Ordnung und Unordnung

oder

Dipolare Gläser

Zur Plastik im Kirchhoff-Institut für Physik der Universität Heidelberg

Franz Wegner

Institut für Theoretische Physik

Universität Heidelberg

Juli 2004

Dieser Text ist Heinz Horner und Siegfried Hunklinger gewidmet. Anlass ist die Erstellung der Plastik 'Order and Disorder' in Form zweier Großmodelle eines ferromagnetisch inspirierten geordneten Festkörpers und eines ungeordneten Spinglases, die anlässlich der Emeritierung von Heinz Horner und Siegfried Hunklinger erstellt werden. Mit diesen soll zum Ausdruck gebracht und in Erinnerung gehalten werden, dass beide auf dem Gebiet der geordneten und ungeordneten Substanzen geforscht und gelehrt haben. Zugleich sollen die Plastiken ein Lehrmodell für unsere Studenten sein.

Dass ich mich im Vorfeld der Erstellung der Plastik damit befasst habe, lag daran, dass es Karlheinz Meier und mich vorab interessierte, was man wohl von einem System von Magneten, die frei in einer Ebene rotieren können, an Ordnung oder Unordnung erwarten kann. Dabei gehe ich davon aus, dass ich für Heinz Horner und Siegfried Hunklinger Eulen nach Athen oder besser gesagt vom Philosophenweg ins Kirchhoff-Institut trage und sie über manches schmunzeln, was sie selber besser wissen. Aber vielleicht freuen sie sich über das eine oder andere Bild. Auch ist der Text mehr für den interessierten Laien und weniger für unsere Jung-Emeriti gedacht.

Einführung

Die makroskopisch wirkenden Kräfte zwischen den Magneten sind nicht identisch mit den Kräften, die in den Magneten wirken und sie erst zu Magneten machen. In den Magneten sind es Austausch-Wechselwirkungen, die auf atomaren Abständen zwischen den elementaren magnetischen Momenten wirken und diesen ihre Ordnung geben. Diese kann ferromagnetisch sein, dann ordnen sich die Elementarmagnete parallel zueinander und bewirken das makroskopisch beobachtbare magnetische Verhalten. Sie kann aber auch so sein, dass es benachbarte Elementarmagnete vorziehen, sich antiparallel zu ordnen. Dann spricht man von einem Antiferromagneten. Er zeigt keine makroskopische magnetische Wirkung nach außen hin. Jedoch kann man mit Streuexperimenten zum Beispiel mit der Streuung von Neutronen ihre Struktur erkunden. Auch findet man bei Ferromagneten und Antiferromagneten typische Anomalien sowohl in der spezifischen Wärme wie auch in der Suszeptibilität (d.h. in der Magnetisierung auf Grund eines angelegtes Magnetfelds), wenn man vom geordneten Zustand bei tiefen Temperaturen zum ungeordneten Zustand bei hohen Temperaturen übergeht. Je höher die Temperatur ist, desto mehr wird die Ordnung durch die Temperaturbewegung gestört. Die Temperatur, bei der ein Ferromagnet seinen Magnetismus verliert, heißt Curie-Temperatur. Die entsprechende Temperatur bei einem Antiferromagneten wird als Néel-Temperatur bezeichnet.

Es gibt auch Substanzen, in denen magnetische Momente in verdünnter Form und an zufälligen Gitterplätzen auftreten. Hier wird bei tiefen Temperaturen die sogenannte Ruderman-Kittel-Wechselwirkung wichtig, die je nach Abstand versucht, die Elementarmagnete parallel oder antiparallel auszurichten. Das bringt ein Tripel von Magneten leicht in die Verlegenheit, dass sie sich nicht alle optimal zueinander ausrichten können, z.B. wenn ein Magnet parallel mit den beiden anderen stehen möchte, diese beiden aber antiparallel zueinander. In diesem frustrierenden Fall spricht der Physiker von Frustration und meint durchaus etwas Anderes als der Psychologe. Solche Systeme bezeichnet man auch als Spingläser, wobei diese nicht das sind, was man gemeinhin unter Gläsern versteht, d.h. keine harten durchsichtigen nichtkristallinen Körper. Was sie mit konventionellen Gläsern gemeinsam haben, werden wir unten kurz erklären.

