbst von Interesse sein.

Der Exponent α der spezifischen Wärme ist in der Literatur sehr umstritten. Es existieren Messungen, die ein negatives α ergeben¹, in neueren Experimente wird $\alpha \approx 0$ gemessen [17]. In Simulationen, die die spezifische Wärme direkt bestimmen, ergibt sich $\alpha \approx -0,5$ [58,59]. Die bereits in Kapitel 3 beschriebenen Analysen der exakten Grundzustände ergeben ebenfalls $\alpha_{T=0} \approx -0,5$, wobei aber gleichzeitig erwähnt werden muß, daß sich für $T \rightarrow 0$ der Exponent α ändern sollte [56]. Arbeiten, die Skalenrelationen verwenden, um α aus anderen Exponenten auszurechnen, erhalten positive Werte für α [51]. Das heißt, selbst das Vorzeichen des Exponenten ist umstritten. Dies ist bei den anderen Exponenten nicht der Fall, bei diesen stimmen Werte aus Experiment und Theorie im wesentlichen überein.

Hauptmotivation für die folgenden Untersuchungen waren sehr neue Veröffentlichungen [19, 21, 17], in denen experimentelle Messungen der spezifischen Wärme mit teilweise überraschenden Ergebnissen beschrieben werden. Es ist sinnvoll, zu überprüfen, ob Simulationen die Ergebnisse bestätigen können.

¹allerdings für $\text{Fe}_{0,85}\text{Mg}_{0,15}\text{Br}_2$, ein System mit geringerer Anisotropie [57], bzw. $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Cl}_2$, nicht ein verdünntes, sondern gemischtes System mit unterschiedlichen magnetischen Ionen und kleinerer Anisotropie.

4.1 Keine Irreversibilitäten?

Neueste Messungen an $\text{Fe}_{0,58}\text{Zn}_{0,42}\text{F}_2$ und $\text{Fe}_{0,5}\text{Zn}_{0,5}\text{F}_2$ haben ergeben, daß im Gegensatz zu vielen anderen Meßgrößen wie dem Ordnungsparameter oder der Magnetisierung die spezifische Wärme keine Irreversibilitäten in *zfc-fc* Zyklen aufweist, wie sie in Kapitel 2.5 beschrieben worden sind [21, 19]. Dies ist in Abbildung 4.1 zu sehen. Klar zu erkennen ist, daß zwischen den Kurven für *zfc* und *fc* keine signifikanten Unterschiede erkennbar sind, also keine Irreversibilitäten gemessen wurden. Durchgeführt wurden diese Messungen allerdings mit einem handelsüblichen Kalorimeter, das eine deutlich geringere Temperaturauflösung als andere Apparaturen (s. [17]) aufweist. Das gleiche Ergebnis ist in Abbildung 4.2 zu sehen, hier gemessen mit optischen Methoden [19].

Messungen mit besserer Auflösung an dem nur schwach verdünnten Antiferromagneten $\text{Fe}_{0,93}\text{Zn}_{0,07}\text{F}_2$ zeigen nur eine sehr geringe Hysterese der spezifischen Wärme in einem *zfc-fc* Zyklus [17]. Diese Messungen wurden ebenfalls mit klassischer Kalorimetrie durchgeführt. Beim Vergleich der experimentellen Ergebnisse ist zu beachten, daß die Temperaturauflösung in Abbildung 4.3 wesentlich höher als etwa in Abbildung 4.1 ist, so daß die geringen Irreversibilitäten, wie sie im Inset in Abbildung 4.3 vorhanden sind, bei den anderen Messungen eventuell nicht aufgelöst werden konnten.

4.2 Simulationen

Im folgenden soll geklärt werden, ob, abweichend von anderen Größen wie etwa dem Ordnungsparameter oder der Magnetisierung, die spezifische Wärme auch in der Simulation keine oder nur geringe Irreversibilitäten zeigt. Als Modell-Hamiltonfunktion wurde der verdünnte Ising-Antiferromagnet, wie er in Gleichung 2.1 definiert ist, verwendet. Das äußere Feld wurde dabei auf $B = 0,8$ gesetzt. Dies entspricht bereits recht hohen vergleichbaren Feldern im Experiment, Felder, die dem 0,8-fachen der Austauschwechselwirkung entsprechen, liegen in der Größenordnung 6 Tesla (vergl. Kapitel 2.1). Die höchsten im Experiment verwendeten Felder liegen bei 7 Tesla [19, 17, 18] bzw. maximal 10 Tesla [21] verwendet. Die Vergleichbarkeit mit dem Experiment wird dadurch zwar etwas eingeschränkt, da die meisten Messungen bei niedrigeren Feldern durchgeführt

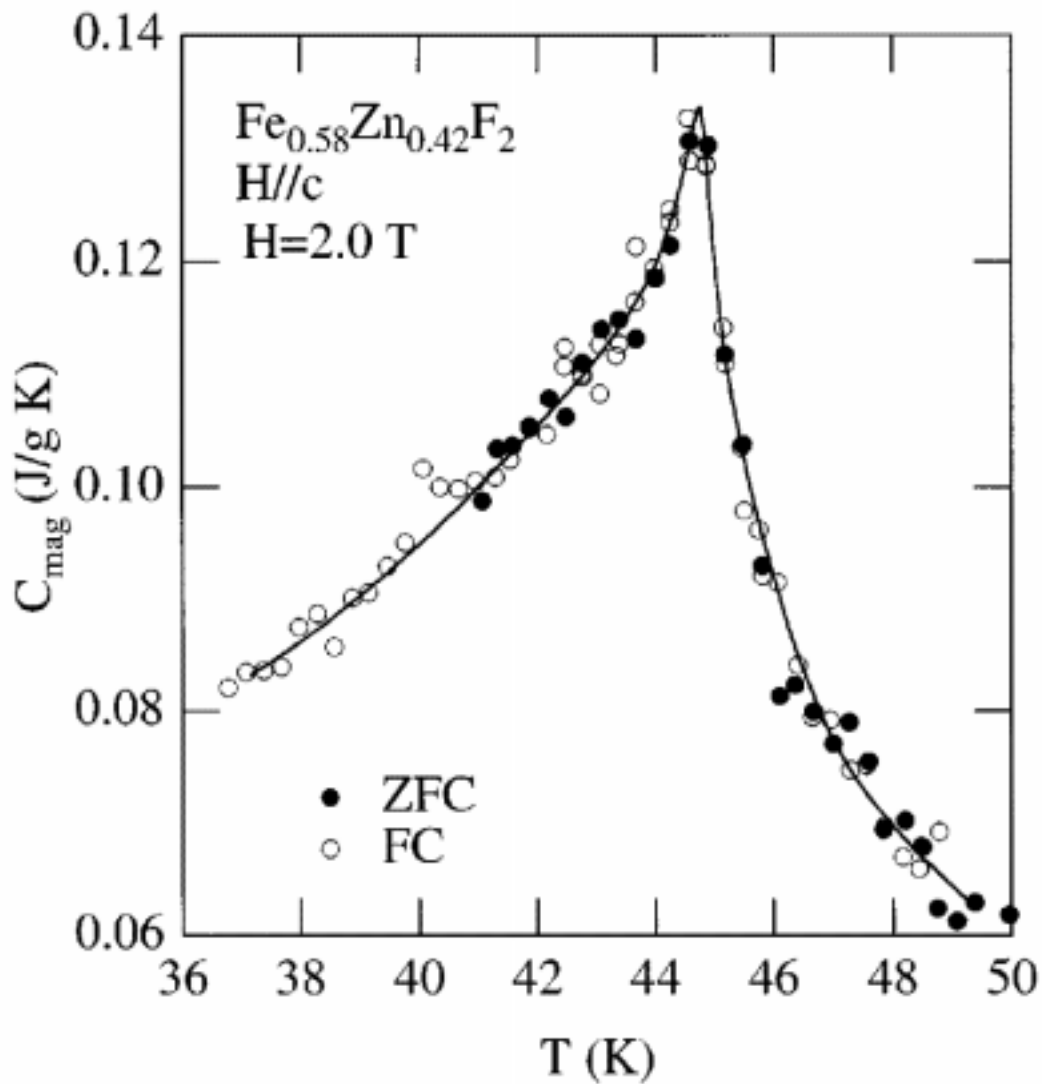


Abbildung 4.1: Experimentell bestimmte Werte der spezifischen Wärme von $\text{Fe}_{0.58}\text{Zn}_{0.42}\text{F}_2$ in einem *zfc-fc* Zyklus bei einem äußeren Feld von 2,0 T. Die ausgefüllten Symbole entsprechen dabei *zfc*, die offenen *fc* [21].

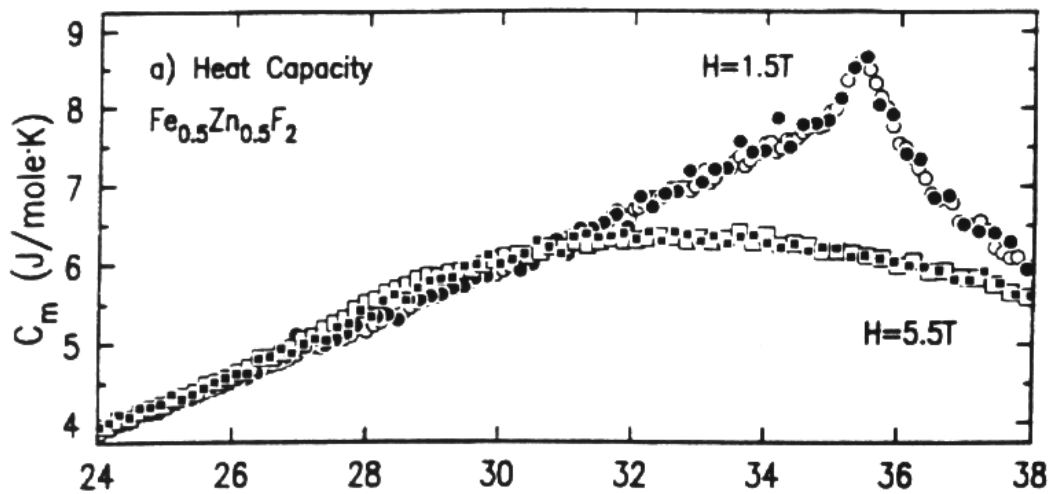


Abbildung 4.2: Experimentell bestimmte Werte der spezifischen Wärme von $\text{Fe}_{0,5}\text{Zn}_{0,5}\text{F}_2$ in einem *zfc-fc* Zyklus. Gezeigt ist die Messung für zwei unterschiedliche äußere Felder, die ausgefüllten Symbole entsprechen dabei *fc*, die offenen *zfc* [19].

werden. Solche hohen Felder sind in einer Simulation endlicher Systeme notwendig, da sonst Crossover Effekte vom $B = 0$ -Verhalten die Messung beeinflussen. Daher wurde hier das B -Feld so gewählt, daß der Grundzustand noch der langreichweitig geordnete ist, aber Einflüsse des $B = 0$ -Verhaltens möglichst klein sind.

Ziel der Simulationen ist einerseits, die experimentellen Ergebnisse besser zu deuten, so bedarf die in Ref. [21] angegebene Erklärung der fehlenden Hysterese dringend der Überprüfung (s. Kapitel 4.5). Da Meßgrößen wie Ordnungsparameter, Magnetisierung, innere Energie und deren Ableitung nach der Temperatur, die spezifische Wärme, direkt meßbar sind, wird dies erleichtert. Andererseits werden durch eine sorgfältige Analyse der kritischen Temperatur und des kritischen Verhaltens am temperaturgetriebenen Phasenübergang von der langreichweitig geordneten Phase in die paramagnetische Phase kritische Exponenten bestimmt, insbesondere, soweit möglich, auch α .

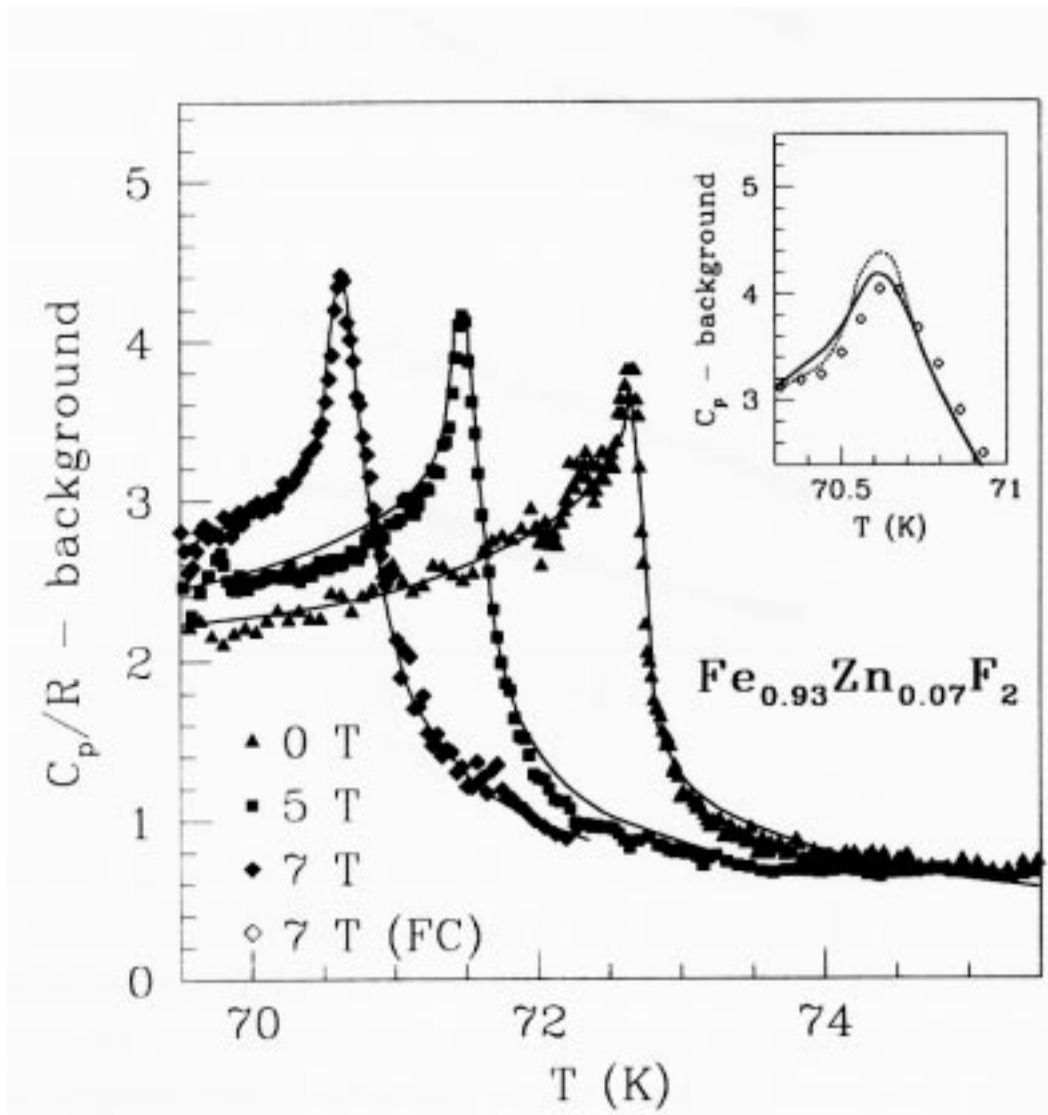


Abbildung 4.3: Experimentell bestimmte Werte der spezifischen Wärme von $\text{Fe}_{0.93}\text{Zn}_{0.07}\text{F}_2$ in einem zfc - fc Zyklus. Gezeigt ist die Messung für unterschiedliche äußere Felder. Der Unterschied zwischen fc und zfc ist im Inset zu erkennen, die punktierte Linie bezeichnet hier das zfc Verhalten, die eingetragenen Meßpunkte fc [17].

4.3 Gleichgewichtsverhalten

Zur Bestimmung der kritischen Temperatur soll zunächst das Gleichgewichtsverhalten beschrieben werden. Dies ist, wie bereits mehrfach betont wurde, schwierig, da die langsame Dynamik Einfrier- und damit Nichtgleichgewichtseffekte erzeugt. In [Abbildung 4.4](#) sind Daten einer Testsimulation abgebildet, die überprüfen sollte, ob die Simulation während der *zfc* Prozedur Gleichgewichtswerte erzeugt. Nur auf diesem Ast der *zfc-fc* Schleife sind überhaupt Gleichgewichtsdaten zu erwarten, denn die bereits beschriebenen Irreversibilitäten beweisen, daß das System beim Kühlen im Feld in einem Nichtgleichgewichtszustand einfriert. Das System wurde in Temperaturschritten von 0,1 mit 10000 *Monte Carlo-Sweeps*

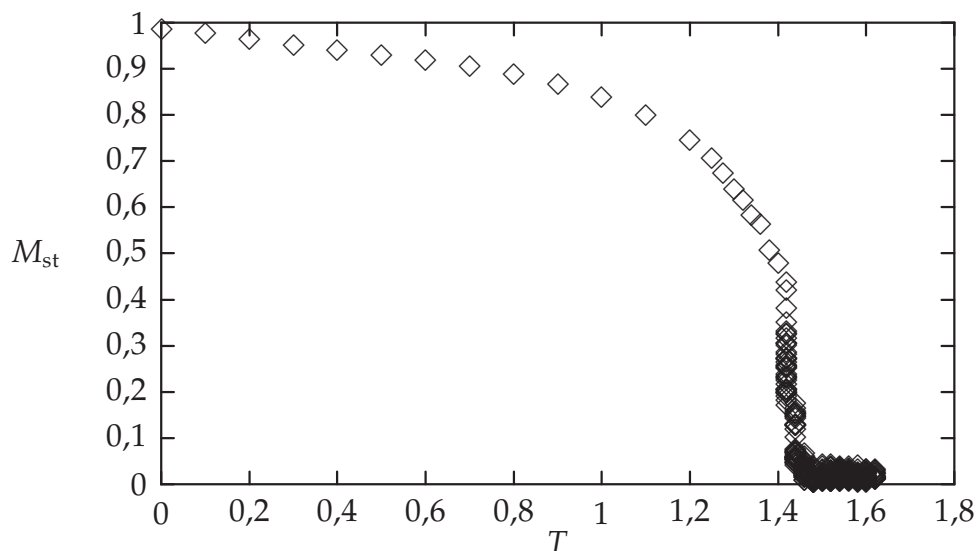


Abbildung 4.4: Test des üblichen Single-Spin-Flip-Algorithmus. Aufgetragen ist der antiferromagnetische Ordnungsparameter über der Temperatur. Das System wurde in einem konstanten FELD von $B = 0,8$ aufgeheizt. Nichtgleichgewichtseffekte zeigen sich bei $T = 1,4$, wo die Temperatur zunächst nicht erhöht wurde, sondern die Simulation bei konstanter Temperatur verlängert wurde.

(MCS) pro Schritt ausgehend vom Grundzustand aufgeheizt. Bei $T = 1,4$ wurde die Temperatur zunächst nicht weiter erhöht, sondern je Symbol in [Abbildung 4.4](#) weitere 10000 MCS durchgeführt. Die Nichtgleichgewichtseffekte sind klar erkennbar, denn M_{st} sinkt während der Dauer der Simulation bei $T = 1,4$ stark ab.

