

Alterungseffekte in Spingläsern

von Kristian Marx

Ausarbeitung für das Seminar „Statistische Mechanik ungeordneter Systeme“
bei A. K. Hartmann, T. Aspelmeier

Göttingen, 18.07.2005

1 Inhalt

Alterungsprozesse in Spingläsern, das heißt, dynamische Nichtgleichgewichtsprozesse, die sich jedoch in Richtung Gleichgewicht bewegen, zeigen unter bestimmten Bedingungen ertaunliche Effekte.

Diese Ausarbeitung beschäftigt sich im ersten Teil mit den Anfängen der Untersuchung dieser Effekte mittels Computersimulationen, konkret mit zeitlich begrenzten Entwicklungen im Zerfall einer Magnetisierung, die einem Gleichgewichtsprozess sehr ähnlich sehen.

Der zweite Teil geht auf die in der jüngeren Forschung betrachteten Effekte der Rejuvenation- und Memory-Effekte ein, welche die plötzliche Zerstörung einer durch Alterung gewachsenen Struktur durch Temperaturänderung und deren Wiederherstellung beschreiben.

2 Spin-Gläser

Ein Spinglas ist ein System aus Spins σ_i , welche eine bestimmte Ausrichtung besitzen und über Bindungen J_{ij} in Abhängigkeit von ihrer Ausrichtung wechselwirken. Allgemein wird das Verhalten eines solchen Systems beschrieben durch seine Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_i H_i \sigma_i, \quad (1)$$

wobei prinzipiell jeder Spin mit jedem wechselwirken kann, praktisch aber meist die Stärke der Wechselwirkung mit der räumlichen Entfernung der Spins abnimmt. Der zweite Term der Hamiltonfunktion berücksichtigt ein evtl. vorhandenes äußeres Feld H ; im Folgenden sei stets $H = 0$. Die Verteilung der Bindungen J_{ij} ist beliebig.

Hat ein solches System eine endliche Temperatur, so besteht für die einzelnen Spins eine gewisse Wahrscheinlichkeit ihre Ausrichtung zu ändern. Diese Wahrscheinlichkeit hängt natürlich von der Energieänderung des Systems ab, beschrieben durch die Differenz zwischen Hamiltonfunktion vor und nach der Neuausrichtung, aber auch von dem thermischen Rauschen, z.B. in der Form eines Boltzmann-Faktors.

Phasen Insbesondere lassen sich in Abhängigkeit von der Temperatur Phasen unterscheiden, in denen sich das System befinden kann:

Ist die Temperatur eines Spinsystems so hoch, dass die Wechselwirkung der Spins gegenüber dem thermischen Rauschen oder äußeren Feldern vernachlässigt werden kann, befindet es sich in der paramagnetischen Phase, ohne ein äußeres Feld ist keine Ordnung erkennbar.

Wird das System abgekühlt, verliert die thermische Fluktuation an Stärke, die von der Materialstruktur abhängenden Bindungen zwischen den Spins gewinnen an Bedeutung. Es bildet sich bezüglich der Spinausrichtung mit der Zeit eine im Allgemeinen heterogene Ordnung. Dies ist die Spinglasphase.

Die Energielandschaft des Systems kann sehr zerklüftet sein, die freie Energie weist wegen der Komplexität der zufälligen Bindungsverteilung J_{ij} oft viele lokale Minima auf, in denen das System gefangen werden kann (\rightarrow metastabile Zustände), insbesondere bei niedrigen Temperaturen. Es reduziert sich auf diese Weise die Anzahl der möglichen auf die der energetisch günstigen Zustände, so dass sich näherungsweise diskrete Zustände beobachten lassen, sowie Domänen, die sich in unterschiedlichen Zuständen befinden und aneinander grenzen. Genaueres dazu später.

Ein Spezialfall des Spinglases ist der Ferromagnet, bei dem sämtliche Bindungen gleicher Natur sind (z.B. $J_{ij} = 1$), und die Ordnung weitaus homogener ist: Der Grundzustand des Ferromagneten besteht in der Gleichausrichtung aller Spins, die Domänen entsprechen den Weißschen Bezirken.

3 Zerfall eines vollständig magnetisierten Zustandes

Dieser Abschnitt basiert auf [1], aus der Anfangszeit der Erforschung von Alterungsprozessen in Spingläsern.

3.1 Simulation im Edward-Anderson Ising Spinglas Modell

Modell Wir betrachten ein dreidimensionales Spinglas, in dem $L \times L \times L = N$ Ising-Spins (also Spins, die die Werte $\sigma_i = \pm 1$ annehmen) in einem einfachen kubischen Gitter angeordnet sind. Die Wechselwirkung der Spins wird bestimmt durch die Bindungen J_{ij} zwischen den Spins σ_i und σ_j , die entweder ferromagnetischen ($J_{ij} = +1$) oder antiferromagnetischen ($J_{ij} = -1$) Charakter haben. Der Charakter der einzelnen Bindungen wird zu Beginn eines Simulationsdurchlaufs zufällig ermittelt, beide Werte sind gleich wahrscheinlich. Um zufällig auftretende untypische Effekte zu vermeiden wird über die Unordnung gemittelt, d.h. es wird über mehrere Simulationsdurchläufe mit unterschiedlicher Verteilung der J_{ij} gemittelt. Jeder Spin wechselwirkt nur mit seinen nächsten Nachbarn.

Die Statik des Systems wird beschrieben durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2)$$

Die Größe des Systems wird mit $L = 32$ ausreichend groß gewählt, dass sich innerhalb der beobachteten Zeitdauer keine Abhängigkeit von der Größe mehr zeigt. (Die Summe läuft nur über nächste Nachbarn, daher die $\langle \cdot \rangle$ Klammern.)

Simulation Simuliert wird dieses Modell mit einem single spin-flip Metropolis Monte-Carlo Algorithmus:

1. Wähle (zufällig oder nach Reihenfolge) einen Spin aus.
2. Invertiere Spin mit Wahrscheinlichkeit

$$W = \min \{1, e^{-\beta \Delta \mathcal{H}}\}, \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (3)$$

$\Delta \mathcal{H}$ ist dabei die Differenzenergie zwischen Ausgangszustand X und Zustand Y , welcher durch das Umliegen des ausgesuchten Spins erreicht würde: $\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(Y)$. Begibt sich das System also in einen energetisch günstigeren Zustand ($\Delta \mathcal{H} < 0$), ist $W = 1$, begibt es sich in einen Zustand höherer Energie ($\Delta \mathcal{H} > 0$) ist die Wahrscheinlichkeit nicht null, fällt aber abhängig von der Temperatur exponentiell mit der Energiedifferenz ab. Bei höheren Temperaturen neigt das System eher zum Übergang in höhere Energien (\rightarrow thermisches Rauschen).