Zu diesen Wechselwirkungen kommt die aus dem Elektromagnetismus bekannte Dipolwechselwirkung. Sie ist immer anwesend, aber in der Regel mikroskopisch recht schwach und spielt nur in zwei Fällen eine wesentliche Rolle: einerseits kann sie bei Fehlen anderer magnetischer Wechselwirkung bei recht tiefen Temperaturen zu Antiferromagnetismus führen. Zum anderen führt sie wegen ihrer Langreichweitigkeit in Ferromagneten zur Domänen-Bildung. Für das System ist es energetisch günstiger, wenn nicht alle Elementarmagnete parallel ausgerichtet sind, sondern diese im besonderen am Rand sich anders orientieren können.

Zwischen den makroskopischen Magneten wirkt allein die Dipol-Wechselwirkung (wir nehmen an, dass zum Beispiel eine Quadrupol-Wechselwirkung vernachlässigbar ist.) Wir lassen bereits unsere Studenten ausrechnen, dass sich zwei Dipole vorzugsweise parallel in Richtung ihrer Verbindunglinie einstellen,

wobei beide Richtungen gleichberechtigt zugelassen sind (Figur 1). Es gibt weitere Gleichgewichtslagen, aber diese sind instabil. Eine kleine Auslenkung genügt, diese aus der Gleichgewichtslage herauszutreiben. Hat man nun drei Magnete zu einem gleichseitigen Dreieck angeordnet, so ist es nicht möglich, dass sich diese paarweise in Richtung ihrer Verbindungslinien anordnen. Damit hat man hier Frustration. Tatsächlich müssen die Magnete einen Kompromiss eingehen (Figur 2). Somit bewirkt auch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung eine Frustration.

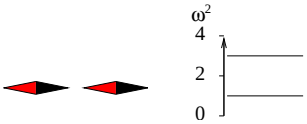


Fig. 1: Zwei Dipole in stabiler Gleichgewichtslage mit Energie $E = -2$ und Frequenz-Spektrum

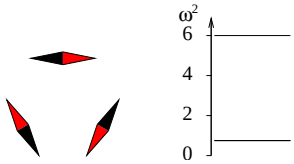


Fig. 2: Drei Dipole in stabiler Gleichgewichtslage mit Energie $E = -3.75$ und Frequenz-Spektrum. Die höhere Frequenz ist zweifach entartet.

Erhöht man nun die Anzahl der Magnete, so tritt leicht die Situation ein, dass es nicht nur eine, sondern mehrere stabile Gleichgewichtslagen gibt, d.h. kleine Auslenkungen lassen das System um die Gleichgewichtslagen schwingen, treiben das System aber nicht von dieser Lage weg. Dies stellt sich sowohl für reguläre Gitter wie auch für Zufallsgitter heraus. Einige dieser numerisch gewonnenen Ergebnisse möchte ich hier vorstellen.

Bevor ich genauer angebe, wie die Berechnung durchgeführt wurde, sei nur das Folgende gesagt: Es wurde - ausgehend von 1000 oder 3000 verschiedenen zufällig gewählten Anfangsausrichtungen der Magnete - der Reihe nach ein Magnet nach dem anderen so gedreht, dass sich beim Festhalten der anderen die Energie soweit wie möglich absenkt. Nach einem solchen Durchgang sind aber die anfänglich ausgerichteten Magnete nicht mehr optimal ausgerichtet. Daher wird das Verfahren wiederholt und solange fortgesetzt bis die Änderung der Energie vernachlässigbar klein ist. Die Energien wurden nun miteinander verglichen. Stimmen sie praktisch überein und auch das Frequenzquadrat der langsamsten Schwingung um diesen Zustand, so wurde angenommen, dass sie zu äquivalenten Gleichgewichtslagen gehören, d.h. wir vermuten, dass die beiden Zustände bis auf Symmetrie-Operationen überein stimmen. Eine derartige Symmetrie-Operation ist stets die Drehung aller Magnete um 180^0, also Vertauschung aller Süd- mit allen Nordpolen. Als äquivalent betrachten wir aber auch Spiegelungen oder Rotationen des Gitters, die das Gitter wieder in sich überführen.