Dies ist ein Zeichen, daß die ersten Meßpunkte nicht im Gleichgewicht bestimmt worden sind. Ebenfalls erkennbar ist dies an der spezifischen Wärme: Diese läßt sich im thermischen Gleichgewicht auf zwei Arten messen, einerseits über die Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur, andererseits aus den Fluktuationen der inneren Energie:

$$c = \frac{dU}{dT} = \frac{d\langle \mathcal{H} \rangle}{dT} = \frac{1}{T^2} (\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2), \quad (4.1)$$

denn es gilt

$$\frac{d\langle \mathcal{H} \rangle}{dT} = \frac{d}{dT} \frac{1}{Z} \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} \mathcal{H} = -\frac{1}{Z^2} \frac{dZ}{dT} \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} + \frac{1}{Z} \text{Sp} \frac{d}{dT} e^{-\beta \mathcal{H}} \mathcal{H} \quad (4.2)$$

$$= -\frac{1}{T^2} \frac{1}{Z^2} (\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} \mathcal{H})^2 + \frac{1}{T^2} \frac{1}{Z} \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} \mathcal{H}^2 \quad (4.3)$$

$$= \frac{1}{T^2} (-\langle \mathcal{H} \rangle^2 + \langle \mathcal{H}^2 \rangle). \quad (4.4)$$

Ein Zeichen für Nichtgleichgewichtseffekte ist es, wenn Gleichung 4.1 für die Ergebnisse der Simulation nicht erfüllt ist, dies ist hier der Fall, zusätzlich zu den in Abbildung 4.4 erkennbaren Effekten.

Es stellt sich nun die Frage, wie das Problem möglicherweise gelöst werden kann. Eine „brute-force“ Methode wäre nun, die Simulationsdauer soweit zu erhöhen, bis die Nichtgleichgewichtseffekte hinreichend klein sind. Es ist jedoch fraglich, ob dies mit einem einfachen Single-Spin-Flip-Algorithmus überhaupt möglich ist. Daher wurde versucht, das thermische Gleichgewicht dadurch zu erreichen, einen effizienteren Simulationsalgorithmus einzusetzen. Die folgenden Ergebnisse wurden mit einem modifizierten Swendsen-Wang Algorithmus [60] berechnet. Dies vermeidet die Probleme von Single-Spin-Flip-Algorithmen. In diesen werden typischerweise nur Spins an Rändern von Domänen umgedreht, da innerhalb der Domänen der Energieunterschied zwischen Spin-Up und Spin-Down normalerweise so groß ist, daß eine Spinumkehr sehr unwahrscheinlich ist. In Clusteralgorithmen wird das System in Cluster von Spins eingeteilt, die dann komplett gedreht werden, sodaß auch ganze Domänen an der Dynamik teilhaben. Der eigentliche Swendsen-Wang Algorithmus ist zunächst nur für verschwindende äußere Felder entwickelt worden, hier wurde nach [61, 60] die Kopplung ans Feld über die Clustermagnetisierung mit Hilfe der *heat bath* Wahrscheinlichkeit

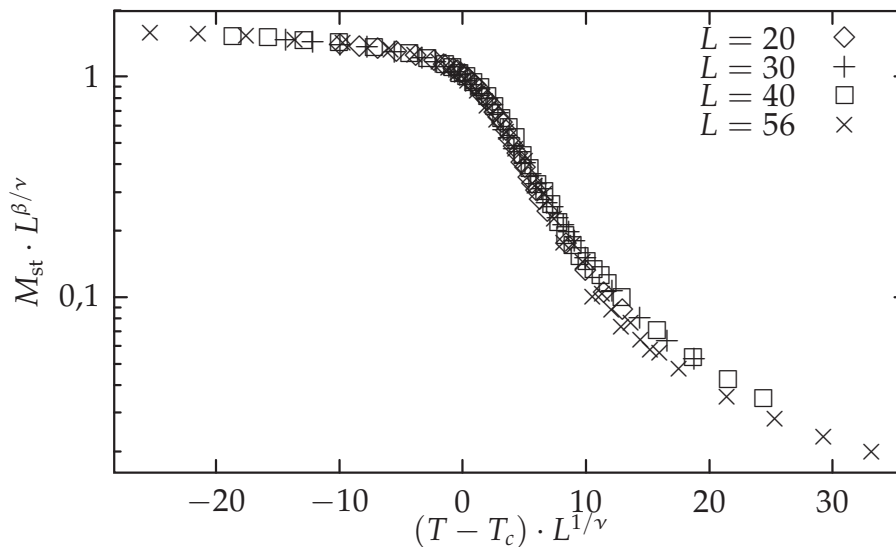


Abbildung 4.5: Skalenplot für den Ordnungsparameter des DAFF am temperaturgetriebenen Phasenübergang.

realisiert.

Bevor genauer Gleichung 4.1 verifiziert wird, werden hier zunächst die „bewährten“ Größen M_{st} und $\chi_{dis,st}$ betrachtet.

In Abbildung 4.5 ist zunächst der Skalenplot für den antiferromagnetischen Ordnungsparameter dargestellt. Mit den Parametern $T_c = 1,35 \pm 0,05$, $\nu = 1,09 \pm 0,05$ und $\beta = 0,15 \pm 0,05$ ergibt sich hier der optimale Datenkollaps. Mit den gleichen Werten für T_c und ν wurde Abbildung 4.6 erstellt, die den Skalenplot für die *disconnected, staggered* Suszeptibilität zeigt. Daraus ergibt sich der Wert für $\bar{\nu} = 2,9 \pm 0,3$. Wichtig ist für die spätere Diskussion der spezifische Wärme vor allem der Wert von T_c , denn diese Temperatur wird einerseits benötigt, um in Skalenplots der spezifischen Wärme eine bereits bekannte Größe einzusetzen, andererseits soll sie mit der Temperatur, an der das Maximum der spezifischen Wärme liegt, verglichen werden.

Die spezifische Wärme, bestimmt nach den in Gleichung 4.1 angegebenen Verfahren, ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die numerische Ableitung $\frac{dU}{dT}$ wurde dabei wie folgt bestimmt: Zunächst wurde durch die Meßpunkte der inneren Energie U eine B-Spline Approximation gelegt, von der dann die Ableitung exakt berech-

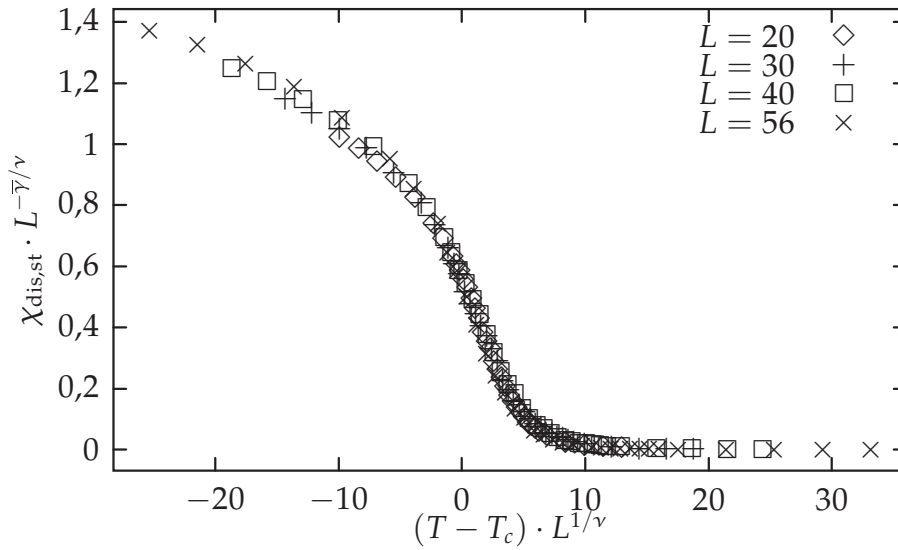


Abbildung 4.6: Skalenplot für die *disconnected, staggered* Suszeptibilität des DAFF am temperaturgetriebenen Phasenübergang.

net wurde. Dies vermeidet Sprünge in der numerischen Ableitung, die bei einem einfachen Differenzen-Verfahren entstehen, wenn die Daten verrauscht sind. Wie man in Abbildung 4.7 erkennen kann, unterscheiden sich die unterschiedlich bestimmten Daten nur unwesentlich, was darauf hinweist, daß die Simulationen nahe am Gleichgewicht durchgeführt worden sind.

Daß das kritische Verhalten der spezifische Wärme sehr schwer zugänglich ist, ist Abbildung 4.8 zu entnehmen. Deutlich erkennbar liegt das Maximum der spezifische Wärme bei höheren Temperaturen als T_c . *Finite-Size* Effekte, die eine ähnliche Wirkung haben können, können hier aber ausgeschlossen werden, da die Meßwerte keine signifikante Abhängigkeit von der Systemgröße zeigen. Eine Analyse des Maximums mit Hilfe von *Finite-Size-Scaling* ist daher nicht sinnvoll. Das kritische Verhalten ist aus Abbildung 4.8 praktisch nicht zu entnehmen.

Es gibt jedoch eine weitere Methode, die herangezogen werden kann, um α zu bestimmen. Kleemann et al. (s. [62] sowie Anhang A.2.1) haben gezeigt, daß die Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur ebenso mit der Temperatur

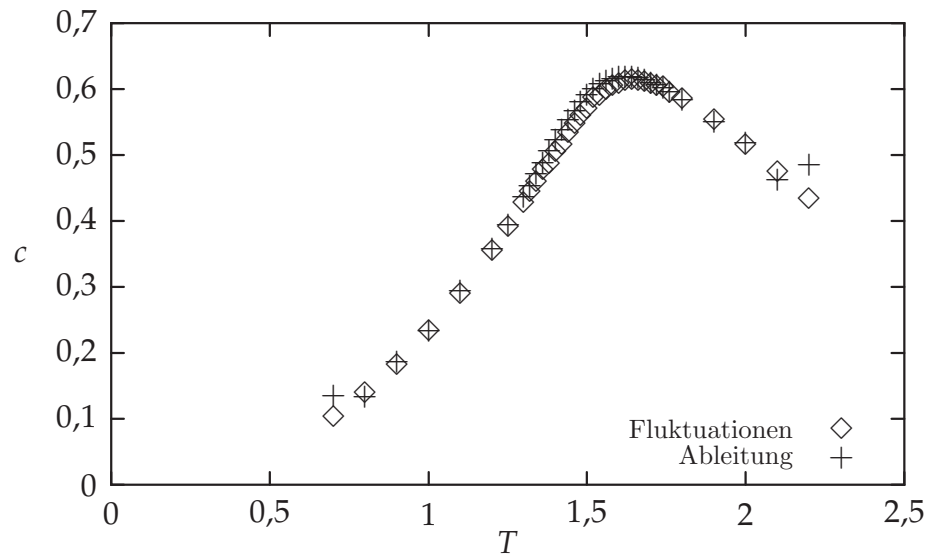


Abbildung 4.7: Die spezifische Wärme des DAFF beim Heizen nach *zfc*. Gezeigt sind Werte die nach den beiden unterschiedlichen Methoden aus Gleichung 4.1 berechnet worden sind.

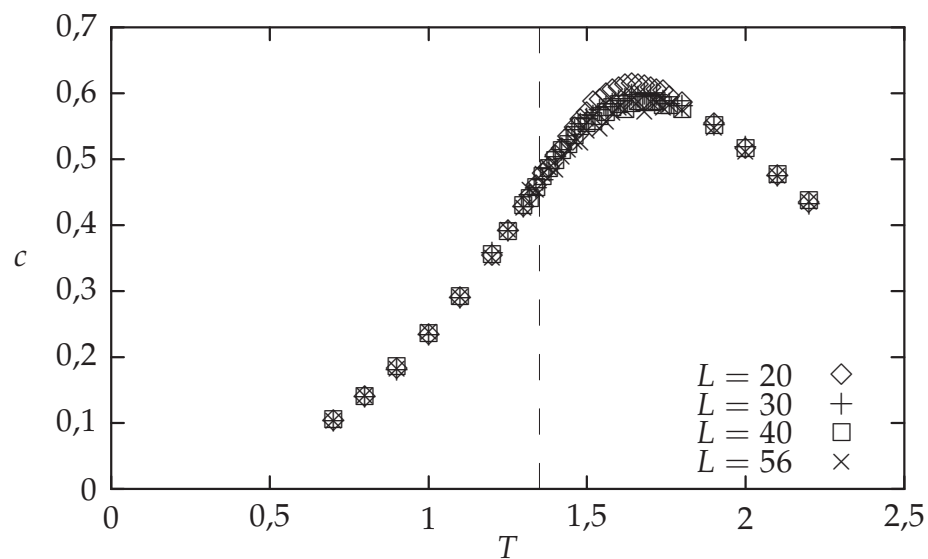


Abbildung 4.8: Systemgrößenabhängigkeit der spezifischen Wärme: Dargestellt sind Messungen an Systemen der Größen 20, 30, 40 und 56. Die gestrichelte Linie gibt die Lage von T_c an, die mit Hilfe von *Finite-Size-Scaling* in Abbildung 4.5 und Abbildung 4.6 bestimmt wurde.

skaliert wie die spezifische Wärme, daß im kritischen Bereich also gilt:

$$\frac{\partial M}{\partial T} \sim |T - T_c|^{-\alpha}. \quad (4.5)$$

Dies kann nun für eine *Finite-Size* Analyse herangezogen werden.

Allerdings zeigt eine solche Analyse, daß es, insbesondere bei dem Exponenten der spezifischen Wärme, möglich ist, durch verschiedene Annahmen verschiedene Ergebnisse zu erhalten. Bereits für ein zweidimensionales Ising-Modell, dessen Lösung exakt bekannt ist ($\alpha = 0$), können beliebige Werte von α zwischen $-0,3$ und $+0,3$ eingestellt werden, und zwar sogar mit Daten für einen größeren Bereich von Systemgrößen ($L = 8$ bis $L = 128$), die zusätzlich wesentlich weniger streuen und — da es sich ja nicht um ein ungeordnetes System handelt — auch nicht unter Einfrierproblemen leiden. Dargestellt ist dies in Abbildung 4.9, hier sind neben den Meßdaten drei alternative Skalenplots für die spezifische Wärme dargestellt. Die anderen Exponenten können jedoch mit hoher Genauigkeit bestimmt werden [63].

So überrascht es nicht, daß es im Fall des DAFF ebenfalls zu Problemen kommt. Die Rohdaten für die Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur sind in Abbildung 4.10 dargestellt. Bereits hier wird deutlich, daß die numerische Ableitung große Ungenauigkeiten verursacht. In den Abbildungen 4.11, 4.12 und 4.13 sind nun drei verschiedene Möglichkeiten abgebildet, die Daten mit einer *Finite-Size* Analyse auszuwerten. Wieder sind hier die Meßpunkte mit Linien verbunden, da die Beurteilung der Güte der Plots dann einfacher ist.

In Abbildung 4.11 ist ein positiver Wert von α angenommen worden, eine algebraische Divergenz der spezifische Wärme am Phasenübergang gemäß einem Potenzgesetz. Eingesetzt sind auch hier wieder die bereits bestimmte kritische Temperatur T_c und der Exponent ν , damit ergibt sich $\alpha = 0,3 \pm 0,2$.

Ist α negativ, divergiert die spezifische Wärme am Phasenübergang nicht, sondern konvergiert gegen einen Grenzwert, die bildet einen sogenannten *cusp* aus. In diesem Fall muß man von der zu analysierenden Größe, hier also der Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur, eine Konstante x_∞ , die den Wert des Maximums der betrachteten Größe im unendlichen System bezeichnet, abziehen und dann einen Datenkollaps erzeugen. Dies ist, zumindest im Rahmen der Fehler, die man angesichts der Qualität der Rohdaten erwarten kann, ebenfalls

4 Die spezifische Wärme

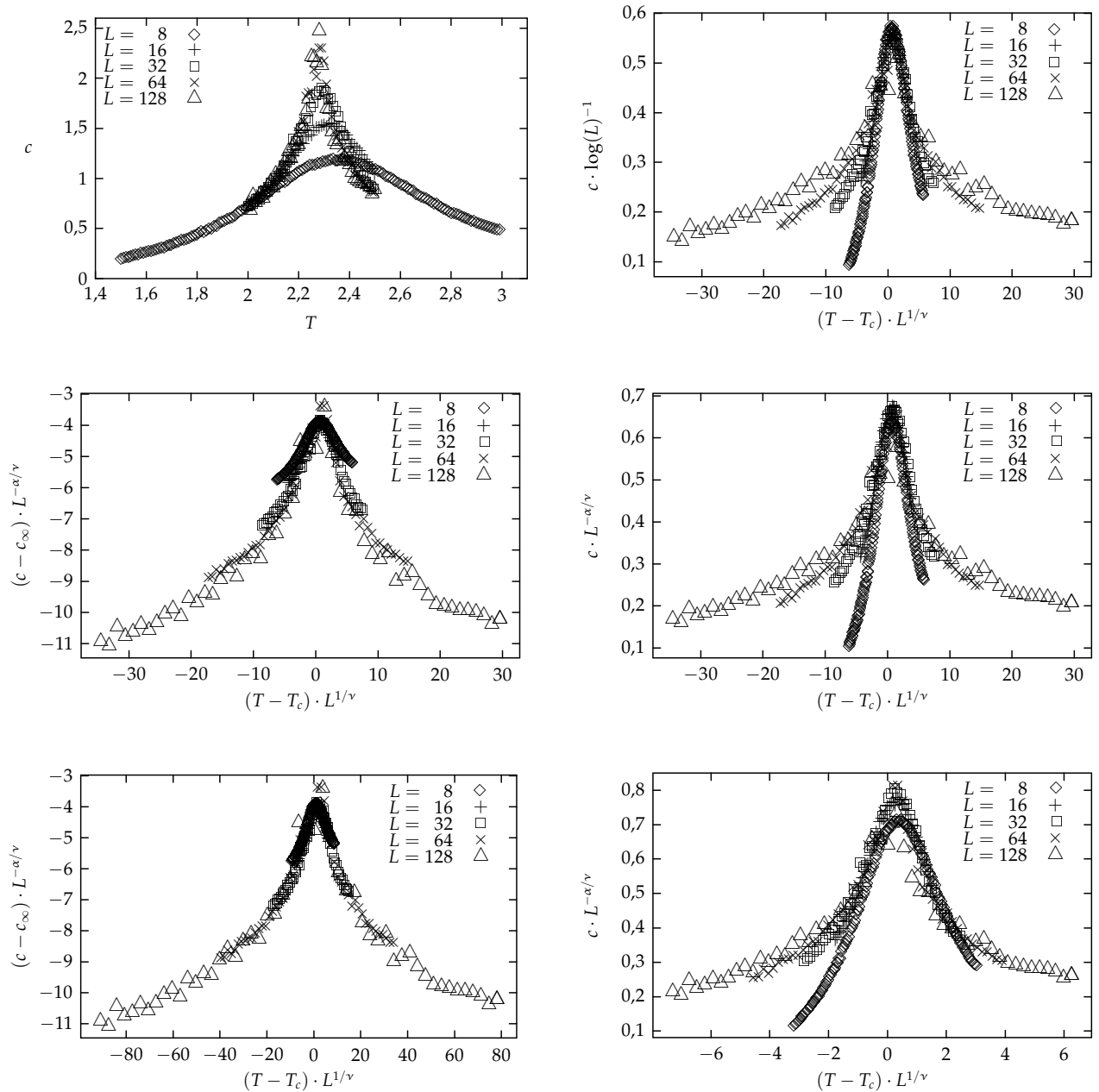


Abbildung 4.9: Die spezifische Wärme eines zweidimensionalen Ising-Modells, links oben die Rohdaten, daneben ein Skalenplot für $\alpha = 0$, der der exakten Lösung entspricht. In der zweiten Reihe Skalenplots mit $\alpha = -0,3$ und $\alpha = 0,3$, wobei hier der exakt bekannte Wert $\nu = 1$ eingesetzt ist. In den unteren Skalenplots wurde auch der Wert von ν optimiert, es ergibt sich links $\nu = 0,83$, $\alpha = 0,25$ und rechts $\nu = 1,5$, $\alpha = 0,38$. Die kritische Temperatur wurde in allen Plots auf den exakten Wert $T_c = 2,269$ gesetzt.