Im Folgenden wird als Zeiteinheit ein MC sweep verwendet; einem MC sweep entsprechen $N = L^3$ Schritte, d.h. im Mittel wird jeder Spin einmal versucht umzudrehen.

Anfangszustand Im Anfangszustand sind alle Spins gleich ausgerichtet

$$t = 0: \quad \sigma_i = \sigma_1; \forall i. \quad (4)$$

Bei einem realen Spinglas kann dies zum Beispiel erreicht werden, indem ein warmes Spinglas in der paramagnetischen Phase unter Einfluss eines starken homogenen Magnetfeldes unter die kritische Temperatur gekühlt wird.

Die Temperatur ist fest vorgegeben und wird während der Simulation konstant gehalten. Sie liegt unter der kritischen Temperatur, das System befindet sich immer in der Spinglas-Phase.

Da der Alterungsprozess, d.h. eine dynamische Entwicklung des Systems auf den Gleichgewichtszustand hin, untersucht werden soll, gibt es keine Äquilibrationphase, die nötig wäre, um eine Gleichgewichtskonfiguration zu erhalten, und die bei Spingläsern sehr lange dauern kann.

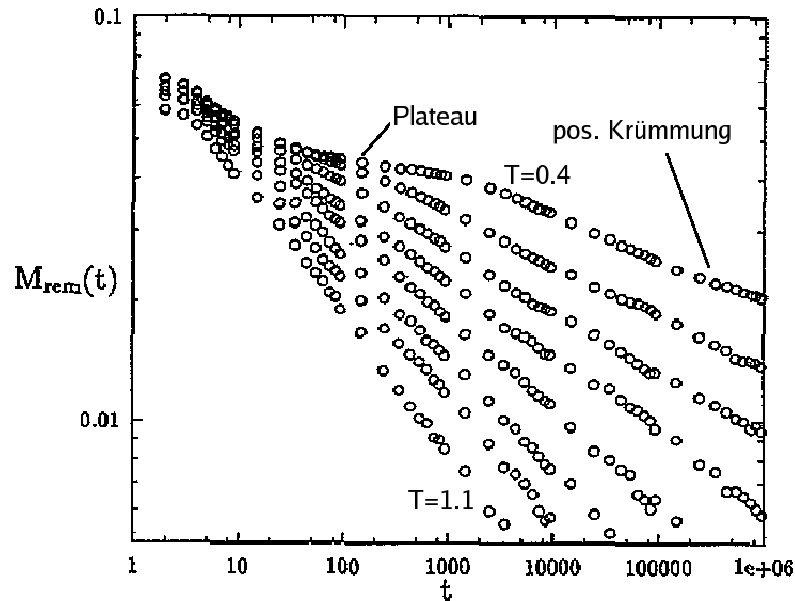


Abbildung 1: Zerfall der remanenten Magnetisierung; die Kurven wurden bei Temperaturen von $T = 1.1$ bis $T = 0.4$ in 0.1er Schritten aufgenommen.

3.2 Die remanente Magnetisierung

Die remanente Magnetisierung beschreibt den Grad der Gleichausrichtung aller Spins und ist definiert als

$$M_{\text{rem}}(t) = \frac{1}{N} \left| \sum_i \overline{\langle \sigma_i(t) \rangle} \right|. \quad (5)$$

Um einen Messwert zu erhalten muss über verschiedene Realisierungen des Systems gemittelt werden:

(X) über das thermische Rauschen: Die Simulation wird unter gleichen Bedingungen mehrfach durchgeführt, lediglich die in den MC Schritten verwendeten Zufallszahlen werden neu ermittelt.

\overline{X} über die Unordnung des Systems: Die Simulation wird mehrfach wiederholt für unterschiedlich ausgewürfelte Bond-Konfigurationen J_{ij} .

Für die im Folgenden präsentierten Ergebnisse wurde für jeden Messwert über mindestens 128 Realisierungen der Unordnung gemittelt.

Theoretische Arbeiten liefern, in Abhängigkeit des verwendeten Modells und gemachter Vereinfachungen, meist Vorhersagen für einen durch ein Potenzgesetz [2] [3] beschriebenen Abfall, aber auch für logarithmische [4] oder exponentielle [5] Abfälle.

Zerfall Der Zerfall der Magnetisierung ist doppelt logarithmisch in Abbildung 1 aufgetragen. Es zeigt sich für nicht zu kleine t ein Potenzgesetz

$$M_{\text{rem}}(t) \propto t^{-\lambda(T)} \quad (6)$$

wobei der Zerfallsexponent mit der Temperatur wächst, von $\lambda(T = 0.4) \approx 0.10$ auf $\lambda(T = 1.1) \approx 0.35$.

Für kleine Temperaturen zeigen sich jedoch Abweichungen von diesem Verhalten. Bei $T \leq 0.5$ bildet sich ein Plateau in der Kurve, der Abfall scheint innezuhalten. Ein Erklärungsversuch dafür ist, dass das System vorübergehend in einem lokalen Energieminimum gefangen ist. Des weiteren erkennt man bei $T = 0.4$, $t > 10^4$ eine leichte positive Krümmung der Kurve, die auf einen langsameren Zerfall hindeutet, evtl. logarithmisch.

Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Daten mit experimentellen Resultaten an Messungen an dem kurzreichweitigem Ising-Spingleas $\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{TiO}_3$ und an bestimmten metallisch-amorphen Spingläsern [6].