Man muss dabei tatsächlich so sorgfältig vorgehen. Es kann passieren, dass wir beim Iterieren nahe eines Sattelpunktes der Energie kommen. Das System ist dann (fast) im Gleichgewicht, aber nicht im stabilen; eine kleine Störung genügt und das System bewegt sich anfangs langsam dann immer schneller aus dem Gleichgewicht. Anfangs waren die Kriterien für die Konvergenz noch nicht so scharf gesetzt wie jetzt. Da erhielt ich im Dreiecksgitter (1,1) mit sieben

Gitterpunkten bei fünf von tausend Läufen den instabilen Zustand (Figur 3b) und 995 mal den stabilen Zustand niedrigster Energie (Figur 3a). Da die fünf instabilen Zustände nicht exakt im Gleichgewicht waren, entfernten sie sich bei weiterer Iteration von diesem und gelangten schließlich in den stabilen Zustand.

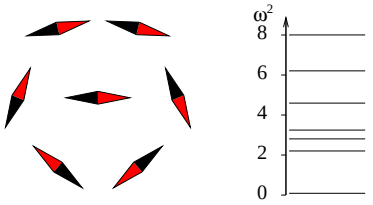


Fig. 3a: Stabiler Zustand mit Energie $E = -13.57739$ und Frequenz-Spektrum, niedrigstes Frequenz-Quadrat $\omega_1^2 = 0.08819$

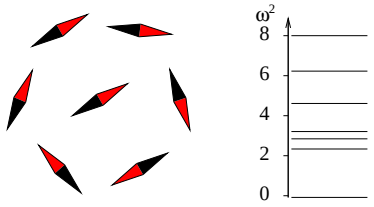


Fig. 3b: Instabiler Zustand mit Energie $E = -13.56984$ und Frequenz-Spektrum, niedrigstes Frequenz-Quadrat $\omega_1^2 = -0.08333$

Wir sehen, dass ein Magnet von sechs anderen umgeben ist. Würde er fehlen, dann würden sich die Magnete wie in Figur 4 anordnen. In der Mitte hebt sich die Wirkung aller Magnete auf. Fügt man nun den Magneten in der Mitte ein, so beeinflusst er die umgebenden Magnete und verdreht diese etwas. Diese üben dann aber auch ihrerseits wieder eine Kraft auf den zentralen Magneten aus. Es stellt sich heraus, dass diese etwas stärker ist, wenn der mittlere Magnet in Richtung der Verbindungslinie zwischen zwei Magneten ausgerichtet ist und etwas schwächer, wenn er in die Zwischenrichtung weist. So entsteht ein kleiner Energieunterschied. Das bedeutet aber, dass beim Drehen des inneren Magneten die Energie abwechselnd ein Minimum und ein Maximum hat.

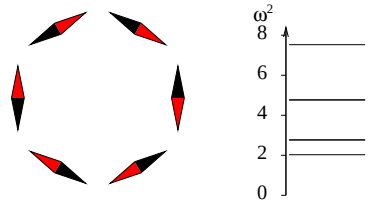


Fig. 4: Stabiler Zustand mit Energie $E = -12.31838$ und Frequenz-Spektrum, niedrigstes Frequenz-Quadrat $\omega_1^2 = 2.02970$, die mittleren beiden Frequenzen sind zweifach entartet

Die zu jedem Gitter gefundenen Energien E der Gleichgewichtszustände werden in einem 'Strich-Code'-Bild gezeigt, ebenso auch die aufsummierte Anzahl von Zuständen $N(E)$ bis zur jeweiligen Energie E. Man sieht, dass in den meisten Fällen die Anzahl der verschiedenen Zustände mit der Energie zunimmt, in einem mittleren Bereich recht dicht wird, und mit Anwachsen der Energie dann wieder abnimmt.