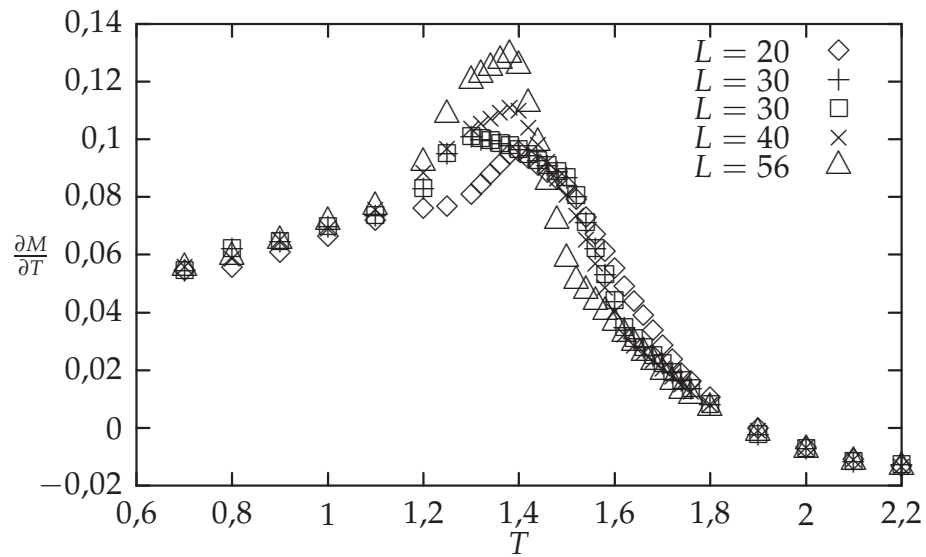


Abbildung 4.10: Rohdaten für $\partial M/\partial T$, die als Ausgangsdaten für die Skalenplots in den Abbildungen 4.11, 4.12 und 4.13 verwendet worden sind.

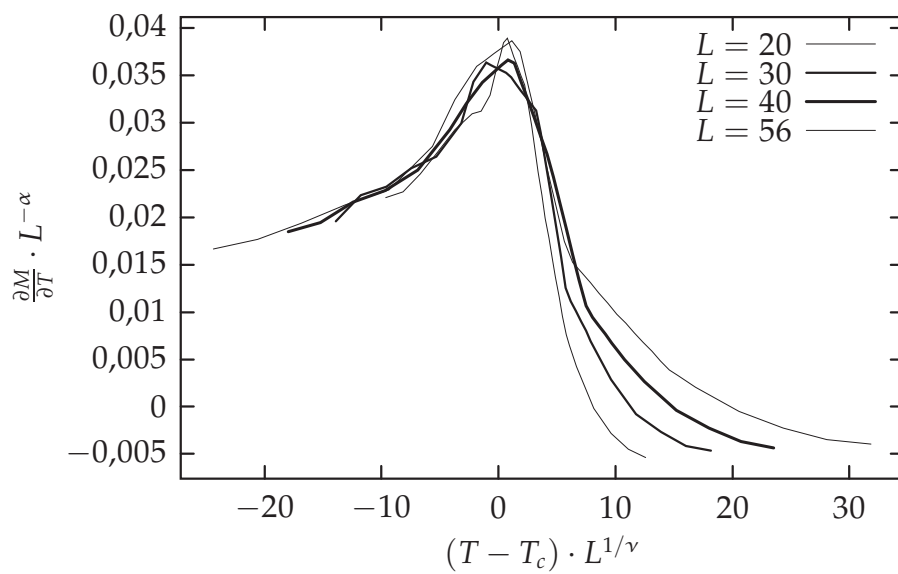


Abbildung 4.11: Skalenplot für $\partial M/\partial T$ mit $\alpha > 0$.

möglich, wie Abbildung 4.12 zeigt. Zu beachten ist, daß vor allem das Maximum aller Kurven übereinstimmen muß, denn dieses liegt bei T_c . Unter der Annahme, daß der Bereich, in dem die *Finite-Size-Scaling* Hypothese hier nur in einem kleinen Bereich gültig ist, kann man von einem Datenkollaps sprechen. Aufgrund des hohen Rauschens der Daten und der begrenzten Systemgröße ist α nur mit hoher Ungenauigkeit zu bestimmen, hier wurde $\alpha \approx 0,7$ eingestellt, aber mit anderen Werten von x_∞ ergeben sich auch andere Werte von α . Nimmt man dagegen eine

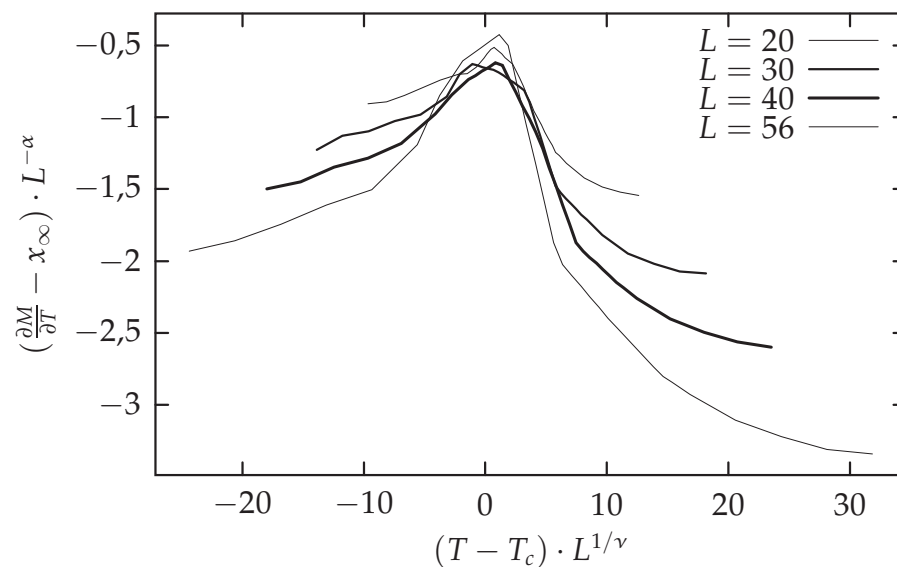


Abbildung 4.12: Ein Skalenplot zur Bestimmung des kritischen Verhaltens der spezifische Wärme mit $\alpha < 0$.

logarithmische Divergenz mit $\alpha = 0$ an, so ist es auch möglich, einen Datenkollaps zu erreichen, dies ist in Abbildung 4.13 gezeigt.

4.4 Diskussion des Gleichgewichtsverhalten

Die zentrale Frage, die zu klären ist, ist die Bestimmung der Universalitätsklasse von RFIM und DAFF. Tabelle 4.1 zeigt experimentell bestimmte Exponenten, analytische sowie numerische Ergebnisse, sowohl aus Monte Carlo-Simulationen als auch aus Auswertungen exakter Grundzustände. Wenn man alle Ergebnisse in Betracht zieht, so sieht es auf den ersten Blick so aus, als ob von Universalität

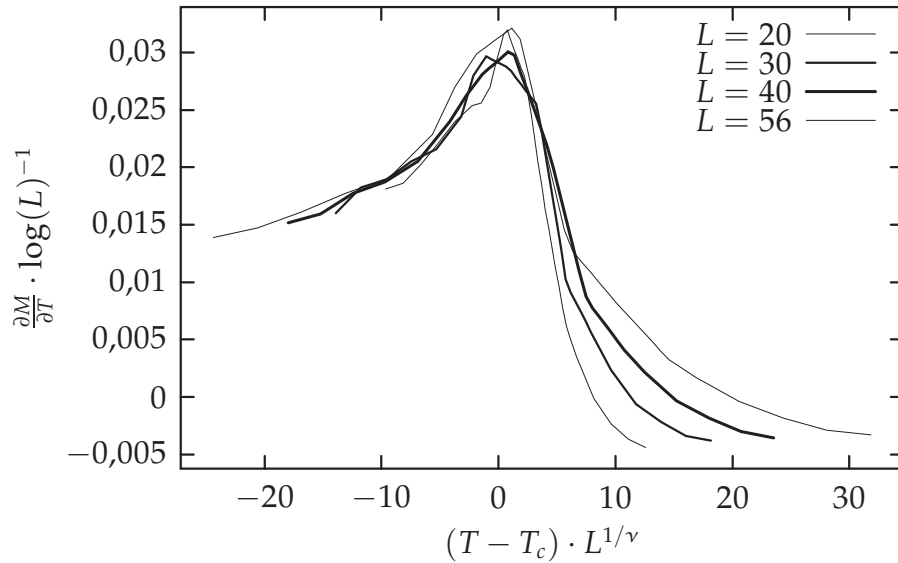


Abbildung 4.13: Falls $\alpha = 0$ ist, und eine logarithmische Divergenz der spezifische Wärme vorliegt, ist dies der richtige Skalenplot.

keine Rede sein kann. Läßt man allerdings die Werte für das RFIM mit bimodaler Verteilung der Zufallsfelder außer acht, so ergibt sich ein einheitlicheres Bild. Fast alle Ergebnisse für β , γ , $\bar{\gamma}$ sind dann im Rahmen der Fehlerbalken in Übereinstimmung, das gilt sowohl für am DAFF experimentell bestimmte Werte wie auch für die numerischen Ergebnisse zu DAFF und RFIM mit gaußverteilten Zufallsfeldern. Lediglich Messungen von Feng et al. [64] weichen ab, was aber durch eine andere Auswertungsmethode dieser Arbeitsgruppe erklärt werden kann, hier wurde angenommen, daß ein sog. „trompe l’oeil“ Effekt, der selbst nicht kritisch ist, das wahre kritische Verhalten modifiziert und dadurch T_c effektiv verschiebt, mit der Konsequenz anderer Exponenten. Diese etwas exotische Möglichkeit soll hier nicht weiter diskutiert werden.

Große Schwierigkeiten bereitet aber die Deutung des Exponenten α der spezifischen Wärme. Zum einen wurde in Tabelle 4.1 unterschieden nach einem Exponenten $\alpha_{T=0}$, der für $T = 0$ aus dem kritischen Verhalten der inneren Energie bestimmt wurde, und dem „wahren“ Exponenten α für $T > 0$. Nowak et al. konnten zeigen, daß im Limes $T \rightarrow 0$ das Skalenverhalten des RFIM modifiziert wird: Die Rushbrooke-Gleichung, die in ihrer Standardform $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ lautet, wird

durch $\alpha_{T=0} + 2\beta + \gamma = 1$ ersetzt [56]. Damit läßt sich hervorragend das Ergebnis von Ogielski $\alpha_{T=0} \approx 0,5$ erklären, das ansonsten nicht zu den übrigen Ergebnissen für $T = 0$ paßt. Ogielski hat α nicht direkt bestimmt, sondern die Gültigkeit der üblichen Skalenrelationen angenommen und dann α aus anderen Exponenten bestimmt; damit hat er den Wert von α für $T > 0$ erhalten. Aus der modifizierten Rushbrooke-Gleichung folgt $\alpha = \alpha_{T=0} + 1$, und damit sind die neueren Werte für $\alpha_{T=0}$ konsistent mit den älteren Daten von Ogielski. So ist auch der Eintrag Ogielskis Werts für α in der Spalte für $T > 0$ in Tabelle 4.1 zu lesen: Einerseits wurde er aus Daten für $T = 0$ bestimmt, andererseits wurde die Skalenrelation für $T > 0$ verwendet. Ebenfalls mit Hilfe von $\alpha = \alpha_{T=0} + 1$ wurden die Exponenten, die bei den neueren Arbeiten mit exakten Grundzuständen in die Tabelle 4.1 eingetragen wurden, bestimmt. Die Rushbrooke-Gleichung wurde dann noch herangezogen, um γ aus den in Kapitel 3 bestimmten Exponenten auszurechnen. Es zeigt sich, daß $\gamma = 1,5 \pm 0,2$ die Schwartz-Soffer Ungleichung [65] $2\gamma \leq \bar{\gamma}$ als Gleichung erfüllt, dies ist in Übereinstimmung mit der analytischen Lösung von Bray und Moore [55]. Zudem stimmt der Wert für γ mit den direkt gemessenen Werten für das RFIM mit gaußverteilten Zufallsfeldern und den experimentellen Daten überein.

Im Bereich der $T = 0$ Exponenten und den daraus mit Hilfe von Skalenrelationen berechneten Exponenten sind keine Widersprüche zu der Hypothese erkennbar, daß der DAFF in der gleichen Klasse wie das RFIM mit gaußverteilten Zufallsfelder ist. Für bei höheren Temperaturen direkt bestimmte Größen ist dies nicht der Fall. Monte Carlo-Simulationen von Rieger und Young [58, 59] liefern überraschenderweise ein negatives α in der gleichen Größenordnung wie $\alpha_{T=0}$, das (s. Anhang A.2.2) einen anderen Wert haben muß. In Kapitel 4.3 wurden Daten einer Monte Carlo-Simulation vorgestellt, die verschiedene Deutungen erlauben, je nach den Annahmen, die in die Auswertung eingehen. Es gibt Experimente, in denen negative Werte von α gemessen werden [57, 66], wenn auch für ein System mit wesentlich niedrigerer Anisotropie. Neuere Experimente dagegen deuten auf eine logarithmische Divergenz der spezifischen Wärme am Phasenübergang, $\delta\alpha \approx 0$ [67, 17]. Dabei wurden in diesen Experimenten schwach verdünnte Antiferromagnete untersucht, wodurch sichergestellt werden soll, daß Messungen im thermodynamischen Gleichgewicht durchgeführt werden können. Dies bringt jedoch den Nachteil mit sich, daß hohe Felder notwendig sind, um Crossover Ef-

fekte vom $B = 0$ zum $B \neq 0$ Verhalten zu vermeiden. Eine Beurteilung der verschiedenen Experimente und Simulationen fällt daher schwer, weswegen auf eine Wertung der experimentellen Situation hier ganz verzichtet werden soll.

Die Simulationsergebnisse von Rieger und Young sind sicher mit hohem numerischen Aufwand betrieben worden, mit wesentlich höherem als es für die in Kapitel 4.3 vorgestellten Daten möglich war. Trotzdem ist zu bedenken, daß lediglich kleine Systeme der Größen $L = 4$ bis $L = 16$ untersucht worden sind. Bei der Auswertung wurde ein negatives α vorausgesetzt. Die Tatsache, daß für ein zweidimensionales Ising Modell, für das die exakte Lösung $\alpha = 0$ bekannt ist, eine überzeugende *Finite-Size* Analyse von Monte Carlo-Daten solch kleiner Systeme für die spezifische Wärme auf große Schwierigkeiten stößt, läßt es möglich erscheinen, daß man unter anderen Voraussetzungen die Daten mit anderen Resultaten auswerten könnte. Desweiteren gehen Rieger und Young von einem Phasenübergang erster Ordnung auch im Fall von gaußverteilten Zufallsfeldern aus, was lediglich mit den Exponenten der Renormierungsgruppentheorie übereinstimmt, sonst aber inzwischen allgemein abgelehnt wird. Sie behaupten ebenfalls, daß das RFIM mit gaußverteilten Zufallsfeldern in die gleiche Universalitätsklasse wie das RFIM mit bimodaler Verteilung fällt, ein Ergebnis, das weder mit der Mean-Field Lösung des RFIM [4] noch älteren [51] und neueren Ergebnissen [56,29,30] anderer Autoren übereinstimmt.

Die Ergebnisse aus Kapitel 4.3 sind allerdings ähnlich kritisch zu bewerten. Denn für den DAFF scheint es völlig unmöglich, direkt das kritische Verhalten der spezifischen Wärme abzulesen, so daß zunächst eine Hilfsgröße, die Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur zu Hilfe genommen werden mußte. Die Qualität dieser Daten ist nicht als gut zu bewerten. Dennoch sollte beachtet werden, daß immerhin Systeme bis zur Größe $L = 56$ untersucht worden sind. Wie die Auswertung gezeigt hat, sind alle Möglichkeiten von $\alpha < 0$, $\alpha = 0$ bis $\alpha > 0$ denkbar. Insbesondere eine Unterscheidung zwischen einer logarithmischen Divergenz ($\alpha = 0$) und einer algebraischen Divergenz ($\alpha > 0$) dürfte auf Grund der begrenzten Systemgröße nicht möglich sein. Tendenziell sind allerdings — im Gegensatz zu den Ergebnissen von Rieger et al. — die Skalenplots, die eine Divergenz bevorzugen, als besser zu bezeichnen.

Noch einmal betont werden soll hier allerdings, daß die hier bestimmten Exponenten nicht als neue hochgenaue Messungen zu verstehen sind, die alte Messun-

gen obsolet machen, dazu bedürfte es wesentlich höheren numerischen Aufwand. Allerdings erfüllen die Exponenten ν , β und $\bar{\gamma}$ die modifizierte Hyperscaling Relation $d\nu = 2\beta + \bar{\gamma}$ [68, 55] im Rahmen der Fehlerbalken und sind damit als konsistente Ergebnisse anzusehen.

Das breite Maximum der spezifischen Wärme, das bei Temperaturen oberhalb von T_c liegt, scheint das kritische Verhalten der spezifischen Wärme zu unterdrücken, es verschwindet im Rauschen. Ein solches Maximum bei Temperaturen oberhalb von T_c ist nicht ungewöhnlich für verdünnte Systeme. Es rührt von endlichen Bereichen im System mit statistisch erhöhten Konzentrationen von magnetischen Momenten her, die dadurch lokal ein erhöhtes T_c zu haben scheinen. Kürzlich wurde von Selke et al. in einem zweidimensionalen verdünnten Ferromagneten dieser Effekt beobachtet, vor allem aber war es den Autoren möglich, das kritische Verhalten der spezifischen Wärme sichtbar zu machen [69]. Durch hohen numerischen Aufwand konnte ein kritischer Peak der spezifischen Wärme bei einem T_c , das unterhalb der Temperatur des Maximums der spezifischen Wärme liegt, gefunden werden. Es ist durchaus anzunehmen, daß ein ähnlicher Effekt im DAFF auftritt, wobei es hier ungleich aufwendiger ist, diesen zweifelsfrei zu messen. Wenn nun im folgenden das Nichtgleichgewichtsverhalten, also die Irreversibilitäten, im Vordergrund stehen, so sei schon an dieser Stelle auf die dort vorgestellte Abbildung 4.16 verwiesen, in der kleine Anomalien der spezifischen Wärme in der Gegend von T_c zu erkennen sind.