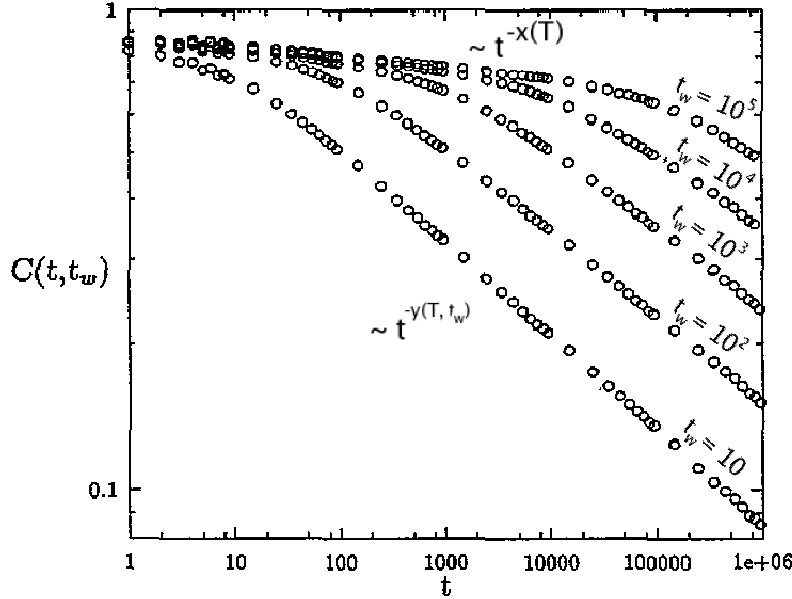


Abbildung 2: Entwicklung der Korrelationsfunktion bei fester Temperatur $T = 0.8$ und verschiedenen Wartezeiten t_w .

3.3 Die Korrelationsfunktion

Der Begriff der remanenten Magnetisierung lässt sich verallgemeinern auf eine Korrelationsfunktion, welche die Unverändertheit der einzelnen Spins gegenüber einem beliebigen früheren Zustand zum Zeitpunkt t_w beschreibt:

$$C(t, t_w) = \frac{1}{N} \left| \sum_i \overline{\langle \sigma_i(t + t_w) \sigma_i(t_w) \rangle} \right| \quad (7)$$

Das System entwickelt sich ab dem vollständig magnetisierten Anfangszustand für eine Zeitdauer t_w (waiting time)¹. Die nun herrschende Konfiguration $\sigma(t_w)$ wird gespeichert und später mit aktuellen Konfigurationen verglichen.

Für den Fall ohne Wartezeit entspricht die Korrelationsfunktion der remanenten Magnetisierung:

$$M_{\text{rem}}(t) = C(t, 0) \quad (8)$$

Zerfall Wie auf Abbildung 2 gut zu erkennen ist, lassen sich die Korrelationskurven in je zwei Bereiche unterteilen:

$t \gg t_w$ Dieser Bereich ist dem Zerfall der remanenten Magnetisierung ähnlich, die Kurven werden gut durch ein Potenzgesetz beschrieben:

$$C(t, t_w) \propto t^{-y(T, t_w)} \quad (9)$$

Die t_w -Abhängigkeit ist nur relativ schwach ausgeprägt, sieht man sich die Abbildung 2 genau an, ist ein leichtes Abfallen von $y(T, t_w)$ für steigende t_w zu erkennen. Für kleinere Temperaturen wird die Abhängigkeit noch schwächer (siehe [1], Fig. 2). Der Exponent liegt zwischen $y(T = 0.8, t_w = 10) \approx 0.19$ und $y(T = 0.8, t_w = 10^3) \approx 0.16$. (Die Exponenten für höhere Wartezeiten lassen sich nur schwer bestimmen, da nur noch wenige Messpunkte im relevanten Bereich vorhanden sind.)

$t \ll t_w$ Dieser Bereich ist ebenfalls durch einen potentiellen Abfall bestimmt, jedoch mit wesentlich kleinerem, von der Wartezeit unabhängigen Exponenten:

$$C(t, t_w) \propto t^{-x(T)} \quad (10)$$

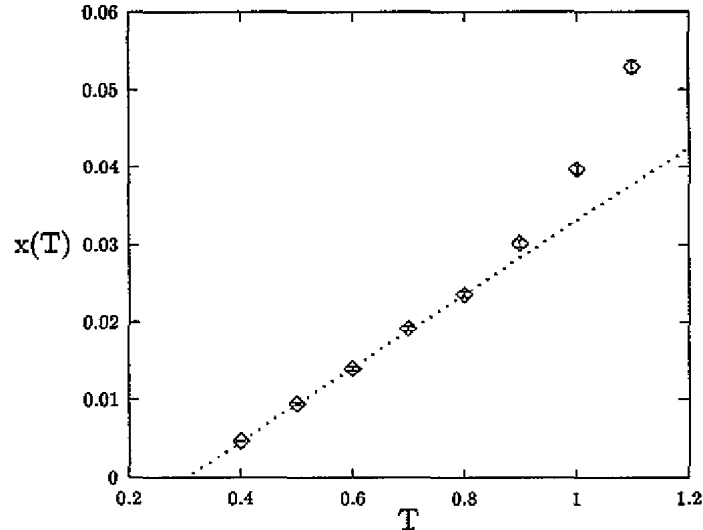


Abbildung 3: Der Exponent des potentiellen Abklingens der Korrelationsfunktion im gleichgewichtsähnlichen Teil für unterschiedliche Temperaturen.

Für den hier aufgetragenen Fall gilt $x(T = 0.8) \approx 0.023$. Die Temperaturabhängigkeit ist in Abbildung 3 aufgetragen. Fittet man die Punkte $T \leq 0.8$ durch eine Gerade und verlängert diese, so zeigt sich, dass bei $T = 0.3$ der Exponent verschwindet $x(0.3) \rightarrow 0$. Dies deutet wieder auf ein Abweichen des Zerfallsverhalten bei niedrigen Temperaturen hin, möglicherweise liegt dort ein logarithmischer Abfall vor.

Vergleicht man die verschiedenen Kurven für $t \ll t_w$, so fällt auf, dass sie sich in ihrer Steigung (und auch im absoluten Verlauf) nicht unterscheiden; für große t_w wächst lediglich der Geltungsbereich dieser Beschreibung, der Kurvenverlauf ändert sich nicht. Dies lässt sich extrapolieren zu der Aussage

$$t \ll t_w : C(t, t_w) \approx \lim_{t_w \rightarrow \infty} C(t, t_w) \quad (11)$$

Der Zustand des Systems nach unendlicher Wartezeit ist der Gleichgewichtszustand, der obige Limes beschreibt also das Kurvenverhalten im Gleichgewicht. Daher kann man sagen, das System verhält sich für $t \ll t_w$ so, als befände es sich im Gleichgewicht, und es lassen sich auf diese Weise in zeitlich begrenztem Rahmen Gleichgewichtsprozesse untersuchen, ohne eine möglicherweise riesige Äquilibrierungszeit abwarten zu müssen.