Weiter zeige ich die Einstellung (Konfiguration) der Magnetnadel für einige ausgewählte Gleichgewichts-Zustände und zwar für die sechs niedrigsten, die drei höchsten und soweit sie davon verschieden sind für die sechs Energien, die ich bei den 1000 oder 3000 Versuchen am häufigsten angetroffen habe. Man sieht aus der Rechnung, dass man durchaus nicht immer den energetisch tiefsten Zustand findet. Gerade das ist charakteristisch für Gläser, dass sie in bestimmten Gleichgewichtszuständen einfrieren und durchaus nicht immer beim Abkühlen den niedrigsten Energie-Zustand erreichen. Unter Gläser werden dabei nicht

nur die allen bekannten durchsichtigen Gläser verstanden, sondern auch andere Festkörper, zum Beispiel magnetische, die diese Eigenschaft vieler lokaler Energieminima haben.

Verdreht man die Konfiguration der Magnete etwas aus dem Gleichgewicht, so beginnen sie um die Gleichgewichtslage zu schwingen. Bei bestimmten Auslenkungen (Eigenschwingungen) schwingen alle im Takt oder Gegentakt. Dies sind dann Magnetisierungswellen, im Festkörper auch Spinwellen. In einem gleichmäßig geordneten System können sie sich als ebene Wellen durch den ganzen Bereich ausbreiten. Es gibt jedoch auch Wellen, die sich am Rand (Oberflächenwellen) ausbreiten. Ist das System (z.B. seine Magnetisierung) nicht gleichmäßig geordnet, so können die Wellen auch in einem Bereich lokalisiert sein. Die Form der Wellen haben wir hier nicht analysiert, aber wir haben das Frequenzspektrum, genauer ihre Frequenzquadrate ω^2 ebenfalls in Form eines 'Strich-Code-Bildes' für die ausgewählten Konfigurationen angegeben. Ist das Gleichgewicht stabil, dann sind alle Frequenz-Quadrate positiv. Ist es jedoch instabil, dann ist eines oder mehrere negativ. Dies ist der Fall für den instabilen Zustand, Fig. 3b, bei dem das niedrigste ω^2 negativ ist, nämlich -0.083327.

Ist das niedrigste Frequenzquadrat sehr klein, dann pendelt das System nur sehr langsam um seine Gleichgewichtslage, ist also nicht sehr stabil. Allerdings müsste man zusätzlich wissen, wie stark die Auslenkung sein darf, damit das System nicht mehr in die Gleichgewichtslage zurückkehrt, um seine Stabilität voll beurteilen zu können.

Wer sich für die Details der Rechnung nicht interessiert, sollte die nächsten beiden Abschnitte überspringen.

Berechnung des Energiespektrums

Wir betrachten magnetische Dipole $\mathbf{m}_i$ auf einem Gitter, die sich in der Gitterebene ausrichten können. Die Gitterpunkte seien durch $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ gegeben. Wir suchen Gleichgewichtslagen dieser Dipole, indem wir zunächst für die Auslenkung der Dipole Zufallsrichtungen vorgeben, und dann die Dipole in tiefere Energien relaxieren lassen, indem wir einen Dipol nach dem anderen in Richtung des jeweils auf ihn einwirkenden Felds $\mathbf{B}$ ausrichten. Die Wechselwirkungs-Energie zwischen zwei Magneten $\mathbf{m}_i$ und $\mathbf{m}_j$ ist gegeben durch

$$U_{ij} = \frac{1}{r_{ij}^3} \left((\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) \right) \tag{1}$$

mit dem Abstand $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ zwischen den Dipolen und dem Richtungsvektor $\mathbf{e}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/r_{ij}$ zwischen den beiden Dipolen. Die gesamte Energie ergibt sich zu

$$U = \sum_{i,j|i<j} U_{ij} \tag{2}$$

und das auf $\mathbf{m}_i$ wirkende Feld

$$\mathbf{B}_i = \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}^3} \left(-\mathbf{m}_j + 3\mathbf{e}_{ij} (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) \right). \tag{3}$$

Wir iterieren dies jeweils für alle Dipole zehnmal durch und vergleichen die Energie vor diesen und nach diesen Iterationen. Wir verwenden dabei dimensionslose Einheiten. Das heißt die Energie zwischen zwei benachbarten Dipolen, die parallel zueinander und parallel zu ihrer Verbindungsgeraden ausgerichtet sind, sei -2. Das heißt, wir setzen die magnetischen Momente gleich Eins und den Abstand zwischen nächsten Nachbarn ebenfalls gleich Eins. Um also die tatsächliche Energie zu erhalten, muss man mit m^2/a^3 multiplizieren, wobei a der Gitterabstand ist.