Abschließend läßt sich die Frage nach der Universalitätsklasse der in dieser Arbeit vorgestellten System nicht beantworten, die Frage nach dem Wert von α ist weiterhin offen. Allerdings läßt sich bereits ausschließen, daß der DAFF, das RFIM mit gaußverteilten und das RFIM mit bimodal verteilten Zufallsfeldern in *einer* Universalitätsklasse sind. Vielmehr ist es so, daß das RFIM mit bimodaler Verteilung der Zufallsfelder nicht in einer Universalitätsklasse mit den beiden anderen betrachteten Modellen ist. Nahegelegt hat dies bereits die erste Mean Field Lösung für das RFIM von Aharony [4]. Bestätigt wird dies durch die in Tabelle 4.1 dargestellten Exponenten sowie durch neueste Arbeiten von Sourlas [30] und Hartmann und Nowak [29]. Es ist sogar so, daß die Ordnung des Phasenübergangs eine andere ist, es handelt sich im Gegensatz zu den anderen Modellen um einen Phasenübergang erster Ordnung, was auch mit den Monte Carlo-Ergebnissen von Rieger und Young in Übereinstimmung ist, die $\beta = 0$ bestimmt

haben. Abgesehen von der großen Unsicherheit in α deutet aber alles darauf hin, daß der DAFF und das RFIM mit gaußverteilten Zufallsfeldern in der gleichen Universalitätsklasse sind.

4.5 Nichtgleichgewichtsverhalten

Nach der Diskussion des Verhaltens im thermischen Gleichgewicht soll nun auf das Nichtgleichgewichtsverhalten, also das Auftreten von Irreversibilitäten eingegangen werden. Denn gerade das Fehlen dieser in experimentellen Messungen (s. Abbildungen 4.1, 4.2 und Abbildung 4.3) war eine Hauptmotivation für die bereits zum Teil beschriebenen, zum Teil jetzt zu beschreibenden Simulationen.

Um eine möglichst realistische Simulation durchzuführen, öeine Simulation, die die Dynamik des Experiments möglichst gut beschreibt, wurde hier ein Single-Spin-Flip Algorithmus mit *heat bath* Flip-Wahrscheinlichkeiten ausgewählt. Der Update des Systems geschah dabei *random-sequential*, ödie Abfrage der Gitterplätze erfolgte in einer zufälligen Reihenfolge; es wurden keine Parallelupdates gemacht. Dies gilt als die beste Methode, mit Hilfe von Monte Carlo-Simulationen eine realistische Dynamik zu erreichen, siehe dazu auch Kapitel 5.

Da das Vorhandensein von Irreversibilitäten in der spezifischen Wärme untersucht werden soll, liegt es nahe, zunächst die innere Energie zu betrachten, deren Temperaturableitung die spezifische Wärme ist. Abbildung 4.14 zeigt die Meßwerte für die innere Energie U während eines *zfc-fc* Zyklus'. Gemittelt wurde hierbei für die Systemgrößen $L = 160$, $L = 100$, $L = 50$ und $L = 26$ über 5, 8, 84 bzw. 96 Systeme. Hier sind die Irreversibilitäten zwar vorhanden, aber relativ klein im Vergleich zu Abbildung 4.15, die den antiferromagnetischen Ordnungsparameter zeigt. Deutlich erkennbar sind hier wesentlich stärkere Irreversibilitäten, die zusätzlich noch eine Systemgrößenabhängigkeit aufweisen. Beim Kühlen wird der langreichweitig geordnete Zustand nicht mehr erreicht, sondern der Ordnungsparameter bleibt klein und geht im Grenzfall beliebig großer Systeme auf Null zurück. Die spezifische Wärme, berechnet als numerische Ableitung $\partial U/\partial T$, ist in Abbildung 4.16 abgebildet. Auch hier zeigen sich, wie nach dem Verhalten der inneren Energie zu erwarten war, geringe Irreversibilitäten.

ν	α	$\alpha_{T=0}$	β	γ	$\bar{\gamma}$	Quelle
Experimentell bestimmte Ergebnisse						
$1,0 \pm 0,15$	$0,00 \pm 0,03$			$1,75 \pm 0,20$		$\text{Fe}_{0,6}\text{Zn}_{0,4}\text{F}_2$, Belanger et al. (1985) [70]
$1,5 \pm 0,3$				$2,6 \pm 0,5$	$5,7 \pm 1,0$	$\text{Fe}_{0,5}\text{Zn}_{0,5}\text{F}_2$, Feng et al. (1995) [64]
	0					$\text{Fe}_{0,47}\text{Zn}_{0,53}\text{F}_2$, Klemann et al. (1996) [62]
$0,90 \pm 0,01$				$1,72 \pm 0,02$	$3,0 \pm 0,1$	$\text{Fe}_{0,93}\text{Zn}_{0,07}\text{F}_2$, Zlanič et al. (1997) [18]
$0,87 \pm 0,07$	≈ 0			$1,5 \pm 0,2$		$\text{Fe}_{0,93}\text{Zn}_{0,07}\text{F}_2$, Zlanič et al. (1998) [67,17]
Analytische und Numerische Ergebnisse für bimodal verteilte Zufallsfelder						
$1,0 \pm 0,1$	$(\approx 0,5)$		$\approx 0,05$		$2,9 \pm 0,3$	exakte Grundzustände, Ogielski (1986) [51]
$1,6 \pm 0,3$	$-1,0 \pm 0,3$		0	$2,3 \pm 0,3$	$4,8 \pm 0,9$	MC Sim., Rieger et al. (1993) [58]
$1,4 \pm 0,2$	$-1,5 \pm 0,3$		0	$2,0 \pm 0,3$	$4,1 \pm 0,8$	Rieger, s. o., andere Stärke der Zufallsfelder
$2,25 \pm 0,01$	$-1,39 \pm 0,02$		$0,02 \pm 0,0005$			Renormierungsgruppen-Theorie, Falicov et. al (1995) [71]
$1,67 \pm 0,11$			$0,0 \pm 0,02$		$5,0 \pm 0,4$	ex. Grundzustände, Hartmann et al. (1999) [29]
Analytische und numerische Ergebnisse für gaußverteilte Zufallsfelder						
1	$1/2$		0	$3/2$	3	Renormierungsgruppen-Theorie, Bray et al. (1985) [55]
$1,1 \pm 0,2$	$-0,5 \pm 0,2$		$0,0 \pm 0,05$	$1,7 \pm 0,2$	$3,3 \pm 0,6$	MC Sim., Rieger et al. (1995) [59]
$1,02 \pm 0,06$			$0,06 \pm 0,07$	$1,89 \pm 0,17$	$2,91 \pm 0,23$	MC Sim., Newman et al. (1996) [72]
$1,19 \pm 0,08$	$(0,45 \pm 0,2)$	$-0,55 \pm 0,2$	$0,02 \pm 0,01$	$1,5 \pm 0,2$	$3,5 \pm 0,5$	ex. Grundzustände + MC Sim, Hartmann, Nowak et al. [29,56]
Numerische Ergebnisse für den DAFF						
$1,14 \pm 0,10$			$0,02 \pm 0,01$		$3,4 \pm 0,4$	ex. Grundzustände, Hartmann et al. (1999) [29]
$1,1 \pm 0,1$	$(0,5 \pm 0,2)$	$-0,5 \pm 0,2$	$0,02 \pm 0,01$	$(1,5 \pm 0,2)$	$3,4 \pm 0,4$	ex. Grundzustände + MC Sim., Kapitel 3, [52]
$1,09 \pm 0,05$	s. Text		$0,15 \pm 0,05$		$2,9 \pm 0,3$	MC Sim., Kapitel 4.3, [73]

Tabelle 4.1: Exponenten im Vergleich. Die Werte in Klammern sind nicht direkt, sondern über Skalenrelationen bestimmt worden.

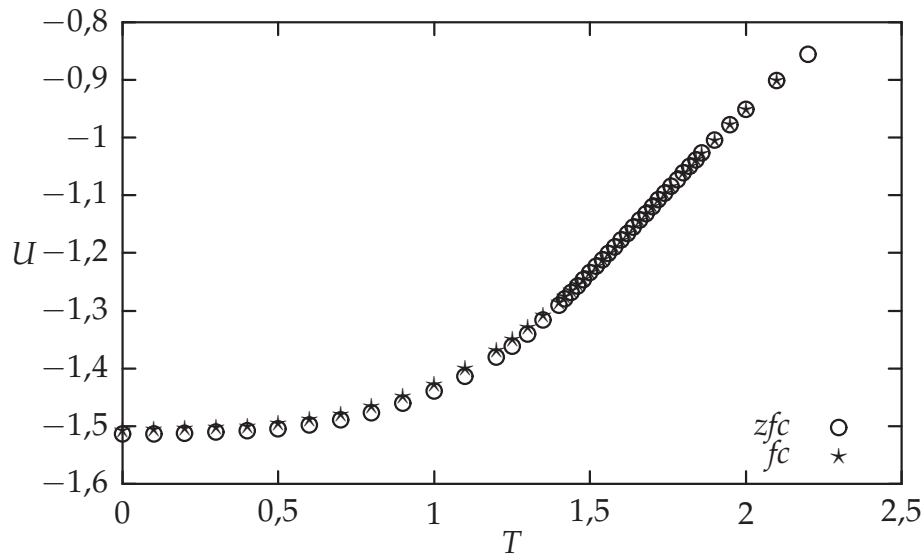


Abbildung 4.14: Die innere Energie U in einem zfc - fc Zyklus.

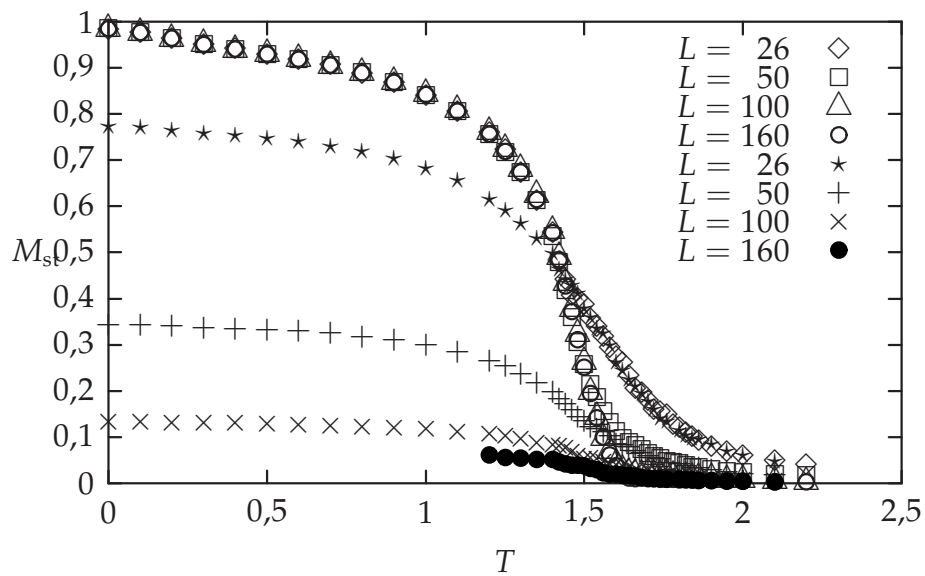


Abbildung 4.15: Der antiferromagnetische Ordnungsparameter M_{st} in einem zfc - fc Zyklus für verschiedene Systemgrößen. Die offenen Symbole beschreiben das Erhitzen (zfc), die anderen das Kühlen (fc). Die Simulation für die größten Systeme ($L = 160$) wurde beim Kühlen bei ca. $T = 1,2$ vorzeitig beendet, da ein Weiterrechnen nicht sinnvoll erschien.

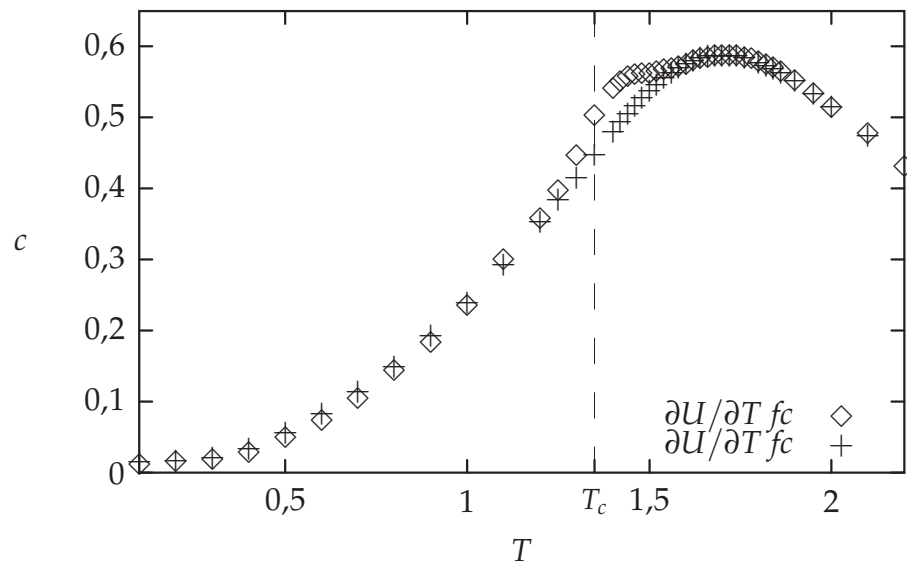


Abbildung 4.16: Die spezifische Wärme c in einem zfc - fc Zyklus. Die unterbrochene Linie markiert $T_c = 1,35$.

4.6 Diskussion des Nichtgleichgewichtsverhalten

Beim Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentell bestimmten Daten gibt es mehrere Dinge zu beachten. Wie bereits erwähnt, entspricht das äußere Feld in den Simulationen den höchsten in den Experimenten erreichten Feldern. Dies ist insbesondere bei (im Vergleich zum Experiment) kleinen Systemen notwendig, um Crossover Effekte vom $B = 0$ Verhalten zu vermeiden. Auch die experimentellen Ergebnisse müssen genauer klassifiziert werden. So sind die Messungen von Satooka et al. [21] als auch von Birgeneau [19] an relativ stark verdünnten Systemen durchgeführt worden (25 bis 50-prozentige Verdünnung), während Zlanič und Belanger an einem relativ hochkonzentrierten System mit nur 7-prozentiger Verdünnung gemessen haben. Man würde daher erwarten, daß, wenn Irreversibilitäten auftreten, sie vor allem bei den Systemen mit stärkerer Unordnung zu beobachten sind und nicht bei Systemen mit geringerer Unordnung. So gehen Zlanič et al. in einer anderen Arbeit [67] davon aus, bei dem gleichen System Gleichgewichtsmessungen sowohl bei zfc als auch fc durchgeführt zu haben. Daher überrascht es, daß genau das Gegenteil der Fall ist: Keine Hysterese findet sich in zfc - fc Zyklen in den stärker verdünnten Systemen, eine, wenn auch

sehr geringe, Hysterese jedoch in dem weniger stark verdünnten System. Dieser Widerspruch klärt sich etwas auf, wenn die Temperaturauflösung der verschiedenen Experimente vergleicht: So finden Zlanič und Belanger geringe Unterschiede zwischen zfc und fc Daten in einem Temperaturbereich von 70,4 K bis 70,8 K. In diesen Bereich fallen ca. 8 Meßpunkte, das entspricht 20 Meßpunkten pro Kelvin, während Satooka et al. nur eine Auflösung von ca. 3,5 Meßpunkten pro Kelvin erreichen, Birgeneau ca. 5 Meßpunkte pro Kelvin. So ist es durchaus denkbar, daß bei den letzten Messungen kleine Hystereseeffekte nicht aufgelöst werden konnten.

Die Simulationen zeigen ebenfalls, daß eine Hysterese auftritt. Dies ist bereits an der inneren Energie in Abbildung 4.14 zu erkennen. Durch die, wie gewohnt, auftretenden Irreversibilitäten befindet sich das System nach Heizen und anschließendem Kühlen nicht mehr im Grundzustand. Daher hat sich auch die innere Energie bei $T = 0$ geändert, die Abhängigkeit der inneren Energie von der Temperatur ist also nicht reversibel. Daraus folgt sofort, daß auch die Ableitung der inneren Energie, die spezifische Wärme, Irreversibilitäten aufweisen muß. Dieses Verhalten entspricht dem erwarteten, daher sind ja die zitierten Arbeiten, die keine Irreversibilitäten finden, so überraschend. Diese Ergebnisse können trotzdem mit den Simulationsergebnissen in Übereinstimmung gebracht werden können. Denn wie in den Abbildungen 4.14 und 4.15 zu sehen ist, sind die Irreversibilitäten in der inneren Energie und der spezifischen Wärme sehr klein. Im Grunde genommen ist dies zu erwarten. Denn sowohl im Experiment als auch in der Simulation wird die freie Energie F des Systems im thermischen Gleichgewicht minimal. Auch wenn durch Einfriereffekte die freie Energie nicht den Wert ihres absoluten Minimums annimmt, wird sie dennoch nicht etwa beliebige, stark über dem Minimum liegende Werte annehmen. Bei $T = 0$ ist die freie Energie F gleich der inneren Energie U , die in Abbildung 4.14 abgebildet ist. Wie man erkennt, ist der Wert der freien Energie vor dem Heizen nur unwesentlich niedriger als nach dem Kühlen. Dies ist jedoch eine Ausnahme.

Man darf daher nicht den falschen Schluß ziehen, daß das Fehlen bzw. das kaum meßbare Auftreten von Irreversibilitäten das Verschwinden von Nichtgleichgewichtseffekten aller Art bedeutet. So ist in Abbildung 4.15 deutlich zu erkennen, daß der antiferromagnetische Ordnungsparameter M_{st} beim Kühlen nicht wieder ansteigt, sondern im Grenzfall großer Systeme bei Null bleibt, der

Phasenübergang also unterdrückt wird. Satooka et al. argumentieren, daß beim Kühlen im Feld zunächst der Phasenübergang auftritt, also auch beim Kühlen Gleichgewichtsverhalten beobachtet werden kann [21]. Später soll dann bei tiefen Temperaturen das System in die bekannten Domänen zerfallen. Diese, auch intuitiv eher unphysikalische, Interpretation steht im Gegensatz zu den hier durchgeführten Messungen, die belegen, daß beim Kühlen die langreichweitig antiferromagnetisch geordnete Phase nicht erreicht wird. Möglicherweise ist dies bei gering verdünnten Systemen, die von Zlanič und Belanger neuerdings untersucht werden, anders. Jedoch besteht auch im Experiment das Problem, daß das Crossover Verhalten von unverdünnten System die Messung beeinflusst. Für eine Simulation eignen sich solche Systeme nur wenig, denn um eine charakteristische Verteilung von Spinclustern und Clustern von unmagnetischen Plätzen zu erhalten, muß man bei dieser geringen Verdünnung sehr große Systeme untersuchen.