4 Rejuvenation- und Memory-Effekte in Spingläsern

Dieser Abschnitt basiert auf [7] und befasst sich mit den Rejuvenation- und Memory-„Phänomenen“, welche noch immer Bestandteil der aktuellen Forschung sind.

Welche Beobachtungen stehen hinter diesen Begriffen?

Rejuvenation Rejuvenation (=Verjüngung) beschreibt einen Effekt, der auftreten kann, wenn der Vorgang der Alterung eines Spinglases durch eine abrupte Temperaturänderung unterbrochen wird. Als Folge einer solchen Temperaturänderung scheint der Alterungsprozess plötzlich weit zurückgeworfen zu werden, die mit der Zeit entstandene Ordnung bricht auf und das System entfernt sich plötzlich vom Gleichgewichtszustand.

Zu sehen ist dies in Abbildung 4: Die Probe wird aus der paramagnetischen Phase auf 12K (Spinglasphase) gekühlt, die Spins sind weitgehend zufällig ausgerichtet. Die Alterung setzt ein, der Imaginärteil der

¹Es kann während der waiting time auch ein äußeres Feld aktiviert werden, welches den Zerfall bremst oder beschleunigt.

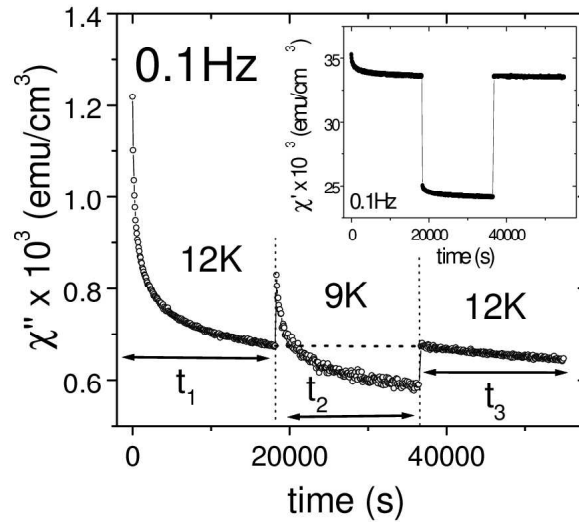


Abbildung 4: Rejuvenation- und Memory Effekt bei der Messung des Imaginärteils der Suszeptibilität χ'' an einem realen Spinglas. χ'' hat einen großen Wert, wenn die Spins bzgl. der J_{ij} ungeordnet, zufällig ausgerichtet sind. Ein ähnlicher, etwas kleinerer Effekt ergibt sich für den Realteil χ' , zu sehen in dem inset. Aus:[8]

Suszeptibilität² χ'' fällt sehr schnell, später flacher; an der Stärke des Abfalls lässt sich also erkennen, wie lange die Alterung schon andauert.

Nach der Zeit t_1 wird die Probe weiter abgekühlt auf 9K, der Abfall wird plötzlich wieder sehr viel steiler, d.h. die Alterung setzt sofort wieder ein, jedoch in einem weit jüngeren Stadium als vor der Abkühlung. Das System hat sich also vom Gleichgewicht entfernt.

Memory-Effekt Nach einiger Zeit unterbrechen die Experimentatoren den Alterungsprozess erneut, indem sie die Temperatur wieder auf 12K anheben. χ'' ändert sich wieder schlagartig, diesmal jedoch beginnt nicht die Alterung wieder von neuem, sondern das System kehrt zurück in den Zustand, in dem es sich befand, als es durch die erste Abkühlung auf 9K unterbrochen wurde. Scheinbar müssen Informationen über diesen Zustand die Verjüngung überlebt haben.

Im Folgenden soll ein Vorschlag zur mikroskopischen Erklärung dieses Verhaltens gegeben werden.

4.1 Domänen

Bisher wurden nur einzelne Ising-Spins und ihre Wechselwirkung untereinander betrachtet, wobei sie nur auf zwei diskrete Weisen wechselwirken können. Um jedoch Erklärungen zu finden, muss man sich mit dem Konzept der Domänen oder Blockspins vertraut machen, welche über effektive Bindungen unterschiedlich stark wechselwirken können. Dazu führen wir zunächst den Begriff der *Frustration* ein:

Frustration Ein System von Ising-Spins heißt *frustriert*, wenn es bedingt durch die Wahl der Bonds keine Spinkonfiguration gibt, die sämtliche Bindungen erfüllt. Die Grundzustandsenergie eines frustrierten Systems ist daher immer höher als die eines nicht frustrierten gleicher Größe.

Domänen In Gebieten ohne Frustration gibt es immer genau zwei Möglichkeiten, sämtliche Bindungen zu erfüllen (umdrehen aller Spins). Wenn sich die Spins aneinander bezüglich der Ordnung ausgerichtet haben, kann sich ein solches frustrationsfreies oder frustrationsarmes Gebiet also in zwei Zuständen befinden, wie dies in Abbildung 5 a) angedeutet ist.

²In dem Experiment wird die Magnetisierung M einer Probe in einem magnetischen Wechselfeld H gemessen und die Proportionalitätskonstante bestimmt: $M = \chi H$. Da Phasenverschiebungen zwischen H und M auftreten ist χ eine komplexe Größe. χ'' ist ihr Imaginärteil.