Ist die Differenz der Energie nach zehn solchen Iterationszyklen kleiner als 10^{-7}, so beginnen wir nach jeweils zehn Iterationszyklen die Eigenfrequenz-Quadrate zu berechnen. Falls die Summe $\sum_i |\omega_{i\text{alt}}^2 - \omega_{i\text{neu}}^2|$ kleiner als 10^{-6} ist, betrachten wir die Konvergenz und damit den Gleichgewichtszustand als erreicht. Zwei Konfigurationen betrachten wir als äquivalent, wenn die Energiedifferenz kleiner als 10^{-6} und die Differenz des kleinsten ω^2 kleiner als 10^{-5} ist. Wir führen für ein vorgegebenes Gitter diese Iterationen aus zunächst 1000 verschiedenen Anfangs-Zufallskonfigurationen durch. Falls wir dabei mehr als 100 nicht äquivalente Konfigurationen erhalten, führen wir die Rechnung für weitere 2000 Anfangs-Zufallskonfigurationen durch.

Berechnung der Schwingungsfrequenzen

Hat ein Magnet das Trägheits-Moment Θ bezüglich seiner Drehachse, so ist sein Drehimpuls $\mathbf{L}_i = \Theta\dot{\phi}\mathbf{e}_z$, wobei $\dot{\phi}$ seine Winkelgeschwindigkeit ist. Die Magneten erfahren nun das Drehmoment $\mathbf{M}_i = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i$. Damit ergibt sich die Bewegungs-Gleichung

$$\Theta\ddot{\phi}\mathbf{e}_z = \mathbf{M}_i = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i. \tag{4}$$

Setzen wir nun

$$\mathbf{m}_i = (m\cos\phi_i, m\sin\phi_i), \quad \mathbf{e}_{ij} = (\cos\alpha_{ij}, \sin\alpha_{ij}), \quad \alpha_{ji} = \alpha_{ij} \pm \pi, \tag{5}$$

in den Ausdruck für das Feld $\mathbf{B}_i$ und das magnetische Moment ein, so erhalten wir für das Drehmoment

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{e}_z \sum_{j \neq i} \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(\sin(\phi_i - \phi_j) - 3\sin(\phi_i - \alpha_{ij})\cos(\phi_j - \alpha_{ij}) \right). \tag{6}$$

Drücken wir andererseits die magnetische Wechselwirkungsenergie durch die Winkel ϕ und α aus, so erhalten wir

$$U_{ij} = \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(\cos(\phi_i - \phi_j) - 3\cos(\phi_i - \alpha_{ij})\cos(\phi_j - \alpha_{ij}) \right). \tag{7}$$

Man überzeugt sich nun leicht, dass das Drehmoment und die Wechselwirkungsenergie durch

$$\mathbf{M}_i = -\mathbf{e}_z \frac{\partial U}{\partial \phi_i} \tag{8}$$

verknüpft sind. Im Gleichgewichtszustand verschwindet das Drehmoment. Dreht man die Magnete etwas aus ihren Gleichgewichtslagen, das heißt, ersetzt man ϕ_i durch $\phi_i + \delta\phi_i$, so erhält man für kleine Auslenkungen $\delta\phi$ die Bewegungsgleichungen

$$\Theta \ddot{\delta\phi_i} = -\frac{\partial U(\{\phi + \delta\phi\})}{\partial \phi_i} = -\sum_j \frac{\partial^2 U}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \delta\phi_j. \tag{9}$$

Setzt man nun harmonische Schwingungen

$$\delta\phi_i = f_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \tag{10}$$

an, so bestimmen sich die $\Theta\omega^2$ als Eigenwerte der Matrix $\partial^2 U/\partial\phi\partial\phi$.