5 Relaxationsverhalten verdünnter Antiferromagnete

Während in den vorangegangenen Kapiteln der Schwerpunkt auf Gleichgewichtseigenschaften gelegt wurde, soll nun das Verhalten verdünnter Antiferromagnete im Nichtgleichgewicht untersucht werden. Von Interesse ist hier das dynamische Verhalten, mit dem das System sich dem Gleichgewicht nähert. Während die langsame Dynamik bei Gleichgewichtsuntersuchungen das Problem darstellt, soll diese Dynamik selbst nun zum Untersuchungsgegenstand werden. Die numerischen Probleme und Vorgehensweisen, die bei dynamischen Untersuchungen wichtig sind, unterscheiden sich von denen bei Gleichgewichtsuntersuchungen. Während man dort durch geeignete Wahl der Anfangsbedingungen wie exakte Grundzustände (vgl. Kapitel 3), effiziente Algorithmen (vgl. Kapitel 4) und möglichst viele Simulationsschritte dafür sorgt, daß Messungen möglichst im thermodynamischen Gleichgewicht durchgeführt werden, geht man bei Untersuchungen der Dynamik anders vor: Die Systeme werden mit Nichtgleichgewichtszuständen initialisiert, man verwendet Algorithmen, die der experimentellen Situation am gerechtesten werden. Da man ein System über lange Zeitskalen beobachten muß, um zwischen vorgeschlagenen analytischen Formen eines Zerfallsgesetztes zu unterscheiden, ergibt sich auch hier ein hoher Bedarf an Rechenleistung.

Die Dynamik reiner Systeme (also ohne Verdünnung, Zufallsfelder, ...) ist wesentlich besser verstanden als es bei ungeordneten Systemen der Fall ist. Initialisiert man ein solches System in einem ungeordneten Zustand und kühlt dieses schnell auf eine Temperatur unterhalb von T_c ab, so ist das Wachstum der Ordnung, also z. B. der Magnetisierung, durch eine Längenskala $L(t)$, etwa die Domänengröße, charakterisiert. Diese Längenskala wächst mit der Wurzel aus der Zeit an. Dies gilt für jede Raumdimension [74].

Anders ist dies bei ungeordneten Systemen. In diesen Systemen gibt es im

gesamten Phasenraum wesentlich mehr lokale Minima als bei reinen Systemen. Zwischen diesen Minima liegen Energiebarrieren, die überwunden werden müssen, um das System von einem Minimum in ein „benachbartes“, tiefer liegendes Minimum zu bringen. Ein allgemeiner Ansatz, der die Zeit t beschreibt, die ein System braucht, um eine Energiebarriere der Höhe δE bei einer Temperatur T zu überwinden, ist die sog. thermische Aktivierung nach dem Arrhenius Gesetz,

$$t = \tau \exp\left(\frac{\delta E}{T}\right), \quad (5.1)$$

wobei τ eine mikroskopische Zeitskala des betrachteten Systems festlegt, also z. B. die Zeit, die benötigt wird, um einen Spin umzudrehen.

In analytischen Arbeiten liegt der Schwerpunkt der Untersuchungen im allgemeinen auf der Berechnung einer charakteristischen Länge $L(t)$ eines Systems. Es ist jedoch nicht sofort einsichtig, wie physikalische Größen, wie etwa die Magnetisierung eines Systems, damit in Verbindung gebracht werden können. Gerade in verdünnten Antiferromagneten ist dies schwierig, da die Domänen im System fraktale Struktur haben und Domänen jeder Längenskala existieren.

Da in Experimenten normalerweise Größen wie die Magnetisierung gemessen werden, wird im folgenden im Rahmen von Simulationen auch Wert auf diese physikalische Größe gelegt, um die Vergleichbarkeit mit Experimenten zu gewährleisten.

5.1 Simulationen zum Relaxationsverhalten nach Ausschalten eines Magnetfeldes

Im Rahmen der hier vorgestellten Untersuchungen wurden sowohl zwei- als auch dreidimensionale verdünnte Antiferromagnete betrachtet. Zweidimensionale verdünnte Antiferromagnete haben in äußeren Magnetfeldern $B \neq 0$ keine langreichweitig geordnete Phase, nur für $B = 0$ ist dies der Fall. Die Hamiltonfunktion ist durch Gleichung 2.1 gegeben. Da in zweidimensionalen Systemen die Perkolationsgrenze bei geringeren Verdünnungen als bei den bisher schwerpunktmäßig betrachteten dreidimensionalen Systemen erreicht wird, werden hier Verdünnungen im Bereich $p = 0,15$ bis $p = 0,35$ betrachtet. Die Perkolationsgren-

ze liegt bei $p = 0,41$ [35]. Die Systemgröße wurde hier auf $L = 400$ festgelegt, des gibt 400×400 Gitterplätze.

Ising Systeme haben keine intrinsische Dynamik, wie sie etwa das quantenmechanische Heisenberg Modell hat. Die Dynamik entsteht durch die Ankopplung des Systems an ein Wärmebad. Die Glauber Dynamik [75] (Single-Spin-Flip-Dynamik mit den *heat bath*-Flipwahrscheinlichkeiten) in Verbindung mit einem *random-sequential* Auswahlalgorithmus für die Gitterplätze, an denen ein Spin entsprechend der *heat bath* Wahrscheinlichkeit gedreht wird, gilt als realistische Beschreibung der Dynamik experimenteller Systeme [76]. Gemessen wird die Simulationszeit in *Monte Carlo-Sweeps* (MCS), nach einem MCS ist im Mittel jeder Spin einmal abgefragt worden.

Die Simulation wird nun folgendermaßen durchgeführt: Das System wird zunächst in einem völlig ungeordneten Zustand, der einer unendlich hohen Temperatur entspricht, initialisiert. Dann wird bei einer Temperatur unterhalb von $T_c(B = 0)$ und einem eingeschalteten Magnetfeld $B > 0$ so lange simuliert, bis sich die Magnetisierung des Systems nicht mehr wesentlich ändert. Der dann erreichte Zustand entspricht wegen der langsamen Dynamik nicht dem Gleichgewichtszustand. Dies ist jedoch für die Untersuchung der Relaxationsdynamik nicht entscheidend. Wichtig ist, daß sich das System in einem „typischen“ Domänenzustand befindet (siehe dazu auch die Abbildung 5.2). Dann wird das äußere Magnetfeld abgeschaltet und die Magnetisierung in Abhängigkeit von der Zeit gemessen. Im Grenzfall großer Zeiten wird die Magnetisierung auf Null zurückgehen und der antiferromagnetische Ordnungsparameter wird wachsen, da ohne äußeres Feld auch zweidimensionale Systeme langreichweitig ordnen. Innerhalb der Simulationszeit wird man diesen Zustand jedoch nicht erreichen. Das System bleibt in einem Domänenzustand eingefroren, der zwar eine sehr kleine Magnetisierung aber keine langreichweitige antiferromagnetische Ordnung hat. In Abbildung 5.1 ist exemplarisch für ein System mit $p = 0,2$ nach dem Ausschalten des Feldes von $B = 2,0$ die Magnetisierung abhängig von der Zeit doppelt logarithmisch dargestellt.

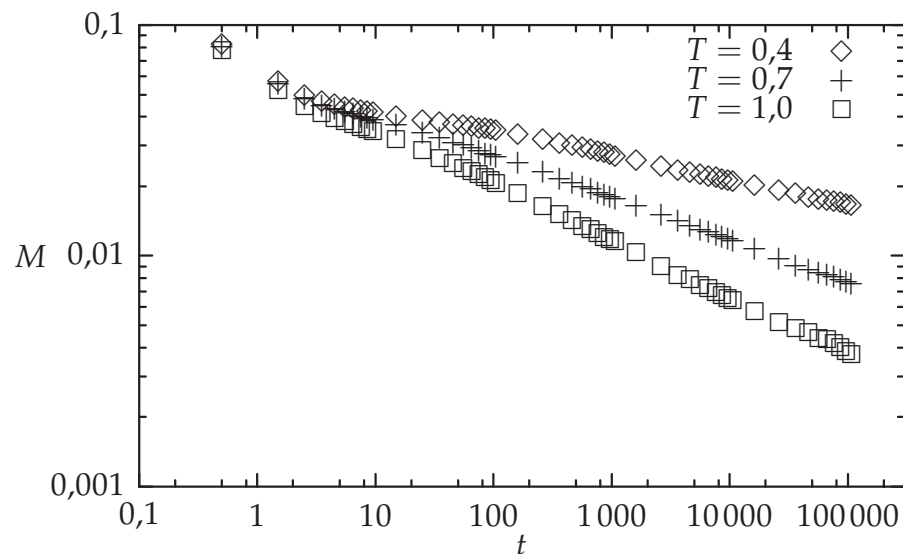


Abbildung 5.1: Magnetisierung von 400×400 großen Systemen, aufgetragen über der Zeit nach Ausschalten des Feldes für drei verschiedene Temperaturen, gemittelt über 20 Systeme.

5.2 Analyse der Meßdaten

5.2.1 Vorüberlegungen

Zur Analyse der Meßdaten soll nun dargestellt werden, welche analytische Form für die Kurve $M(t)$ erwartet werden kann. Nowak et. al. haben für eine ähnliche Situation eine Formel für den antiferromagnetischen Ordnungsparameter hergeleitet [47]:

$$\Delta M(t) \sim e^{-b(T \ln(t/\tau))^y}. \quad (5.2)$$

In dieser Arbeit wurden ebenfalls zweidimensionale verdünnte Antiferromagnete untersucht. Diese wurden in einem langreichweitig geordneten Zustand initialisiert und nach Einschalten eines äußeren Feldes wurde der Zerfall des antiferromagnetischen Ordnungsparameters mit der Zeit beobachtet. Grafische Darstellungen des Systems legten eine Analyse der zeitabhängigen Verteilungsfunktion der Domänen nah, dies führte zu einem Ansatz, der den Zerfall des Ordnungsparameters durch Domänenbildung erklärt. Dabei wird die Änderung des Ordnungsparameters als Summe bzw. Integral über alle bis zu einem Zeitpunkt t ge-

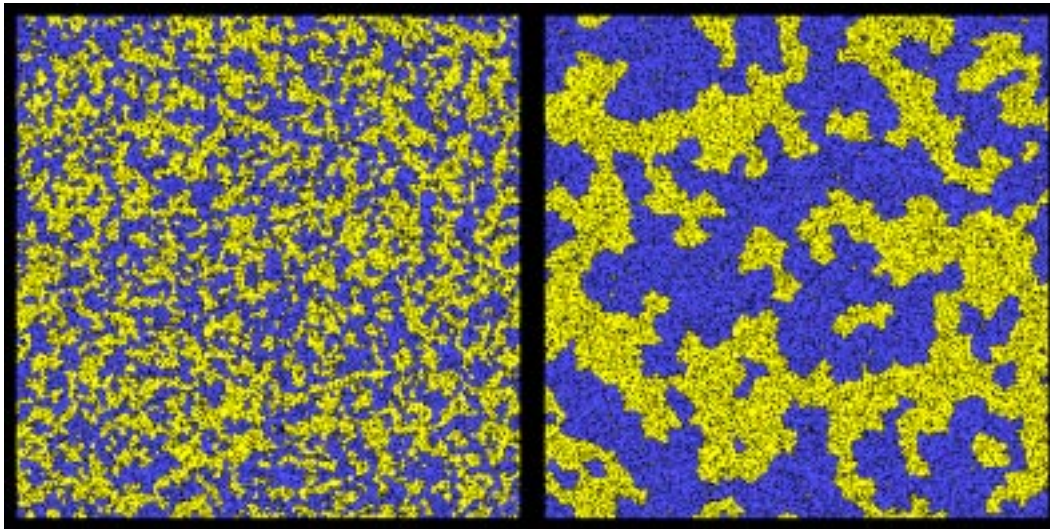


Abbildung 5.2: Domänenkonfiguration direkt nach Ausschalten des Magnetfeldes (links) und ca. 130000 MCS später (rechts). Die gelben Quadrate bezeichnen Spins einer antiferromagnetischen Phase, etwa die mit positiver *staggered* Magnetisierung, die blauen die Spins der anderen Phase. Die Leerstellen sind schwarz dargestellt. Gezeigt ist ein System der Größe 400×400 und der Verdünnung $p = 0,25$.

schehenen Änderungen durch Domänenbildung beschrieben. Unter der Annahme thermischer Aktivierung (vgl. Gl. 5.1) als Bildungsmechanismus für die Domänen kann man eine Gesetzmäßigkeit für den Zerfall des Ordnungsparameters herleiten. Dabei zeigte sich, daß sich zunächst kleine Domänen bilden, die dann im Laufe der Zeit wachsen, während parallel weiter immer neue kleine Domänen entstehen. Die Summe all dieser Änderungen beschreibt die Änderung physikalischer Größen. Die Funktion, gemäß der sich die Magnetisierung im Laufe der Zeit für den betrachteten Fall ändert, ist das verallgemeinertes Potenzgesetz 5.2.

Die Übertragung auf das hier betrachtete Problem ist allerdings nicht direkt möglich. Bevor das Feld ausgeschaltet wird, befindet sich das System in einem Dömanenzustand. Dieser ist in Abbildung 5.2 im linken Teil dargestellt. Aufgrund der Einfriereffekte wird das System während der Beobachtungszeit nicht den langreichweitig geordneten Zustand erreichen, sondern ebenfalls in einem Domänenzustand mit zwar sehr geringer Magnetisierung, aber kaum von Null verschiedenem Ordnungsparameter verbleiben, dieser ist im rechten Teil von Abbildung 5.2 zu sehen. Daher ist eine direkte Übertragung der Herleitung aus [47]

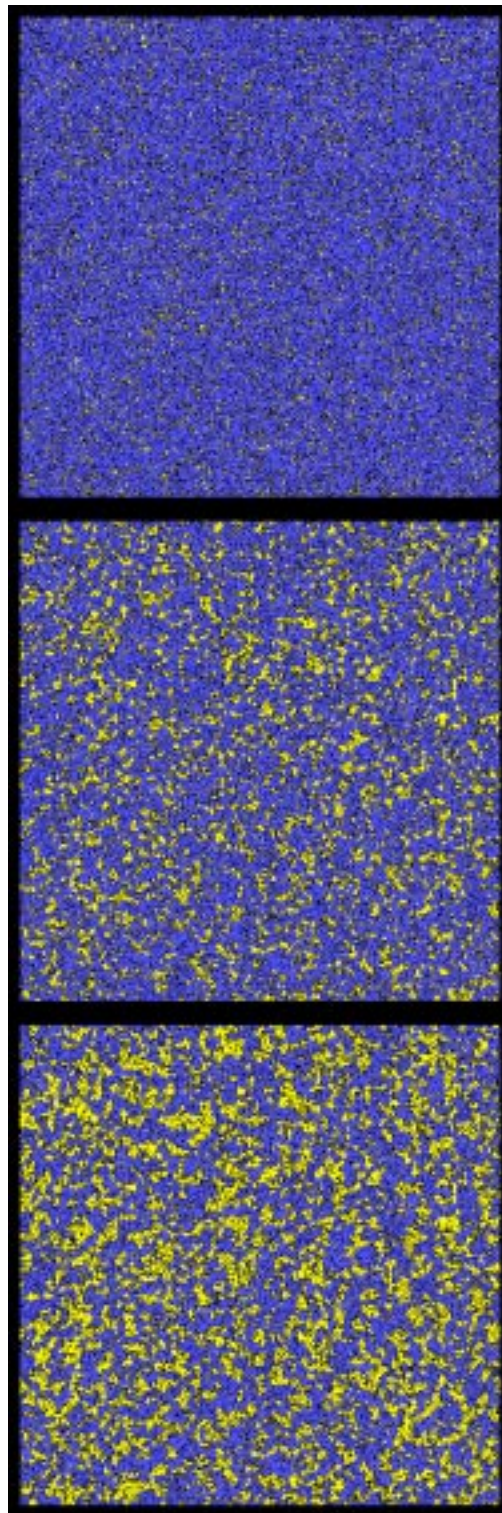


Abbildung 5.3: Änderungen im System nach Ausschalten des Feldes: In blau sind die Spins dargestellt, die sich nach Ausschalten des Feldes nicht geändert haben, in gelb die Spins, die gekippt sind. Von oben nach unten ist das System nach 4, 1024 bzw. ca. 130 000 MCS nach dem Ausschalten des Feldes dargestellt. Das System ist 400×400 groß, die Verdünnung beträgt $p = 0,25$.

zunächst fragwürdig, obwohl die Vermutung naheliegt, daß die gleichen Mechanismen, öDomänenbildung bzw. Domänenrückbildung durch thermische Aktivierung, zugrunde liegen. Klar wird dies in Abbildung 5.3. Hier ist nicht die eigentliche Domänenkonfiguration dargestellt, sondern die Entwicklung, des Systems während der Relaxation im Vergleich zu seinem Ausgangszustand bei $t = 0$. Die Spins, die sich im Laufe der Relaxation nicht geändert haben, sind in blau dargestellt, diejenigen, die sich vom Ausgangszustand unterscheiden, in gelb. Man kann deutlich erkennen, daß zunächst kleine Domänen, im Laufe der Zeit dann auch größere Domänen entstehen, genau wie beim Zerfalls des antiferromagnetischen Ordnungsparameter nach Einschalten des Feldes. Diese Entwicklung ist völlig analog zu der Ref. [47] gezeigten. Deshalb ist es plausibel, auch die Analyse der hier gemessenen Daten mit Hilfe von Gleichung 5.2 durchzuführen.

5.2.2 Skalierung der Daten und Bestimmung des Relaxationsverhaltens

Die eigentliche Analyse der Daten wurde in zwei Schritten durchgeführt. Zunächst soll verifiziert werden, daß der zugrunde liegende Relaxationsmechanismus durch thermische Aktivierung bestimmt wird. Dazu werden zunächst bei einer festen Verdünnung p und festem äußeren Feld B die Daten für verschiedene Temperaturen untersucht. Wenn thermische Aktivierung gemäß Gleichung 5.1 der Antrieb für den Rückgang der Magnetisierung ist, so ist die Temperatur- und Zeitabhängigkeit der Meßgrößen universell in dem Sinne, daß die Daten für verschiedene Temperaturen zusammenfallen, wenn die Zeitskala entsprechend reskaliert wird. Die Größe $T \ln(t/\tau)$ ist eine „SkalenvARIABLE“ in diesem Sinn. Abbildung 5.4 zeigt, daß die Skalierung der Zeitachse einen sehr guten Datenkollaps für die Temperaturen $T = 0,4$, $T = 0,7$ und $T = 1,0$ ergibt, wenn man die mikroskopische Zeitskala $\tau = 1,8$ setzt. Es ist wichtig, hier festzuhalten, daß τ bestimmt werden kann, ohne Annahmen über die Form des Zerfallsgesetzes zu machen. Diese Analyse kann für verschiedene Verdünnungen durchgeführt werden.

In einem zweiten Schritt werden nun die Konstanten y und b aus Gleichung 5.2 so bestimmt, daß sich eine möglichst geringe Abweichung der Meßpunkte von dem verallgemeinerten Potenzgesetz Gleichung 5.2 ergibt. Die Ergebnisse für die Konstanten aus Gleichung 5.2 sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt.