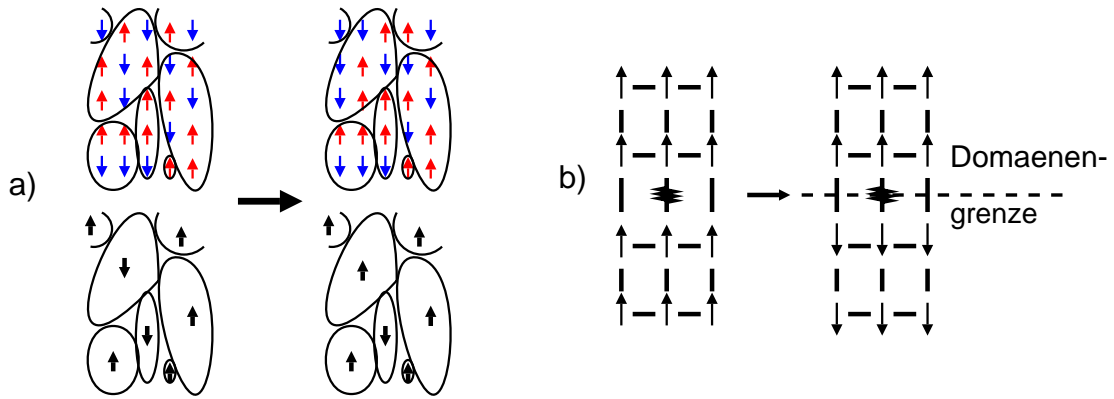


Abbildung 5: a) Domänen in Spingläsern; Spins in Domänen sind nicht alle gleich ausgerichtet, sondern die Ordnung befriedigend. b): Bildung von Domänengrenzen in Bereichen großer Frustration (der Einfachheit wegen nur eine antiferromagnetische Bindung zwischen lauter ferromagnetischen).

Domänengrenzen Domänengrenzen entstehen dementsprechend entlang von Bereichen höherer Frustration. Der in Abbildung 5 b) gezeigte Spinglas Ausschnitt stellt größtenteils ferromagnetisch verbundene Ising-Spins da. Das System links befindet sich im Grundzustand, obwohl die eine antiferromagnetische Bindung nicht erfüllt ist. Wird es nun aber auf Grund äußerer Einflüsse für das Gesamtsystem energetisch günstiger, die Spins in der untersten Reihe zu flippen, die in der obersten Reihe jedoch nicht, so muss es irgendwo einen Übergang geben. Dieser entsteht natürlich genau dort, wo es das System am wenigsten Energie kostet, nämlich dort, wo die Bindungen im Mittel am schwächsten sind. In Abb. 5 b) rechts leisten nur zwei Bindungen einen positiven Beitrag zur Gesamtenergie, eine (die antiferromagnetische) leistet einen negativen. Damit ist die eingezeichnete Linie eine Art Sollbruchstelle, hier bilden sich Domänengrenzen.

Bei endlicher Temperatur macht die Beschreibung einzelner Spins keinen Sinn mehr, da sie zufällig umklappen können. Ein stabiles Bild erhält man im thermodynamischen Limes, also durch Vergrößerung der Betrachtung, so dass sich die mikroskopischen thermischen Fluktuationen wegmitteln, die grobe Ordnung der Domänen aber erhalten bleibt. So können die Domänen als durch unterschiedlich starke (aber zeitlich näherungsweise konstante) Bindungen wechselwirkende Blockspins angesehen werden.

4.2 Temperaturabhängigkeit der effektiven Bindungen

Es wird sich nun zeigen, dass diese Bindungen zwischen Blockspins auch noch stark temperaturabhängig sein können. Zur Veranschaulichung betrachten wir zunächst zwei einfache Systeme:

Lineare Kette Gegeben sei eine lineare Kette von Spins, die zwei (Block-) Spins σ_1 und σ_2 miteinander verbindet³ wie in Abbildung 6 gezeigt. Sämtliche Einzelbindungen $J_{ij} = J > 0$ seien ferromagnetisch, so gibt es zwei Grundzustände für das System, in dem alle Spins s und σ gleich ausgerichtet sind. Die effektive Bindung zwischen σ_1 und σ_2 kann man nun definieren durch:

$$\exp(\beta J_{\text{eff}}(T) \sigma_1 \sigma_2) \propto \sum_{s_1 \dots s_{n-1} = \pm 1} \exp \left(\beta J \sigma_1 s_1 + \beta J \sigma_2 s_{n-1} + \sum_{i=1}^{n-2} \beta J s_i s_{i+1} \right) \quad (12)$$

Die effektive Bindung ist natürlich weiterhin ferromagnetisch, jedoch nimmt mit steigender Temperatur das thermische Rauschen zu, und damit die Wahrscheinlichkeit, dass einer der s -Spins umklappt, und dieser „Fehler“ weitergereicht wird bis σ_2 . Die Korrelation zwischen σ_1 und σ_2 wird also mit höherer Temperatur abnehmen, und das heißt nichts anderes, als dass die effektive Bindungsstärke J_{eff} sinkt.

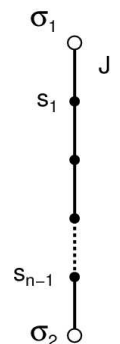


Abbildung 6:

³Streng genommen müssen es für dieses Beispiel nicht unbedingt Blockspins sein, wir werden jedoch von nun an keine Einzelspins mehr betrachten.

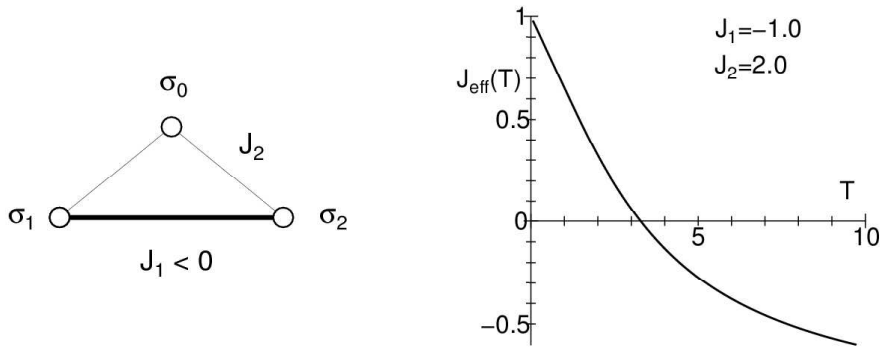


Abbildung 7: Links: frustrierte Struktur aus ferromagnetischer linearer Kette (T -abhängig) und direkter antiferromagnetischer Bindung (T -unabhängig). Rechts: Temperaturabhängigkeit der effektiven Bindung zwischen σ_1 und σ_2 .