Für die zweiten Ableitungen erhält man

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \phi_i \partial \phi_j} = \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(\cos(\phi_i - \phi_j) - 3\sin(\phi_i - \alpha_{ij})\sin(\phi_j - \alpha_{ij})\right) \text{ für } i \neq j. \tag{11}$$

Unter Berücksichtigung von

$$\begin{aligned} \cos(\phi_i - \phi_j) &= \cos((\phi_i - \alpha_{ij}) - (\phi_j - \alpha_{ij})) & (12)\\ &= \cos(\phi_i - \alpha_{ij})\cos(\phi_j - \alpha_{ij}) + \sin(\phi_i - \alpha_{ij})\sin(\phi_j - \alpha_{ij}) & (13) \end{aligned}$$

können wir obigen Ausdruck in

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U}{\partial \phi_i \partial \phi_j} &= \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(-2\cos(\phi_i - \phi_j) + 3\cos(\phi_i - \alpha_{ij})\cos(\phi_j - \alpha_{ij})\right) \\ &= \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(-2(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) + 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij})\right) \text{ für } i \neq j \qquad (14) \end{aligned}$$

umformen. Für die Diagonal-Matrix-Elemente erhalten wir

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \phi_i^2} = \sum_{j \neq i} \frac{m^2}{r_{ij}^3} \left(-\cos(\phi_i - \phi_j) + 3\cos(\phi_i - \alpha_{ij})\cos(\phi_j - \alpha_{ij})\right) = (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_i). \tag{15}$$

Mit diesen Matrix-Elementen werden die Eigenwerte ω^2 berechnet, wobei Θ gleich Eins gesetzt wird. Die tatsächlichen Frequenz-Quadrate erhält man durch Multiplikation mit $m^2/(\Theta a^3)$.

Dipole auf verschiedenen Gittern

Im Folgenden zeigen wir Gleichgewichts-Konfigurationen für verschiedene Gitter. Es wurden schließlich für die Plastik das Zufallsgitter (12,23) mit 127

Magneten als Beispiel der Unordnung und das Dreiecks-Gitter (7,7) mit 169 Magneten als Beispiel eines Systems, das stark zur Ordnung tendiert, gewählt. Die Plastik wurde von Doktoranden der Gruppe Hunklinger und der mechanischen Werkstatt des Kirchhoff-Instituts gebaut, wobei es einiger Raffinesse bedurfte, die Magnete so leichtlaufend anzufertigen.

Wir berechnen die Gleichgewichts-Konfigurationen aus Zufalls-Anfangs-Konfigurationen. Dabei ist es keineswegs klar, ob wir alle stabilen Gleichgewichts-Konfigurationen erhalten haben. Da allgemein die Anzahl der Konfigurationen mit der Größe der Gitter anwächst, müssen wir bei größeren Gittern davon ausgehen, dass wir nicht alle Konfigurationen erhalten haben. Besonders augenfällig ist dies zum Beispiel bei dem Bienenwaben-Gitter (4,4), bei dem wir in 3000 Läufen 2932 verschiedene Konfigurationen erhalten haben. Mit Sicherheit gibt es weit mehr als das Doppelte an stabilen Gleichgewichtslagen. Entspechendes gilt natürlich auch für das realisierte Zufallsgitter. Hier waren alle 3000 gefundenen Konfigurationen verschieden voneinander. Dies ist charakteristisch für ein Glas. Es ist außerordentlich fraglich, dass unser energetisch niedrigster Zustand auch der Grundzustand ist. Für das Bienenwaben-Gitter $< 2, 2 >$ haben wir einen energetisch tieferen Zustand als den aus den Zufalls-Konfigurationen bestimmten erraten können.