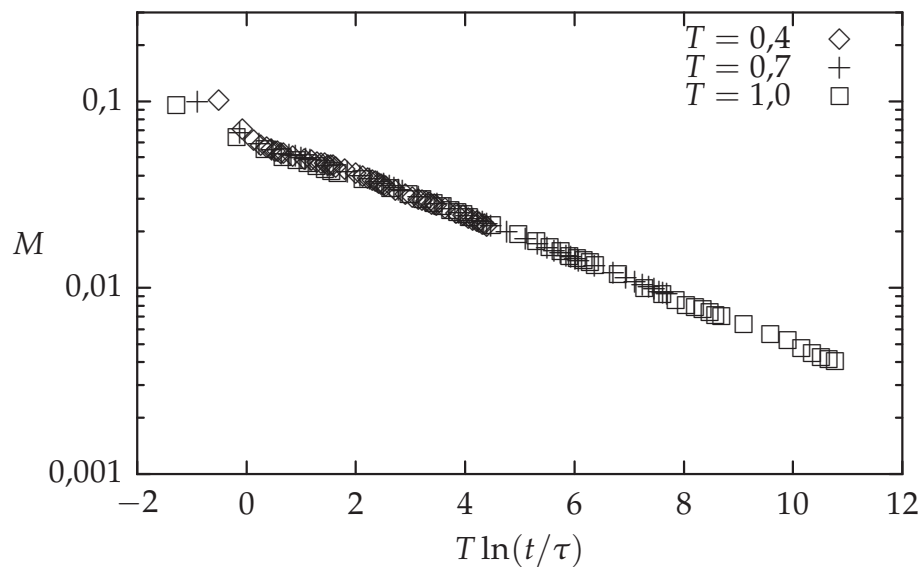


Abbildung 5.4: Die Magnetisierung über der skalierten Zeit $T \ln(t/\tau)$ für Systeme der Größe 400×400 mit der Verdünnung $p = 0,25$, gemittelt über 20 Systeme.

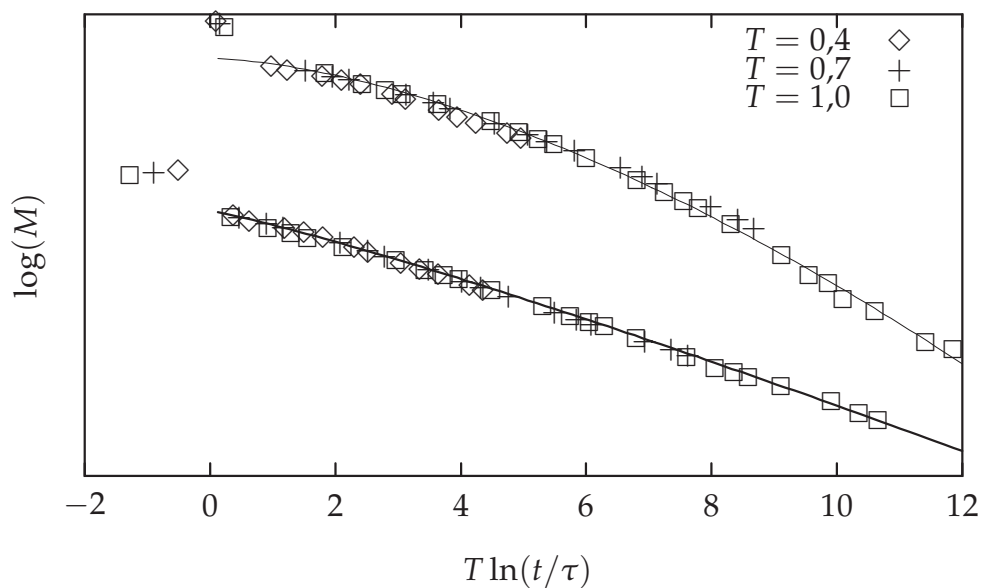


Abbildung 5.5: Funktionale Abhängigkeit der Magnetisierung von der skalierten Zeit. Dargestellt sind Ergebnisse für Systeme der Größe 400×400 mit Verdünnungen $p = 0,35$ (obere Kurve) und $p = 0,25$ (untere Kurve). Die Daten für $p = 0,25$ sind nach unten verschoben, um sie von der anderen Kurve zu trennen. Die Linien wurden gemäß Gleichung 5.2 durch die Datenpunkte gelegt.

d	p	y	τ
2	0,15	≈ 1	5
2	0,2	≈ 1	3
2	0,25	1,15	1,8
2	0,3	1,3	1
2	0,35	1,5	0,4
3	0,5	1,2	1,2

Tabelle 5.1: Ergebnisse für die Konstanten in Gleichung 5.2 für $d = 2$ und $d = 3$

5.3 Diskussion der Ergebnisse

Die langsame, nicht exponentielle Dynamik verdünnter Antiferromagnete, die Simulationen und Experimente im Gleichgewicht stark erschwert, wurde in zwei Schritten analysiert. Dabei wurde zunächst gezeigt, daß der für die Relaxation verantwortliche Mechanismus durch thermische Aktivierung getrieben wird. Daten für verschiedene Temperaturen lassen sich zur Deckung bringen, wenn man die Zeit entsprechend Gleichung 5.1 reskaliert. In einem zweiten Schritt konnte die analytische Form der Abhängigkeit der Magnetisierung von der Zeit gemäß Gleichung 5.2 verifiziert werden und die Konstanten des verallgemeinerten Potenzgesetzes bestimmt werden. Hierbei zeigt sich, daß Gleichung 5.2 sowohl in zwei, als auch in drei Raumdimensionen eine korrekte Beschreibung der Daten ermöglicht. Es zeigt sich, daß die Konstanten y und τ von der Verdünnung p des Systems abhängen. Im Falle der Konstanten τ ist dies nicht überraschend, man erwartet für eine Konstante, die das qualitative Verhalten der Funktion nicht ändert, sondern lediglich einen Faktor in der Skalierung der Zeit ausmacht, nicht notwendigerweise universelles Verhalten. Die p -Abhängigkeit des Exponenten y kann im Gegensatz dazu nicht unbedingt als nicht-universelles Verhalten angesehen werden. Ursache für die beobachtete Nichtuniversalität könnten Crossover Effekte sein, sowohl vom reinen System $p = 0$ als auch von der Perkolationsgrenze $p = p_c = 0,41$, ab der sich mit Sicherheit die Dynamik des Systems ändern wird, da keine langreichweitige Ordnung im System mehr entstehen kann. Dadurch wird ein universeller Exponent y , der die Dynamik charakterisiert, schwer zu bestimmen.

Betont werden soll hier noch einmal der Nutzen von grafischen Darstellungen des Systems. Abbildung 5.3 ist notwendig, um die Übertragbarkeit von Gleichung 5.2 auf das hier untersuchte Problem zu zeigen. Auch in der Vergangenheit haben grafische Darstellungen viel zur Einsicht in die Problematik verdünnter Antiferromagnete und verwandter Systeme beigetragen [24,26,7]. Die fraktale Struktur der Domänen, die z. B. in Abbildung 5.3 gut erkennbar ist, hat großen Einfluß auf die Dynamik dieser Systeme. Bei der Herleitung von Gleichung 5.2 wurde dies berücksichtigt [47]. Zum Vergleich mit anderen vorgeschlagenen analytischen Formen des Relaxationsgesetzes ist in Abbildung 5.6 die Magnetisierung abhängig von der skalierten Zeit in einem doppelt-logarithmischen Diagramm dargestellt. Nattermann et. al. haben vorgeschlagen, daß die Magnetisierung gemäß

$$M(t) \sim (T \ln(t/\tau))^{-\Psi} \quad (5.3)$$

mit einem von der Raumdimension abhängigen Exponenten Ψ abnimmt [77]. Bei der Herleitung dieses Gesetzes wurde angenommen, daß Domänen sich durch einen typischen Radius charakterisieren lassen, eine Annahme, die die fraktale Struktur der Domänen ignoriert. Abbildung 5.6 zeigt, daß eine Beschreibung der Daten nach Gleichung 5.3 nicht möglich ist. Denn nach Gleichung 5.3 ergibt sich als Abhängigkeit der Magnetisierung von der skalierten Zeit ein reines Potenzgesetz, das im doppelt logarithmischen Diagramm als Gerade erkennbar wäre.

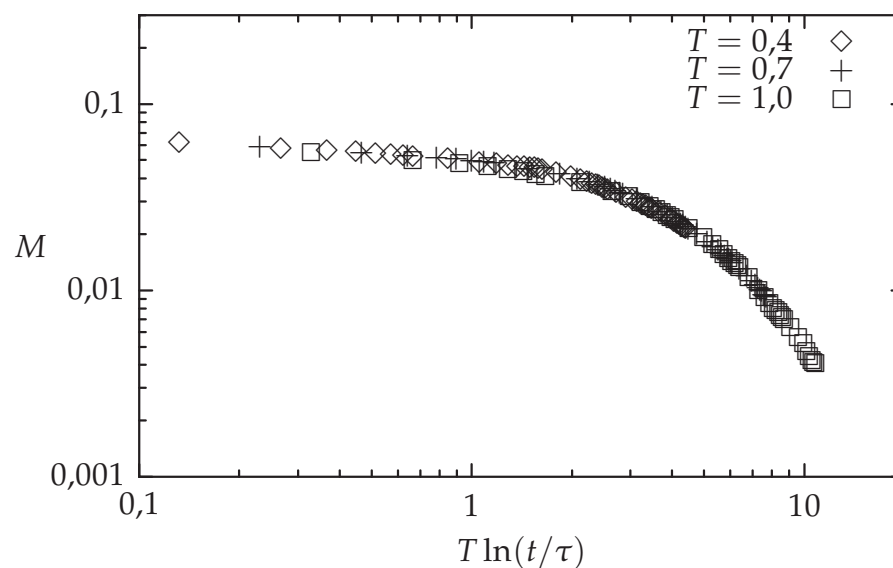


Abbildung 5.6: Die gleichen Daten wie in Abbildung 5.4, doppelt logarithmisch aufgetragen.

6 Wartezeitabhängiges Verhalten

Im vorigen Kapitel wurde die Relaxation der Magnetisierung nach Ausschalten des externen Feldes untersucht. Dabei wurde das System zunächst eine Zeit lang im eingeschalteten Feld präpariert. Dabei wurde ausgenutzt, daß sich die Magnetisierung bereits nach relativ kurzer Wartezeit (≈ 1000 MCS) nicht mehr änderte, auch wenn das System mit Sicherheit nicht im Gleichgewicht war. Die Relaxation der Magnetisierung von diesem konstanten Wert nach Null hin kann dennoch analysiert werden.

Es gibt aber interessante Abhängigkeiten von der Wartezeit t_w . Meßwerte werden abhängig von zwei Zeiten, der Wartezeit t_w und der Beobachtungszeit t , die nach Ablauf der Wartezeit gemessen wird. Eine solche Abhängigkeit wird *Aging*, also Altern genannt, weil sich das System während der Wartezeit verändert. *Aging* wird in vielen ungeordneten Systemen beobachtet, am prominentesten sind auch hier wieder die Spingläser. *Aging* wird sowohl in Experimenten als auch in Computersimulationen beobachtet, für eine Übersicht siehe z. B. Ref. [78] und Ref. [79].

In Experimenten an Spinglas Systemen wird dabei typischerweise so vorgegangen: Die Probe wird ohne äußeres Feld möglichst schnell auf eine tiefe Temperatur abgekühlt. Nach einer bestimmten Wartezeit t_w wird ein kleines Magnetfeld angelegt und der Verlauf der Magnetisierung als Funktion der Zeit wird aufgenommen. Bei komplizierteren Verfahren wird direkt vor Anlegen des Feldes auch die Temperatur geändert. Auch noch aufwendigere Verfahren, die Temperaturzyklen enthalten, werden verwendet [79].

In Simulationen werden diese Verfahren zum Teil nachvollzogen. Es ist aber möglich, nach einmaligem Abkühlen des Systems ohne weitere Änderungen *Aging*-Verhalten festzustellen. Dabei werden Korrelationsfunktionen bestimmt, die von der Wartezeit und der Meßzeit nach Ablauf der Wartezeit abhängen [80, 81].

6.1 Simulationen zum *Aging*-Verhalten verdünnter Antiferromagnete

Betrachtet werden dreidimensionale verdünnte Antiferromagnete. Die Simulationen wurden hauptsächlich mit Systemen der Größe 20^3 durchgeführt, die Verdünnung betrug $p = 0,5$. Initialisiert wurden die Systeme mit einer zufälligen Ausgangskonfiguration. Dann wurde die Simulation bei einer konstanten Temperatur und einem konstanten äußeren Magnetfeld begonnen. Temperatur und Magnetfeld wurden dabei so gewählt, daß der entsprechende Punkt im Phasendiagramm innerhalb der spinglasartigen Phase liegt. Die Zeit wird wieder in *Monte Carlo-Sweeps* gemessen, verwendet wird der gleiche Algorithmus wie in Kapitel 5.

Die wichtigste Meßgröße ist die wartezeitabhängige Autokorrelationsfunktion $C(t_w, t)$, die durch

$$C(t_w, t) = \frac{1}{N} \sum_i [\langle \sigma_i(t + t_w) \sigma_i(t_w) \rangle]_{\text{av}} \quad (6.1)$$

definiert ist. Die spitzen Klammern $\langle \cdot \rangle$ bedeuten hier nicht ein thermische Mittel, sondern eine Mittelung über verschiedene Anfangskonfigurationen eines Systems, die Klammern $[\cdot]_{\text{av}}$ wie üblich eine Mittelung über verschiedene Unordnungs-konfigurationen. In Abbildung 6.1 sind die Rohdaten für die zeitabhängige Autokorrelationsfunktion dargestellt. Gemittelt wurde dazu über insgesamt 128 Systeme der Größe 20^3 , dabei wurde jede Unordnungs-konfiguration zweimal verwendet. Simuliert wurde bei einer Temperatur von $T = 0,3$ und einem Magnetfeld von $B = 1,9$.

6.2 Auswertung und Diskussion der Ergebnisse

Für die Auswertung der Autokorrelationsfunktion $C(t_w, t)$ wird folgender phänomenologisch begründeter Skalenansatz gemacht:

$$C(t_w, t) = t^{-x} \Phi(t/t_w). \quad (6.2)$$

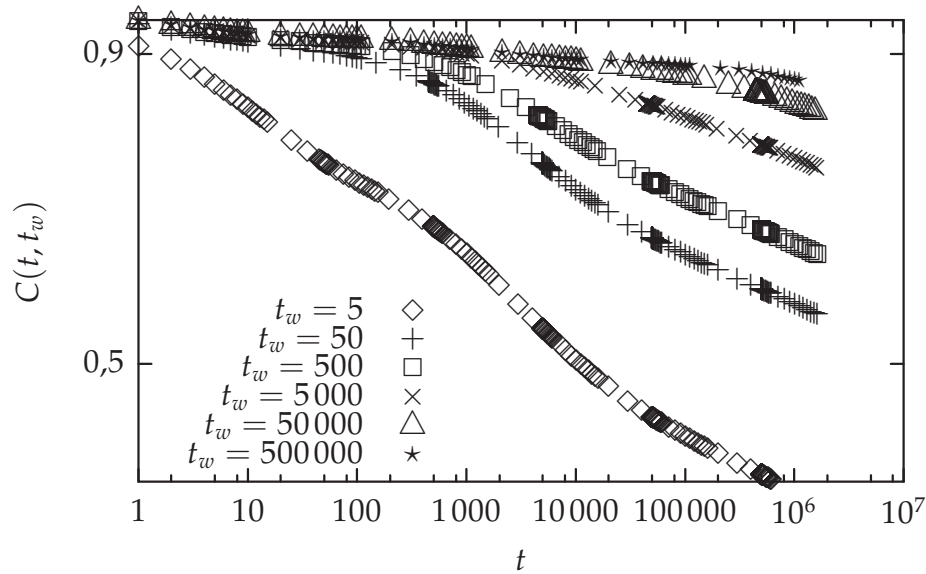


Abbildung 6.1: Rohdaten für die zeitabhängige Autokorrelationsfunktion $C(t_w, t)$, gemittelt über 128 Systeme der Kantenlänge $L = 20$.

Die Skalenfunktion $\Phi(y)$ wird dabei konstant für $y = 0$ und es gilt $\Phi(y) \sim y^{x-\lambda}$ für $y \rightarrow \infty$. Zwei Exponenten bestimmen also das Zeitverhalten, x für kleine Zeiten $t \ll t_w$, λ für große Zeiten $t \gg t_w$. Dazwischen findet ein Crossover statt. Man spricht von Quasigleichgewichtsverhalten, das durch x bestimmt wird, und Nichtgleichgewichtsverhalten, das durch λ bestimmt wird. Diese Bezeichnungen beruhen auf anschaulichen Vorstellungen, die das Phänomen des *Aging* erklären sollen:

Ungeordnete Systeme wie Spingläser, verdünnte Antiferromagnete oder Random-Field Systeme zeichnen sich durch eine komplexe Abhängigkeit der freien Energie von den einzelnen Freiheitsgraden aus. Im Phasenraum existieren viele lokale Minima der freien Energie, und zwar nicht nur bei tiefen Energien, auch in Nichtgleichgewichtszuständen bei höheren Energien. Befindet sich ein System nun in einem lokalen Minimum, so wird es eine gewisse Zeit dauern, bevor eine Energiebarriere zu einem „benachbarten“, tieferen lokalen Minimum überschritten wird. Während dieser Zeit ist das Verhalten des Systems nicht von dem eines Systems, das nur dieses eine Minimum der freien Energie hat und sich damit im Gleichgewicht befindet, zu unterscheiden. Später, wenn die Energiebarriere über-

schritten worden ist, bemerkt der Beobachter, daß das System nicht im Gleichgewicht (also dem absoluten Minimum der freien Energie) ist. Deshalb spricht man ab diesem Zeitpunkt von Nichtgleichgewichtsverhalten. Der *Aging*-Effekt rührt nun daher, daß nach einer langen Wartezeit das System bereits Zeit gefunden hat, tiefere Minima der freien Energie aufzusuchen, als direkt nach dem Einstellen des Nichtgleichgewichts-Anfangszustandes. Es wird daher auch länger dauern, diese Minima zu verlassen.

Diese ganz allgemeine, phänomenologisch motivierte Erklärung beruht lediglich auf der komplexen Struktur der freien Energie im Phasenraum. Dies ist in einer Vielzahl von Systemen der Fall: So wurde *Aging* in Polymeren in einer ungeordneten Umgebung, verunreinigten Supraleitern, Neuronalen Netzen, Populationsdynamik und Immunologie beobachtet [78].

Mit Hilfe von Gleichung 6.2 wurde eine Skalenanalyse der Meßwerte für $C(t, t_w)$ durchgeführt, der zugehörige Skalenplot ist in Abbildung 6.2 dargestellt, hier wie im folgenden werden wieder zur Verbesserung der Übersichtlichkeit nur Linien eingezeichnet. Die phänomenologisch eingeführten Exponenten x und λ

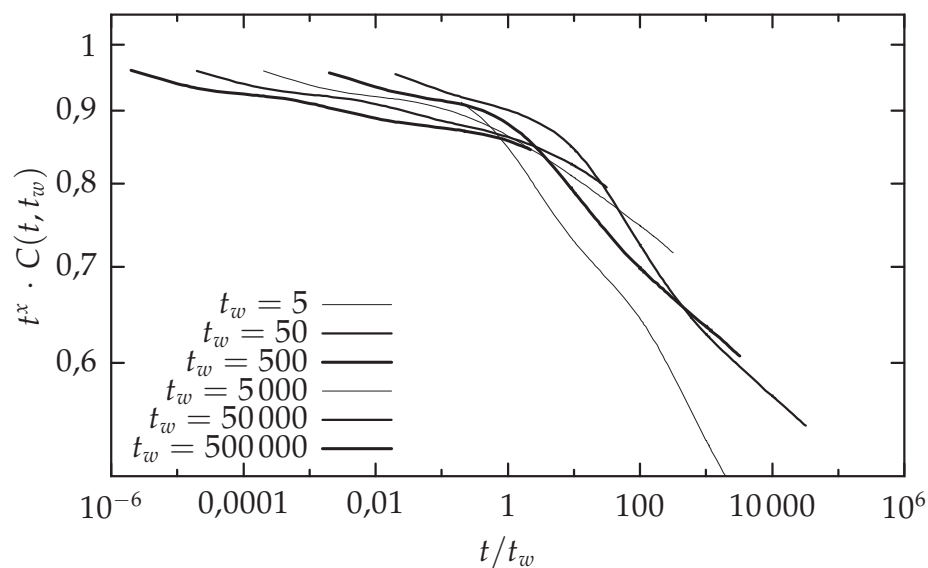


Abbildung 6.2: Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen t/t_w .

hängen von der Temperatur ab und sind in diesem Sinne nicht-universell. Da eine systematische Analyse der Temperaturabhängigkeit hier nicht durchgeführt wird,

wird auf die numerische Bestimmung von x und λ hier nicht eingegangen. Interessant ist vielmehr, daß die Skalenfunktion Gleichung 6.2 mit der Skalenvariablen t/t_w verwendet werden kann, um die Daten zum Kollaps zu bringen, wenn man von den Werten für die sehr kurze Wartezeit $t_w = 5$ absieht. Für derartig kurze Zeiten ist nicht klar, ob die Glauber Dynamik Artefakte erzeugt, eventuell vorhandene Korrelationen zwischen den Zuständen des Systems nach 1 MCS können auf solch kurzen Zeitskalen die Messung beeinflussen.