Frustrierte Struktur Zu einer ferromagnetischen linearen Kette bestehend aus nur zwei Einzelbindungen der Stärke $J_2 > 0$ fügen wir nun noch eine direkte antiferromagnetische Bindung $J_1 = -\frac{1}{2}J_2$ hinzu, wie in Abb. 7 (links) zu sehen ist.

$$e^{\beta J_{\text{eff}}(T) \sigma_1 \sigma_2} \propto \sum_{\sigma_0 = \pm 1} e^{\beta J_1 \sigma_1 \sigma_2 + \beta J_2 (\sigma_1 + \sigma_2) \sigma_0} \quad (13)$$

Bei niedrigen Temperaturen überwiegt die ferromagnetische Kette, da ihre Einzelbindungen stärker sind als die antiferromagnetische Bindung. Steigt die Temperatur, fällt jedoch die Bindungskraft der Kette, während die direkte Kette natürliche temperaturunabhängig ist. Letztendlich überwiegt der antiferromagnetische Teil und die effektive Kopplung ändert ihr Vorzeichen. Der Verlauf der Bindungsstärke ist in Abb. 7 (rechts) gezeigt und kann mit (13) beschrieben werden durch:

$$J_{\text{eff}}(T) = J_1 + \frac{k_B T}{2} \ln \left[\cosh \left(2 \frac{J_2}{k_B T} \right) \right] \quad (14)$$

Bindungen lassen sich auf beliebig komplizierte Weise kombinieren, wodurch sich beliebig komplizierte Temperaturabhängigkeiten ergeben.

Eine Änderung der Temperatur eines Spinglases kann also eine vollkommene qualitative Änderung der Ordnung zur Folge haben. Dies ist ein chaotischer Effekt, eine kleine Änderung eines Parameters bewirkt ein vollkommen neues Verhalten des Systems. Darauf werde ich später noch genauer eingehen.

4.3 Memory Spots

Die Domänen sind natürlich nicht völlig frei von Frustration, daher kann es in ihnen kleine Bereiche geben, in denen der Frustrationsgrad noch bedeutend niedriger ist. Dort sind die effektiven Bindungen besonders stark und kaum temperaturabhängig⁴. Abb. 8 zeigt ein einfaches Beispiel dafür:

In einem (der Einfachheit wegen) ferromagnetischen Gitter befindet sich eine wesentlich stärkere Bindung ($J_1 \gg 3J_0$). Sind alle Spins gleich ausgerichtet, befindet sich das System in einem Grundzustand (a). Ändert sich die Ordnung im Spinglas aufgrund einer Abkühlung nun derart, dass ein Wechsel in den anderen Grundzustand (umdrehen aller Spins) energetisch günstiger wäre, wechseln zwar die äußeren Spins ihre Ausrichtung, nicht aber die stark gebundenen. Dieser Zustand besitzt zwar eine höhere Energie als E_0 , ist aber metastabil, da für einen Übergang in den neuen Grundzustand erst ein energetisch noch ungünstigerer Zustand (c) durchschritten werden muss. Die Lebensdauer des metastabilen Zustandes hängt exponentiell von der Energiebarriere $\Delta E = \mathcal{H}(b) - \mathcal{H}(c) = 2J_1 - 6J_0 > 0$ für $J_1 \gg 3J_0$ ab:

$$\tau_{\text{mem}} \propto \exp \left(\frac{\Delta E}{T} \right) \quad (15)$$

Wird das System außerdem abgekühlt, d.h. ist T zusätzlich klein, dann ist τ_{mem} sehr groß.

⁴Ich habe bisher immer von den effektiven Bindungen zwischen den Domänen gesprochen. Die Begriffe „Domäne“ und „Blockspin“ müssten eigentlich in sinnvoller Weise unterschieden werden, doch es ist nicht wirklich genau bekannt, wie solche Prozesse ablaufen, so dass es keine exakte Vergrößerungsvorschrift gibt. Ist der Frustrationsgrad innerhalb einer Domäne nicht homogen, so kann man auch diese wieder in Blockspins zerlegen.

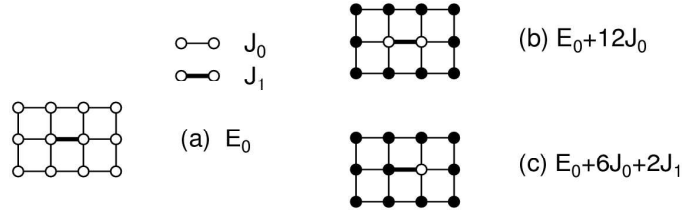


Abbildung 8: Vereinfachter Memory Spot im Grundzustand (a), metastabilem Zustand (b) und hochenergetischer Übergangszustand (c); alle Bindungen sind ferromagnetisch, $J_1 \gg 3J_0$.

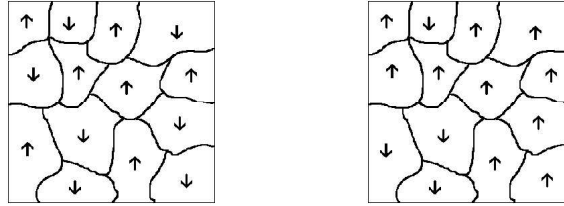


Abbildung 9: Links: Schnelle Domänenbildung, jedoch Ausrichtung der Domänen untereinander zufällig. Rechts: Wesentlich später haben sich auch die Domänen aneinander ausgerichtet.

4.4 Rejuvenation- und Memory Effekt

Mit diesen Konzepten können wir jetzt versuchen, einen Ablauf wie er zu Beginn dieses Abschnittes beschrieben wurde, zu erklären.

Alterung Wir starten ein Gedankenexperiment mit einem zweidimensionalen Spinglas, dessen Spins völlig zufällig ausgerichtet sind, z.B. indem die Probe aus der paramagnetischen in die Spinglas-Phase abgekühlt wird. Die Alterung setzt ein, die Spins beginnen sich aneinander bzgl. der herrschenden Ordnung $J_{ij,\text{eff}}(T_1)$ auszurichten. In sehr kurzer Zeit bilden sich Domänen, innerhalb derer die Ordnung recht hoch ist, die jedoch untereinander kaum ausgerichtet sind, wie in Abbildung 9 (links) illustriert.

Die Bindungen zwischen den Domänen sind weit schwächer, es dauert daher sehr viel länger, sie untereinander ausrichten zu lassen, wie es in der rechten Abbildung skizziert ist. Die eingezeichneten Pfeile stellen nun Memory Spots innerhalb der Domänen her. Die Lebensdauer der Memory Spots bei der momentanen Temperatur T_1 sei kürzer als die der Domänen, d.h. die Spots richten sich an den Domänen aus.