Doch zeigen die regulären Gitter einige charakteristische Eigenschaften. Die Dreiecks-Gitter neigen stark dazu, einen Wirbel auszubilden, vor allem wenn die Berandung ein reguläres Sechseck ist. Dies begann schon im oben gezeigten Beispiel und setzt sich fort bei den Dreiecks-Gittern (2,2), (3,3), (4,4), (5,5). Diese Situation bleibt erhalten bei einer dreieckigen Berandung (7,0), (8,0) etc. und bei Abstumpfung dieser Ecken. Allerdings ändert sich dabei das Energie-Spektrum. Während bei einer Sechsecks-Berandung eine erhebliche Lücke zwischen dem niedrigsten und den nächsten Zuständen besteht, geht diese beim Übergang zur dreieckigen Berandung zurück. Anregungen findet man in Form von Verlagerung des Wirbelzentrums, aber besonders bei dreieckiger Berandung auch durch Umorientierungen an den Ecken, die dort nur wenig Energie kosten. Je stärker man die Ecken abstumpft, um so höher wird der Energieaufwand für eine Störung am Rand. Nochmal anders ist die Situation bei einer Rechtecksberandung. Ist das Rechteck länglich, so bilden sich leicht Mehrfach-Wirbel aus, die im Gegensinn (Dreiecks-Gitter mit Rechtecksberandung (4,4) oder (6,4)) oder auch im gleichen Umlaufsinn (6,6) umlaufen. Das Dreiecks-Gitter (7,7) mit 169 Magneten wurde als Repräsentant der Ordnung ausgewählt.

Vergleichsweise wenige stabile Zustände zeigen die quadratischen Gitter. Das 5×5-Gitter (4,4,0) diente als experimenteller Prototyp und in der Tat stimmten die Konfigurationen gut mit den berechneten überein. Es fiel auf, dass sich häufig nicht der Grundzustand sondern der drittniedrigste einstellte. Das stimmt mit der Beobachtung überein, dass dieser bei den 1000 Läufen 461 mal gefunden wurde, also einen großen Einzugsbereich hat.

Die quadratischen Gitter zeigen vielfach eine antiferromagnetische Ordnung mit vier Untergittern. Das heißt, häufig hat ein Magnet die gleiche Ausrichtung wie der übernächste Magnet links, rechts, darüber oder darunter. Die Orientierung zum nächsten Nachbarn erhält man meist durch Spiegelung an der

Mittelsenkrechten plus Austausch der Orientierung wie in der nächsten Figur gezeigt. Die vier eingezeichneten Winkel stimmen dabei überein.

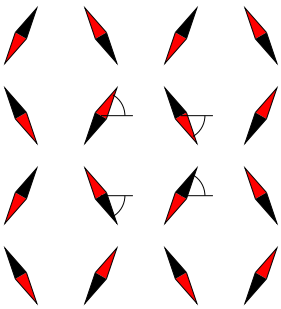


Fig. 5: Typische Ordnung im quadratischen Gitter. Die eingezeichneten Winkel stimmen überein.

Besonders hervorstechend ist die Ordnung, in der die Magnete um 45^0 gegen die Achsen geneigt sind und sich zu kleinen Wirbeln formen, oder eine Anordnung in parallelen Strängen, die abwechselnd nach oben und unten oder nach rechts und links orientiert sind. Die Anregungsenergien sind relativ gering. Formt man das Gitter zu langen Nadeln (8,4,2) und (12,6,4), so ist die Orientierung vorwiegend in der Längsrichtung. Man beobachtet, dass es bei Anregungen auch waagrechte und senkrechte Linien gibt, bei denen nicht Spiegelung plus Umorientierung stattfindet, sondern sich das Muster an zwei benachbarten Linien wiederholt (z.B. Zustand 5 in (5,5,0), Zustand 5 in (8,4,0), Zustand 4 in (8,8,0)).

Das Bienenwaben-Gitter neigt stark dazu, Wirbel in Form von Sechser-Ringen zu bilden, die vorzugsweise im gleichen Umlaufsinn orientiert sind. Doch kostet die Fehlorientierung eines Rings nur wenig Energie, so dass die Anregungsenergien gering sind. Die Anzahl der Zustände ist ausgesprochen groß. Wir betrachten zweierlei Randbedingungen, gekennzeichnet als Bienenwaben-Gitter (n_1, n_2) und $< n_1, n_2 >$. Letzteres kann man zerlegen in ganze Sechsecke. Bei ersteren ist die Berandung etwas anders. Im Anregungs-Spektrum der (n, n)-Gitter finden wir oberhalb $\omega^2 \approx 4$ in der Regel eine Lücke, bei den $< n, n >$-Gittern oberhalb $\omega^2 \approx 6$. Und zwar liegen oberhalb der Lücke bei dem $(3, 3)$-Gitter 25 (auch 23 oder 24) der 54 Schwingungen und 46 (auch 43 bis 45) von 96 Schwingungen im $(4, 4)$-Gitter. Im $< 1, 1 >$-Gitter liegen 8 (auch 6) der 42 Schwingungen oberhalb der Lücke, im $< 2, 2 >$-Gitter 20 (auch 18) der 114 Schwingungen. Die Herkunft (verschiedene Spinwellenbänder?) ist unklar. Der niedrigste gefundene Zustand des Bienenwaben-Gitters $< 2, 2 >$ zeigt zwei Wirbel mit umgekehrten Umlaufsinn ($E_1 = -243.78240$). Der tatsächlich niedrigste Zustand wurde mit diesem Verfahren gar nicht gefunden. Gibt man allen Wirbeln den gleichen Umlaufsinn, so erhält man einen Zustand mit der niedrigeren Energie $E_0 = -246.31677$.