Die sogenannte Droplet-Theorie, die annimmt, daß sich Domänen durch einen charakteristischen Radius beschreiben lassen, sagt eine Skalenvariable $\ln(t/\tau)/\ln(t_w/\tau)$ voraus [82]. Daher wurde auch ein Skalenplot mit dieser Skalenvariablen durchgeführt, er ist in Abbildung 6.3 abgebildet. Die Zeitskala τ wurde dabei zu $\tau \approx 1$ gewählt. Eine genauere Bestimmung ist nicht möglich, da wegen der logarithmischen Abhängigkeit erst große Änderungen (um einen Faktor 10) deutlich sichtbare Auswirkungen haben. Es zeigt sich, daß die Daten

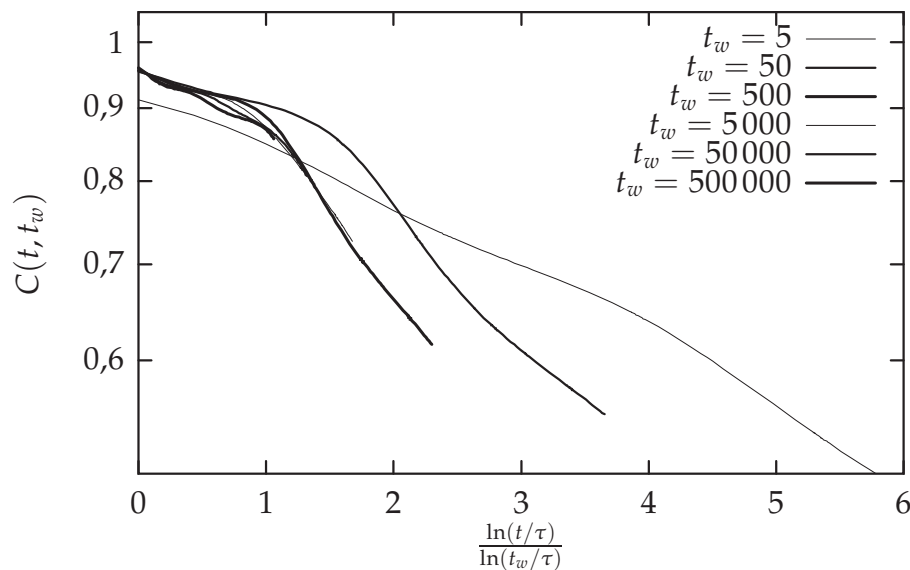


Abbildung 6.3: Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen $\ln(t/\tau)/\ln(t_w/\tau)$.

für $t_w = 5$ und $t_w = 50$ stark von den anderen abweichen. Allerdings ist der Datenkollaps für die längeren Wartezeiten qualitativ besser als in Abbildung 6.2.

Möglich wäre es, daß auch für $t_w = 50$ die Glauber Dynamik noch nicht einer realistischen Beschreibung des Systems entspricht, für alle größeren Wartezeiten

und alle Systemgrößen ein Datenkollaps erreicht würde. In diesem Fall würde die Gültigkeit der Annahmen aus der Droplet-Theorie bestätigt, die davon ausgehen, daß es einen charakteristischen Radius gibt, mit dem Domänen beschrieben werden können, was allerdings im Widerspruch zu vielen der in dieser Arbeit diskutierten Ergebnisse stünde.

Andererseits ist aber auch denkbar, daß für kleine Wartezeiten der fraktale Charakter der Domänen eine Beschreibung nach der Droplet-Theorie nicht zuläßt, die nur für größere Wartezeiten effektiv richtig würde. Für größere Wartezeiten würde in diesem Fall aufgrund der begrenzten Größe des Systems ein cutoff in der Domänenverteilung dafür sorgen, daß das Droplet-Bild effektiv richtig wird. Um dies zu untersuchen, wurde in Abbildung 6.4 ein Skalenplot für Systeme der Größe $L = 30$ angefertigt. In diesem sind die Werte für $t_w = 500$ (und wie oben natürlich kleinere Zeiten) etwas schlechter mit den Werten für höhere Zeiten zur Deckung zu bringen sind, was diese These unterstützt. Allerdings ist diese Abweichung nicht signifikant, insbesondere da nur über 15 Systeme der Größe $L = 30$ gemittelt wurde.

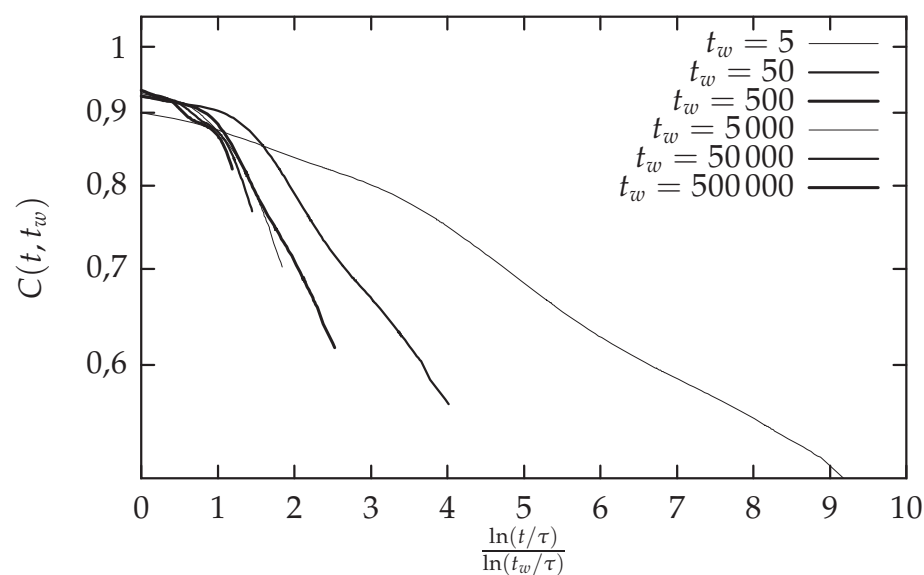


Abbildung 6.4: Skalenplot für $C(t_w, t)$ mit der Skalenvariablen $\ln(t/\tau)/\ln(t_w/\tau)$ für Systeme der Größe $L = 30$.

Eine eindeutige Unterscheidung zwischen den beiden Varianten der Skalenvariablen kann daher nicht getroffen werden. Es ist schwierig, Zeitabhängigkeiten

auf effektiv logarithmischen Zeitskalen sicher auseinanderzuhalten und zwischen zwei verschiedenen Gesetzmäßigkeiten zu unterscheiden. Eine Simulation, die etwa den in den Abbildungen zu sehenden Zeitraum nur um einen Faktor 1,5 ausdehnen würde, würde drei Größenordnungen länger benötigen, aus einer Woche Rechenzeit würden 1 000 Wochen, also ca. 20 Jahre. Dies ist natürlich praktisch nicht durchführbar. Genau wie man den Zeitrahmen erweitern muß, ist auch die Simulation größerer Systeme wünschenswert, aber auch hier ist zu bedenken, daß die benötigte Rechenzeit mit der dritten Potenz der Kantenlänge L ansteigt¹.

Die Rechenleistung moderner Computer wird im Laufe der Zeit weiterhin stark ansteigen. Auch wenn physikalische Grenzen bei der Herstellung von herkömmlichen Silizium-Microchips bereits in erreichbarer Nähe sind, so kann z. B. durch Verwendung anderer Materialien oder auch durch massive Parallelisierung weiterhin mit einem starken Zuwachs der Verfügbarkeit von kostengünstiger Rechenleistung gerechnet werden. Es scheint möglich, in Zukunft detailliertere Erkenntnisse über verdünnte Antiferromagnete im Feld zu gewinnen. Dies betrifft sowohl das Gleichgewichts-, als auch das Nichtgleichgewichtsverhalten. Es ist bereits klar geworden, daß der DAFF in der gleichen Universalitätsklasse wie das RFIM mit gaußverteilten Zufallsfeldern ist. Die Simulation größerer Systeme wird es erlauben, eine Unterscheidung zwischen einer logarithmischen oder einer algebraischen Divergenz der spezifischen Wärme genauer zu unterscheiden. Ebenfalls wird eine Unterscheidung zwischen den vorgeschlagenen Möglichkeiten des Relaxationsmechanismus möglich werden.

¹In Gleichgewichtssimulationen ist dieser Effekt noch stärker, da größere Systeme zusätzlich noch mehr *Monte Carlo-Sweeps* pro Temperatur benötigen, um ins Gleichgewicht zu kommen.

A Skalentheorie

A.1 Grundlagen der Skalentheorie

An vielen Stellen in dieser Arbeit werden Ergebnisse aus der Skalentheorie zitiert. Hier soll nun in einfachem Rahmen auf die Grundlagen der Skalentheorie sowie einige spezielle Eigenschaften der Skalentheorie von Random-Field Ising Systemen eingegangen werden. Eine komplette Darstellung würde den Rahmen dieser Arbeit übersteigen. Für weiterführende Fragen sei auf Originalliteratur verwiesen, Grundlagen sind etwa in [83, 84], Literatur zum Skalenverhalten von Random-Field Systemen unter anderem in [85, 55, 9, 10, 62, 56] zu finden).

A.1.1 Skalenhypothese

Betrachtet werden sollen zunächst Systeme, deren Gibbs'sche freie Energie $G(B, T)$ von zwei thermodynamischen Variablen, der Temperatur T und einem äußeren Magnetfeld B abhängt¹. Weiter soll angenommen werden, daß das System einen kritischen Punkt bei $B = 0$ und $T = T_c$ hat, mit der Definition $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$ dann bei $B = 0$, $\varepsilon = 0$. Die Symmetrie des Systems soll so sein, daß man sich auf $B \geq 0$ beschränken kann. Die Skalenhypothese besagt nun, daß sich der führende singuläre Teil der freien Energie G , also der Teil, der beim Phasenübergang am stärksten singulär wird und die kritischen Exponenten bestimmt, als verallgemeinerte homogene Funktion² ihrer Variablen schreiben läßt,

¹Häufig wird diese Größe auch direkt als freie Energie $F(B, T)$ bezeichnet, was auf eine andere Schreibweise des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik zurückgeht [84]. Für die folgende Diskussion ist dies unerheblich, da für die betrachteten Systeme das kritische Verhalten von Ableitungen von G und F gleich ist. Auch wird der Einfachheit halber G als freie Energie bezeichnet.

²Eine homogene Funktion ist definiert durch $f(ax) = a^k f(x) \forall a \geq 0 (x \in \mathbb{R}^n)$ [86], die Verallgemeinerung besteht in der Einführung mehrerer Exponenten in Funktionen, die von mehr als

ð

$$G(a^{x_1}B, a^{x_2}\varepsilon) = aG(B, \varepsilon) \quad \text{für alle } a > 0. \quad (\text{A.1})$$

Motiviert werden kann dieser Ansatz einerseits mit dem beobachteten kritischen Verhalten von Ableitungen von G , etwa der spezifischen Wärme oder der Suszeptibilität. Wie unten gezeigt wird, ergeben sich deren kritische Exponenten, wie sie in Kapitel 3.4.1 eingeführt worden sind, aus den Exponenten x_1 und x_2 . Mit Hilfe der Renormierungsgruppen-Theorie kann der Ansatz A.1 noch aus weitaus allgemeineren Annahmen hergeleitet werden. Dies wird kurz im Anhang A.1.2 dargestellt.

Aus Gleichung A.1 können nun weitere Schlußfolgerungen gezogen werden. Für die spezielle Wahl $a = |\varepsilon|^{-1/x_2}$ ergibt sich

$$G\left(|\varepsilon|^{-x_1/x_2}B, \frac{\varepsilon}{|\varepsilon|}\right) = G(|\varepsilon|^{-x_1/x_2}B, \pm 1) = |\varepsilon|^{-1/x_2}G(B, \varepsilon). \quad (\text{A.2})$$

Durch die Definition einer Skalenfunktion $f^\pm(|\varepsilon|^{-x_1/x_2}B) = G(|\varepsilon|^{-x_1/x_2}B, \pm 1)$ läßt sich G als

$$G(B, \varepsilon) = |\varepsilon|^{-1/x_2}f^\pm(|\varepsilon|^{-x_1/x_2}B) \quad (\text{A.3})$$

schreiben. Analog kann man für die Wahl $a = B^{-1/x_1}$ und einer weiteren Skalenfunktion g die Schreibweise

$$G(B, \varepsilon) = B^{1/x_1}g(\varepsilon B^{-x_2/x_1}) \quad (\text{A.4})$$

eingeführen. Aus diesen Gleichungen kann man nun den Zusammenhang der üblichen kritischen Exponenten mit x_1 und x_2 herleiten. Gezeigt wird dies hier für den Exponenten α der spezifischen Wärme. Für $B \rightarrow 0$ ergibt sich aus Gleichung A.3

$$G(0, \varepsilon) = |\varepsilon|^{1/x_2}f^\pm(0). \quad (\text{A.5})$$

Mit

$$c \sim \frac{\partial^2 G}{\partial \varepsilon^2} \sim |\varepsilon|^{1/x_2-2} \sim |\varepsilon|^{-\alpha} \quad (\text{A.6})$$

einer Variable abhängen.

folgt

$$\alpha = 2 - \frac{1}{x_2}. \quad (\text{A.7})$$

Analog dazu lassen sich die folgenden Gleichungen für andere kritische Exponenten ausrechnen:

$$\beta = \frac{1 - x_1}{x_2} \quad (\text{Ordnungsparameter}) \quad (\text{A.8})$$

$$\gamma = \frac{2x_1 - 1}{x_2} \quad (\text{Suszeptibilität}) \quad (\text{A.9})$$

Mit Hilfe dieser Beziehungen läßt sich nun z. B. die Rushbrooke-Gleichung

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{A.10})$$

herleiten.

A.1.2 Kadanoff Block Scaling

Die Annahme einer verallgemeinerten homogenen Funktion für den singulären Anteil der freien Energie kann noch weiter begründet werden. Dazu soll hier nicht die gesamte Renormierungsgruppen-Theorie dargestellt werden, sondern lediglich ein Beispiel phänomenologischer Art diskutiert werden. Betrachtet sei ein d -dimensionales Ising-Modell mit einem Gitterabstand nächster Nachbarn von a_0 . Der wichtige Punkt ist, daß die Korrelationslänge ξ nahe T_c viel größer als der Gitterabstand ist, bei T_c divergiert die Korrelationslänge. Dies kann nun ausgenutzt werden. Man teilt das System in Blöcke der Kantenlänge L ein, so daß L^d Spins zu einem Block zusammengefaßt werden. Da wegen der großen Korrelationslänge auf kurzen Längenskalen $L \ll \xi/a_0$ viele der möglichen Spinkonfigurationen in einem Block nicht vorkommen, ist es möglich, das System nicht mehr durch alle Spins zu beschreiben, sondern durch ein System, in dem jedem Block ein einzelner Spin zugeordnet wird. Man kann weiter annehmen, daß der Zustand des Systems durch neue Zustandsvariablen $\tilde{B}, \tilde{\varepsilon}$ beschrieben wird, die sowohl von B und ε als auch der Blocklänge L abhängen. Aufgrund von Symmetrieeigenschaften und der

Bedingung $\tilde{\varepsilon} = \tilde{B} = 0$, wenn $\varepsilon = B = 0$, kann man den Ansatz

$$\tilde{B} = B L^x \tag{A.11}$$

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon L^y \tag{A.12}$$

machen, wobei x und y zunächst unbestimmte Exponenten sind. Da auch das System aus den Blockspins ein Ising-System ist, gilt, daß die Abhängigkeit des singulären Teils der freien Energie des Systems aus Blockspins von \tilde{B} und $\tilde{\varepsilon}$ die gleiche sein muß, wie die von B und ε im ursprünglichen System. Da in einem Blockspin L^d Spins zusammengefaßt wurden, ergibt sich

$$G(B, \varepsilon) = L^{-d} G(\tilde{B}, \tilde{\varepsilon}) = L^{-d} G(B L^x, \varepsilon L^y), \tag{A.13}$$

öalso, daß der singuläre Anteil der freien Energie eine verallgemeinerte homogene Funktion von B und ε ist.

In Gleichung A.13 geht die Raumdimension d explizit ein. Zusammen mit der Annahme, daß die Korrelationslänge im Blockspin-System um die Länge L reduziert ist, ergeben sich analog zu der Herleitung des Zusammenhangs von α mit den Exponenten x_1 und x_2 weitere Skalenrelationen, in denen die Raumdimension explizit vorkommt, sogenannte *Hyperscaling-Relationen*, z. B.

$$d\nu = 2 - \alpha. \tag{A.14}$$

Die Berechnung der Werte der kritischen Exponenten ist mit Hilfe der Renormierungsgruppen-Theorie möglich. Dazu werden Abbildungsgleichungen z. B. zwischen dem oben beschriebene Blockspin-System und dem Ursprungssystem explizit ausgerechnet, man kann auf Argumente phänomenologischer Art, wie sie oben verwendet wurden, verzichten. Dies ist kompliziert und im allgemeinen nur näherungsweise möglich.