Rejuvenation Nun wird die Temperatur gesenkt auf $T_2 < T_1$ und es kommt zu einer vollständigen qualitativen Änderung der Ordnung $J_{ij,\text{eff}}(T_2)$. Die Spins haben sich nicht geändert, jedoch bezüglich der neuen Ordnung ist ihre Ausrichtung statistisch gesehen mit einer zufälligen (wie im Anfangszustand) vergleichbar. Die Alterung setzt wieder ein, es bilden sich Domänen, diesmal jedoch an anderen Stellen und evtl. in anderen Größen, denn nun sind andere Bindungen schwach. Die Memory Spots allerdings haben ihre Bindungsstärke kaum geändert, sie befinden sich bei der tieferen Temperatur in langlebigen metastabilen Zuständen. Sie stellen nun nichts weiter als lokale Unreinheiten in der sich bildenden Ordnung dar.

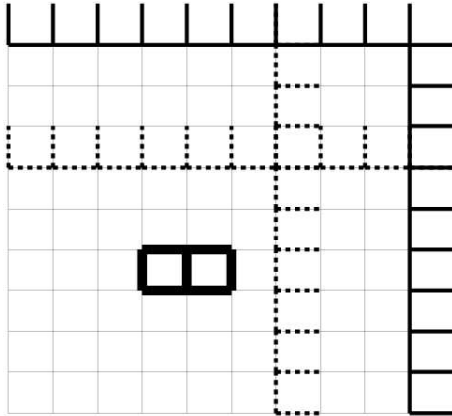
Memory Effekt Die Temperatur wird wieder erhöht auf T_1 . Die momentane Spinausrichtung wirkt auf die nun wieder gültige alte Ordnung $J_{ij,\text{eff}}(T_1)$ wie zufällig, die Alterung setzt ein und es bilden sich sehr schnell Domänen. Innerhalb der Domänen dienen nun die Memory Spots als Kristallisationskeime, an denen sich die Domänen ausrichten, und das in wesentlich kürzerer Zeit als die Entwicklung beim ersten Mal, ohne Memory Spots gedauert hat. Für die Größenordnung dieses Unterschieds wird im nächsten Abschnitt 4.5 ein Beispiel gegeben.

Was wir letztendlich erhalten ist eine Spinkonfiguration, die der Konfiguration vor der Abkühlung sehr ähnlich ist.

4.5 Simulation der Effekte mittels eines toy models

Dieser Ablauf soll nun anhand einer einfachen Simulation nachvollzogen werden.

Die beschriebenen Effekte sind auf relativ spezielle Strukturen in dem Spinglas bestehend aus Ising-Spins angewiesen. Reale Spingläser sind groß genug, damit diese Strukturen auch bei zufälliger Wahl der J_{ij} ausreichend oft auftreten. Simulierbar sind solch große Systeme nicht, daher muss man etwas nachhelfen, es werden die benötigten Strukturen künstlich erzeugt.



Die Autoren von [7] haben dazu eine Basiszelle definiert (Abb. 10), die aus 10×10 Blockspins und temperaturabhängigen Bindungen sowie einem temperaturunabhängigen Memory-Spot in der Mitte (J_3) besteht. Bei der Ausgangstemperatur T_1 sind sämtliche Bindungen ferromagnetisch, die Bindungen J_1 und J_2 sollen je nach Temperatur die Domänengrenzen darstellen.

5×5 dieser Basiszellen aneinandergereiht bilden das Spinglas. Die Simulation startet mit einer zufälligen Ausrichtung der Blockspins, die Zeitmessung erfolgt in MC Sweeps.

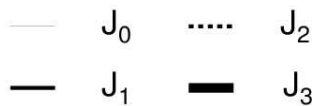


Abbildung 10: Basiszelle aus 10×10 Blockspins und temperaturabhängigen Bindungen

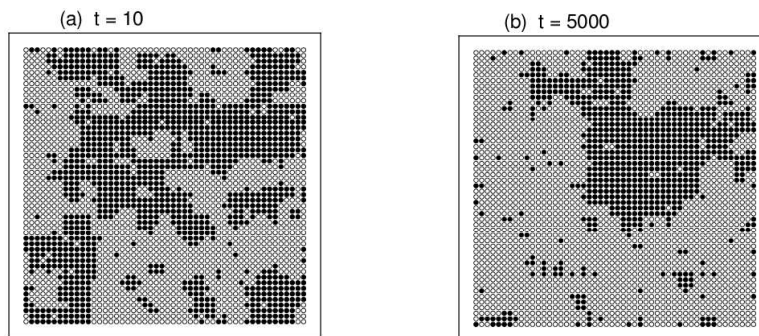


Abbildung 11: Domänenbildung (a) nach kurzer Zeit und Domänenausrichtung (b) nach sehr viel längerer Zeit

Alterung Nach 10 Zeitschritten sind bereits deutlich Domänen ungefähr der Größe der Basiszellen zu erkennen (Abbildung 11 links). Bis die Domänen sich jedoch aneinander ausgerichtet haben und im wesentlichen nur noch zwei große Domänen existieren vergeht sehr viel mehr Zeit (Abbildung 11 rechts).

Rejuvenation Eine Abkühlung auf $T_2 < T_1$ nach $t = 5000$ bewirkt nun eine Änderung der Ordnung: In der Basiszelle wird das Hauptgitter J_0 antiferromagnetisch (und die Domänengrenzen werden leicht verschoben, was jedoch nicht ohne weiteres auffällt). Die momentane Spinordnung ist bezüglich der antiferromagnetischen Ordnung quasi zufällig, Alterung setzt ein und in sehr kurzer Zeit haben sich neue Domänen gebildet. Abb. 12 (a) zeigt das Gitter in der neuen Ordnung, in dem sehr gut die Memory-Spots zu erkennen sind, die die Rejuvenation überlebt haben. Um Domänen besser erkennen zu können kann man das Bild durch die „antiferromagnetische Brille“ betrachten, die jeden zweiten Spin invertiert. Das so transformierte Bild ist in 12 (a') zu sehen.

Nach längere Zeit der Alterung hat sich eine qualitativ andere Domänenstruktur ausgebildet, die Memory-Spots sind als lokale Unreinheiten zu erkennen: 12 (b').