A.1.3 *Finite-Size-Scaling*

An verschiedenen Stellen der vorliegenden Arbeit wird die Technik des *Finite-Size-Scaling* eingesetzt, um kritisches Verhalten zu untersuchen. Die Grundidee beim *Finite-Size-Scaling* ist, daß das Verhalten von endlichen Systemen vom Ver-

hältnis der Systemgröße L zur Korrelationslänge ξ bestimmt wird: Für $L \gg \xi$ wird das Verhalten des unendlichen Systems beobachtet, für $L \ll \xi$ sind Effekte aufgrund der endlichen Systemgröße unvermeidlich. Da die Korrelationslänge in der Umgebung von T_c beliebig anwächst, werden diese Effekte immer auftreten. Weil nun z. B. die Suszeptibilität aus einem Integral über die Korrelationsfunktion bestimmt werden kann, ist klar, daß die Divergenz der Suszeptibilität von einer Sättigung der Korrelationslänge in einem endlichen System beeinflußt werden muß. Eine Möglichkeit, dies zu berücksichtigen, ist der Ansatz

$$\chi(L, T) = |\varepsilon|^{-\gamma} h\left(\frac{L}{\xi(\varepsilon)}\right), \quad (\text{A.15})$$

wobei für die Skalenfunktion $h(x)$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = \text{const.} \quad (\text{A.16})$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} h(x) \sim x^{\gamma/\nu} \quad (\text{A.17})$$

gilt. Setzt man das kritische Verhalten der Korrelationslänge $\xi \sim \varepsilon^{-\nu} \Leftrightarrow \xi^{-1/\nu} \sim \varepsilon$ in Gleichung A.15 ein, so erhält man die Skalenrelation

$$\chi(L, T) = \xi^{\gamma/\nu} h\left((L^{1/\nu} \varepsilon)^\nu\right). \quad (\text{A.18})$$

In der Nähe der kritischen Temperatur des unendlich großen Systems, also $\varepsilon \approx 0$, wird die Korrelationslänge in endlichen Systemen sättigen. Dies führt zu einer Annahme der Form $\xi(\varepsilon \approx 0) \sim L$. Letztendlich ergibt sich

$$\chi(L, T) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}\left(\varepsilon L^{1/\nu}\right), \quad (\text{A.19})$$

wobei die neue Skalenfunktion $\tilde{\chi}$ auf einfache Weise aus h und der Sättigung von $\xi(\varepsilon \approx 0) \sim L$ folgt. Diese Form des *Finite-Size-Scaling* wurde in dieser Arbeit verwendet (siehe z. B. Gleichung 3.14).

A.2 Besonderheiten des Random-Field Ising-Modells

Im Random-Field Ising-Modell kann man nicht mehr davon ausgehen, daß die freie Energie nur von zwei Größen t und B abhängt, sondern daß die Stärke der Random-Fields Δ ebenfalls relevant ist. Dies führt zur Einführung eines neuen Exponenten, so daß im RFIM nicht, wie in Anhang A.1 zwei, sondern drei der kritischen Exponenten voneinander unabhängig sind. Renormierungsgruppen-Rechnungen ergeben, daß auf der ganzen Trennlinie zwischen langreichweitig geordneter Phase und der Domänenphase das kritische Verhalten des RFIM von diesen drei Exponenten bestimmt wird, insbesondere bei $T = 0$ [55]. Nur für das geordnete System ohne Zufallsfelder wird das normale kritische Verhalten des Ising-Modells vorliegen. Dies ist auch der Grund dafür, daß es keine Rolle spielt, in welcher Richtung die Phasengrenzlinie überschritten wird: Man darf die freie Energie sowohl nach der Temperatur als auch nach der Stärke der Zufallsfelder ableiten und erhält immer das gleiche kritische Verhalten.

A.2.1 Das kritische Verhalten von $\partial M/\partial T$

In Kapitel 4 wurde verwendet, daß man beim DAFF den Exponenten der spezifischen Wärme aus der Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur bestimmen kann. Für die Herleitung dieser Beziehung wird basierend auf den Arbeiten von Fishman und Aharony [27], Belanger et. al. [85] und Kleemann et. al. [22] eine effektive Temperatur

$$\varepsilon_0 = \frac{T - T_c + a_1 B^2}{T_c} \quad (\text{A.20})$$

eingeführt. Der Übergang (*crossover*) vom Verhalten des reinen Systems zum Verhalten, das durch die Universalitätsklasse des RFIM bestimmt wird durch einen Crossover-Exponenten Φ bestimmt. Ein Skalenansatz für die freie Energie lautet dann

$$G(\varepsilon_0, B) = |\varepsilon_0|^{2-\alpha} f(A B^2 |\varepsilon_0|^{-\Phi}), \quad (\text{A.21})$$

wobei A ein Maß für die Unordnung des DAFF ist, das daher durch die Verdünnung bestimmt wird. Betont werden soll hier, daß dieser Ansatz (im Gegensatz

zu den oben in Anhang A.1 vorgestellten Ansätzen) den Übergang vom reinen System zum RFIM beschreibt, nicht jedoch das kritische Verhalten am Phasenübergang. Die Gleichung $\varepsilon_0 = 0$ beschreibt nicht eine kritische Linie im Phasendiagramm, sondern den Crossover-Bereich. Die Skalenfunktion $f(x)$ verhält sich in der Nähe des Phasenübergangs so, daß das kritische Verhalten des RFIM dominant wird, es ergibt sich als Ansatz $f(x) \sim (x - x_0)^{2-\tilde{\alpha}}$. Der Phasenübergang findet dann bei $(x - x_0) = 0$ statt. Damit kann man die reduzierte Temperatur

$$\varepsilon = \frac{T - T_c + a_1 B^2 + a_2 B^{2/\Phi}}{T_c} \quad (\text{A.22})$$

definieren. Die Phasengrenzlinie wird durch $\varepsilon = 0$ beschrieben. Das kritische Verhalten der freien Energie, öder singuläre Anteil unter Vernachlässigung der nichtkritischen Terme ist dann durch

$$G(\varepsilon, B) \sim B^{2(\tilde{\alpha}-\alpha)/\Phi} |\varepsilon|^{2-\tilde{\alpha}} \quad (\text{A.23})$$

gegeben. Da ε linear von der Temperatur abhängt, ist die Ableitung nach der Temperatur proportional zur Ableitung nach ε . Damit wird sofort ersichtlich, daß die spezifische Wärme als zweite Temperaturableitung der freien Energie mit dem Exponenten $\tilde{\alpha}$ divergiert. Die Magnetisierung kann nun durch die Ableitung der freien Energie nach dem äußeren Feld berechnet werden.

$$M \sim \frac{\partial G}{\partial B} \sim \frac{\partial}{\partial B} B^{2(\tilde{\alpha}-\alpha)/\Phi} |\varepsilon|^{2-\tilde{\alpha}} \quad (\text{A.24})$$

$$\sim B^{2(\tilde{\alpha}-\alpha)/\Phi-1} |\varepsilon|^{2-\tilde{\alpha}} + B^{2(\tilde{\alpha}-\alpha)/\Phi} |\varepsilon|^{1-\tilde{\alpha}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial B} \quad (\text{A.25})$$

Die Ableitung von ε nach dem Feld hängt nun nicht mehr von der Temperatur ab, die verschiedenen Potenzen von B ebenfalls nicht. Die Temperaturabhängigkeit des führenden Terms des kritischen Verhaltens der Magnetisierung kann somit vereinfachend durch

$$M \sim |\varepsilon|^{1-\tilde{\alpha}} \quad (\text{A.26})$$

beschrieben werden. Daraus folgt, daß die Ableitung der Magnetisierung nach der Temperatur ebenfalls mit dem RFIM Exponenten der spezifischen Wärme $\tilde{\alpha}$ divergiert.

A.2.2 Modifizierte Skalenrelation bei $T = 0$

Nach Nowak et al. [56] gilt bei $T = 0$ eine modifizierte Skalenrelation für die Exponenten α , β und γ . Die spezifische Wärme kann einerseits durch die erste Ableitung der inneren Energie und andererseits durch die zweite Ableitung der freien Energie nach der Temperatur berechnet werden. Bei $T = 0$ folgt allerdings aus der Gleichung $F = U - TS$, daß beide Energien gleich sind, man fragt sich, welche Ableitung die richtige ist, die erste oder die zweite. Zu bedenken ist zwar, daß aufgrund des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik die spezifische Wärme bei $T = 0$ verschwindet, aber das kritische Verhalten der inneren und freien Energie ist dennoch von Interesse, insbesondere wenn man bedenkt, daß möglicherweise bei tiefen Temperaturen Crossover Effekte vom $T = 0$ Verhalten auftreten können. Führt man wie in Anhang A.2.1 eine Skalenvariable ε ein, die die kritische Linie durch $\varepsilon = 0$ beschreibt, ergibt sich analog zu den Gleichungen A.5 und A.6 $\alpha = 2 - 1/x_2$. Für $T \rightarrow 0$ muß aber die vollständige Definition der spezifischen Wärme beachtet werden, es gilt

$$c \sim -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \sim \frac{\partial^2 F}{\partial \Delta^2} \sim |\varepsilon|^{-\alpha}. \quad (\text{A.27})$$

Der Vorfaktor T trägt für $T \rightarrow 0$ zum kritischen Verhalten bei, daher gilt $\alpha = 1 - 1/x_2$. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Verhalten der inneren Energie, die sich aus $U = F + TS$ errechnen läßt. Mit $S = -\partial F/\partial T$ kann man das kritische Verhalten aus dem Skalenansatz für die freie Energie herleiten. Auch hier ergibt sich, daß der Term, der wie üblich das $\alpha = 2 - 1/x_2$ liefert, mit der Temperatur multipliziert wird, was ebenfalls zu $\alpha = 1 - 1/x_2$ führt. Damit ist das Analogon zur Rushbrooke-Gleichung hier gegeben durch

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 1. \quad (\text{A.28})$$

Literaturverzeichnis

- [1] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925).
- [2] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [3] M. P. Nightingale und H. W. J. Blöte, Phys. Rev. B **54**, 1001 (1996).
- [4] A. Aharony, Phys. Rev. B **18**, 3318 (1978).
- [5] I. Y. Korenblit und E. F. Shender, Sov. Phys. JETP **62**, 1030 (1986).
- [6] J. R. L. de Almeida und R. Bruinsma, Phys. Rev. B **35**, 7267 (1987).
- [7] U. Nowak und K. D. Usadel, Phys. Rev. B **44** (1991).
- [8] A. J. Bray und K. Humayun, J. Phys. A **24**, L1185 (1991).
- [9] A. N. Berker und S. R. McKay, Phys. Rev. B **33**, 4713 (1986).
- [10] T. Nattermann, Phys. Stat. Sol. (b) **131**, 563 (1985).
- [11] A. T. Ogielski, Phys. Rev. Lett. **57**, 1251 (1986).
- [12] A. K. Hartmann und K. D. Usadel, Physica A **214** (1995).
- [13] J. Esser, U. Nowak und K. D. Usadel, Phys. Rev. B. **55**, 5866 (1997).
- [14] J. Kushauer, *Magnetische Domänen in verdünnten uniaxialen Antiferromagneten*, Dissertation, Universität – GH – Duisburg 1995.
- [15] F. C. Montenegro, A. R. King, V. Jaccarino, S.-J. Han und D. P. Belanger, Phys. Rev. B **44**, 2155 (1991).
- [16] A. R. King, V. Jaccarino, M. Motokawa, K. Sugiyama und M. Date, J. Appl. Phys. **57**, 3297 (1985).

- [17] Z. Zlanič und D. P. Belanger, *J. Magn. Magn. Mater.* **186**, 65 (1998).
- [18] Z. Zlanič, D. P. Belanger und J. A. Fernandez-Baca, *J. Magn. Magn. Mater.* **177-181**, 171 (1997).
- [19] R. J. Birgeneau, *J. Magn. Magn. Mater.* **177-181**, 1 (1998).
- [20] S.-J. Han, D. Belanger, W. Kleemann und U. Nowak, *Phys. Rev. B* **45**, 9728 (1992).
- [21] J. Satooka, H. A. Katori, A. Tobo und K. Katsumata, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 709 (1998).
- [22] W. Kleemann, *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 2469 (1993).
- [23] D. P. Belanger, *Experiments on the random field Ising model*, in *Spin Glasses and Random Fields*, herausgegeben von A. P. Young, World Scientific, Singapore 1997.
- [24] G. S. Grest und C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **33**, 7659 (1986).
- [25] J. F. Fernandez und E. Pytte, *Phys. Rev. B* **31** (1985).
- [26] U. Nowak und K. Usadel, *Phys. Rev. B* **39**, 2516 (1989).
- [27] S. Fishman und A. Aharony, *J. Phys. C* **12**, L729 (1979).
- [28] J. L. Cardy, *Phys. Rev. B* **29**, 505 (1984).
- [29] A. K. Hartmann und U. Nowak, *Eur. Phys. J. B* **7**, 105 (1999).
- [30] N. Surlas, cond-mat/9810231 (1998).
- [31] A. R. King, V. Jaccarino, T. Sakakibara, M. Motokawa und M. Date, *J. Magn. Magn. Mater.* **31-34**, 1119 (1983).
- [32] D. Sherrington und S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [33] D. Sherrington und S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. B* **17**, 4384 (1978).
- [34] S. F. Edwards und P. W. Anderson, *J. Phys.* **5**, 965 (1975).

-
- [35] D. Stauffer, *Introduction to percolation theory*, Taylor & Francis 1985.
- [36] Y. Imry und S. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35** (1975).
- [37] J. A. Cambier und M. Nauenberg, *Phys. Rev. B* **34**, 7998 (1986).
- [38] U. Nowak, J. Esser und K. D. Usadel, *Journal de Physique I* **6**, 37 (1996).
- [39] J. Z. Imbrie, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1747 (1984).
- [40] J. Bricmont und A. Kupiainen, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1829 (1987).
- [41] M. Aizenman und J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
- [42] U. Nowak, *Computer-Simulation verdünnter Ising-Antiferromagnete*, Dissertation, Universität–Gesamthochschule Duisburg 1992.
- [43] M. Mezard, G. Parisi und M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and beyond*, Bd. 9 von *World Scientific Lecture Notes in Physics*, World Scientific 1987.
- [44] K. Binder und A. P. Young, *Reviews of Modern Physics* **58** (1986).
- [45] J. R. L. de Almeida und D. J. Thouless, *J. Phys. A* **11**, 983 ().
- [46] U. Nowak und K. Usadel, *Phys. Rev. B* **43** (1991).
- [47] U. Nowak, J. Esser und K. D. Usadel, *Physica A* **232**, 40 (1996).
- [48] M. Staats, U. Nowak und K. D. Usadel, *Relaxation dynamics of diluted antiferromagnets*, ICM, Cairns Convention Centre, Australia (1997).
- [49] M. Staats, U. Nowak und K. D. Usadel, *J. Magn. Magn. Mater.* **(177-181)1-3**, 85 (1998).
- [50] A. Hartmann, *Exakte Berechnung von Grundzuständen eines ungeordneten Ising-Systems mit der Hilfe des Ford-Fulkerson-Algorithmus*, Diplomarbeit, Universität – GH – Duisburg 1993.
- [51] A. T. Ogielski und I. Morgenstern, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 928–931 (1985).

- [52] M. Staats, J. Esser und U. Nowak, *Kritisches Verhalten von Zufallfeldsystemen: exakte Grundzustandsberechnungen und Monte Carlo Simulation*, DPG-Tagung, Münster (1997).
- [53] J. Esser, Private Mitteilungen (1996).
- [54] A. W. Sandvik, cond-mat/9811177 (November 1998).
- [55] A. J. Bray und M. A. Moore, J. Phys. C **18**, L927 (1985).
- [56] U. Nowak, K. D. Usadel und J. Esser, Physica A **250**, 1 (1998).
- [57] M. Karszewski, J. Kushauer, C. Binek, W. Kleemann und D. Bertrand, J. Phys. C **6**, L75 (1994).
- [58] H. Rieger und A. P. Young, J. Phys. A **26**, 5279 (1993).
- [59] H. Rieger, Phys. Rev. B **52**, 6659 (1995).
- [60] R. H. Swendsen und J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [61] R. H. Swendsen, J.-S. Wang und A. M. Ferrenberg, *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, Kap. New Monte Carlo Methods for Improved Efficiency of Computer Simulations in Statistical Mechanics, Springer (1992).
- [62] W. Kleemann, A. R. King und V. Jaccarino, Phys. Rev. B **34**, 479 (1986).
- [63] A. Hucht, Private Mitteilungen (1998).
- [64] Q. Feng, Q. J. Harris, R. J. Birgeneau und J. P. Hill, Phys. Rev. B **55**, 370 (1997).
- [65] M. Schwarz und A. Soffer, Phys. Rev. Lett. **S. 2499** (1985).
- [66] P. Wong, Phys. Rev. B **3**, 1864 (1986).
- [67] Z. Zlanič, D. P. Belanger und J. A. Fernandez-Baca, Phys. Rev. Lett. **82**, 426 (1999).
- [68] G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. **37**, 944 (1976).
- [69] W. Selke, L. N. Shchur und O. A. Vasilyev, Physica A **259**, 388 (1998).

-
- [70] D. P. Belanger, A. R. King und V. Jaccarino, *Phys. Rev. B* **31**, 4538 (1985).
- [71] A. Falicov, A. N. Berker und S. R. McKay, *Phys. Rev. B* **51**, 8266 (1995).
- [72] M. E. J. Newman und G. T. Barkema, *Phys. Rev. E* **53**, 593 (1996).
- [73] M. Staats und K. D. Usadel, *Int. J. Mod. Phys. C* (1999), accepted for publication.
- [74] A. J. Bray, *Domain growth and coarsening*, in *Phase Transition and Relaxation in Systems with Competing Energy Scales*, S. 405. Kluwer Academic Publishers 1993.
- [75] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [76] K. Binder und M. H. Kalos, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Kap. 6, Springer (1986).
- [77] T. Nattermann und I. Vilfan, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 223 (1988).
- [78] H. Rieger, *Physica A* **224**, 267 (1996).
- [79] J.-O. Andersson, *Numerical and Experimental Studies of the Dynamics of Ising Spin Glasses*, Dissertation, Uppsala University 1994.
- [80] H. Rieger, B. Steckemetz und M. Schreckenberg, *Europhys. Lett.* **27**, 485 (1994).
- [81] G. Parisi, *J. Phys. A* **30**, L765 (1997).
- [82] D. S. Fisher und D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **38**, 373 (1988).
- [83] M. Plischke und B. Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*, World Scientific 1994.
- [84] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Clarendon Press, Oxford 1992.
- [85] D. P. Belanger, A. R. King, V. Jaccarino und J. L. Cardy, *Phys. Rev. B* **28**, 2522 (1983).

- [86] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajev, *Taschenbuch der Mathematik*, Kap. 3.1.4.2.2, S. 262, Harri Deutsch, Thun und Frankfurt (Main) (1987).

Ich danke Herrn Professor Dr. Usadel für die Möglichkeit, unter seiner Leitung und Betreuung diese Arbeit anzufertigen.

Dr. Uli Nowak danke ich ebenfalls für zahlreiche Diskussionen und für die wissenschaftliche Zusammenarbeit. Auch Dr. Jörg Esser, der die exakten Grundzustände berechnete, möchte ich dankend erwähnen.

Für die hervorragende und fruchtbare Zusammenarbeit bei der Betreuung unserer Arbeitsgeräte, des Workstation-Clusters und der Parallelrechner, sowie für sein sehr schönes Programm zur Erstellung von Skalenplots möchte ich mich bei Fred Hucht bedanken.

Markus Gruner und Dr. Uli Nowak danke ich für die kritische Durchsicht dieser Arbeit.

Für die freundliche Arbeitsatmosphäre in unserer Abteilung danke ich allen Mitarbeitern der Theoretischen Tieftemperaturphysik.

Den Kollegen aus der Arbeitsgruppe Prof. Dr. Wolf danke ich für technische Unterstützung.

Abschließend möchte ich noch den Softwareautoren D. Knuth, L. Lamport und dem \LaTeX 3 Project Team, R. M. Stallmann, Thomas Williams und Colin Kelley et. al. und vielen anderen für ihre hervorragenden, frei erhältlichen Programme \TeX , \LaTeX , emacs und gnuplot uvm. danken, die diese Arbeit in dieser Form möglich machten.