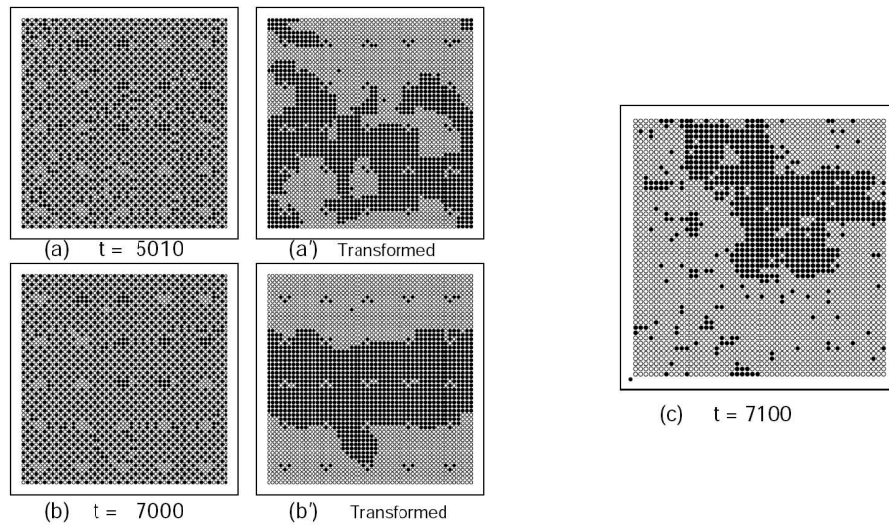


Abbildung 12: Antiferromagnetische Ordnung: Domänenbildung (a) und Domänenausrichtung (b), (a') und (b') auf antiferromagnetisches Muster transformiert. (c) Wiederherstellung der alten Struktur durch Memory Effekt

Memory-Effekt Die Erwärmung des Systems zurück auf T_1 bewirkt wieder eine Verjüngung, nach der sich schnell Domänen bilden, ähnlich wie in 11 (a). Die Memory-Spots lassen die Domänen sich jedoch sehr schnell an der alten Struktur ausrichten, so dass sich eine Struktur bildet, die der vor der Abkühlung sehr ähnlich sieht (vergleiche Abb. 12 (c) mit 11 (b)). Die Bildung dieser Ordnung hat dank der Memory-Spots nur 100 MC sweeps gedauert, gegenüber 5000 sweeps ohne Memory-Spots.

Die Simulation unterstützt also (im Rahmen dieses beschränkten toy-models) die These, dass temperaturabhängige Bindungen zwischen Blockspins zu Rejuvenation und Memory-Effekten führen können.

4.6 Ausblick

Realistische Simulationen erfordern um Größenordnungen größere Systeme, wären also heutzutage sehr ineffektiv bzw. überhaupt nicht durchzuführen.

Komplexe reale Spingläser zeigen noch komplizierteres Verhalten. So können Memory-Spots verschiedener Größe bei verschiedenen Temperaturen „beschrieben“ werden, wie an der Messung an dem Spinglas $\text{CdCr}_{1.7}\text{In}_{0.3}\text{S}_4$ in Abbildung 13 zu sehen ist. Dort kühlen die Experimentatoren eine Probe stufenweise ab (in 2K Schritten zwischen denen jeweils 2000s Pause liegen) und messen wieder den Imaginärteil der Suszeptibilität. Der zeitliche Verlauf des Experiments ist in dem inset zu sehen.

In einem bestimmten Bereich bewirkt jeder Abkühlungsvorgang eine erneute Verjüngung des Systems, an dem sägezahnförmigen Verlauf der dünnen Kurve „cooling with aging“ zu erkennen. Anschließend wird die Probe kontinuierlich (mit 0.001K/s) erhitzt, doch χ'' entwickelt sich nicht kontinuierlich, sondern zeigt deutlich lokale Minima genau an den Temperaturen, bei denen bei

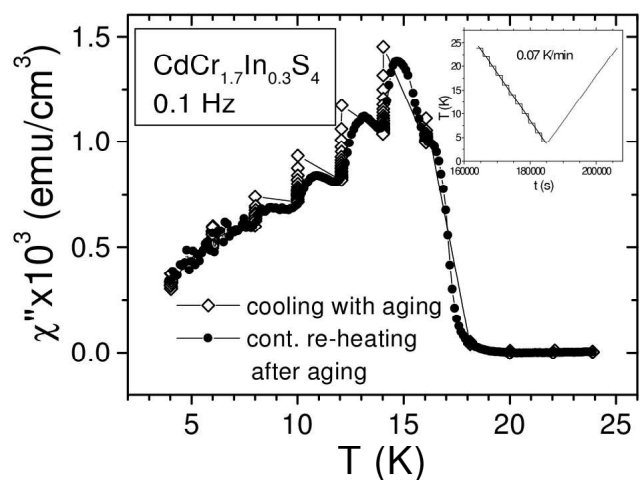


Abbildung 13: Messung an realem Spinglas zeigt mehrere Rejuvenation/Memory Schritte bei verschiedenen Temperaturen. Aus: [8]

der Abkühlung pausiert wurde, das System also Zeit hatte, eine Ordnung zu finden und sich diese via Memory-Spots zu merken.

Literatur

- [1] H. Rieger. Nonequilibrium dynamics und aging in a three dimensional ising spin glass model. *J. Phys. A*, 26(L615), 1993.
- [2] K. H. Hoffmann P. Sibani. *Phys. Rev. Lett.*, 63(2853), 1989.
- [3] J. P. Bouchaud. *J. Physique I*, 2(1705), 1992.
- [4] D. S. Fisher und D. A. Huse. *Phys. Rev. B*, 38(373), 1988.
- [5] E. Abrahams und P. W. Anderson R. G. Palmer, D. L. Stein. *Phys. Rev. Lett.*, 53(958), 1984.
- [6] P. Nordblad L. Lundgren und H. Chen P. Granberg, P. Svedlindh. *Phys. Rev. B*, 57(483), 1987.
- [7] S. Miyashita und E. Vincent. A microscopic mechanism for rejuvenation and memory effects in spin glasses. *Eur. Phys. J. B*, 22(2), 2001.
- [8] V. Dupuis. *Ph.D. thesis*.

Abbildungen

Die Abbildungen 1, 2, 3 entstammen [1].

Die Abbildungen 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 entstammen [7] (wobei Abb. 4 und 13 zitiert werden aus [8]).

Abbildung 5 stammt vom Autor.