Das Kagome-Gitter bildet ähnlich dem Dreiecksgitter gerne einen großen Wirbel aus. Im Achtvier-Gitter dominieren Wirbel in Form von Achter-Ringen, die möglichst gleich orientiert sind. Von besonderer Schönheit sind die Zustände des Bienenwaben-Gitters (2,2). Alle zehn gefundenen haben zumindest eine Spiegelsymmetrie. Drei davon haben eine sechsfache Drehsymmetrie, die Zustände 1, 3 und 9 (wobei teilweise die Orientierung der Magnete um 180^0 geändert werden muss. Der Zustand 3 hat dazu inspiriert, die Magnete paarweise zusammenzufassen. Dabei entsteht ein Davidsstern (ein Kagome-Gitter), für den wir fünf stabile Zustände gefunden haben. Wir geben noch sechs weitere

instabile Gleichgewichts-Zustände an.

Schließlich wurden die Rechnungen für einige Zufallsgitter durchgeführt. Typisch ist, dass auch hier die Magnete versuchen, einander wie Lemminge zu folgen. Charakteristisch ist auch, dass manchmal nur kleine Bereiche umordnen, und dass das Energiespektrum sehr dicht ist. Zustände niedrigster Energie liegen dicht beieinander. Bereits das Zufallsgitter (6,2) mit 62 Gitterpunkten ergab nach 3000 Läufen 2918 verschiedene Zustände, was bedeutet, dass wir nicht annähernd alle kennen. Beim Zufallsgitter (12,23) das als Modell der Unordnung gewählt wurde, ergaben alle 3000 Läufe unterschiedliche Konfigurationen. Die Zufallsgitter wurden aus einem Dreiecks-Gitter der Gitterkonstante 1/2 gewonnen. Eine bestimmte Anzahl von Malen wurden Gitterpunkte zufällig ausgewählt. Sie wurden besetzt, wenn sie oder die nächsten Nachbarn nicht bereits besetzt waren. Der geringst mögliche Abstand zwischen zwei Dipolen ist daher $\sqrt{3}/2$.

Ordnung und Unordnung

Beim Betrachten der Bilder haben wir eine Fülle verschiedener Systeme zwischen den Extremen von Ordnung und Unordnung kennengelernt. Geordnete Systeme sind für den (theoretischen) Physiker leichter zu beschreiben - der Experimentalphysiker hat häufig Mühe, ein System sehr rein herzustellen. Zur Beschreibung einer langreichweitigen Ordnung, das heißt, wenn sich eine Korrelation, zum Beispiel die Parallelität und Größe der Magnetisierung über große Entfernung erstreckt, hat man das Konzept des Ordnungs-Parameters eingeführt. Im Dreiecksgitter mit Sechseck-Berandung ändert er sich im Grundzustand z.B. nur, wenn man um den Wirbel herumgeht.

Die willkürliche Einstellung der Dipole in die eine oder entgegengesetzte Richtung bezeichnet man als Symmetriebrechung. Die Wechselwirkung zieht keine der beiden Möglichkeiten vor, aber das System sucht sich beim Übergang zu niedrigen Energien eine der gleichberechtigten Zustände heraus. Derartige Symmetriebrechungen gibt es nicht nur in magnetischen Systemen, sondern auch in Ferroelektrika (elektrische Dipole) oder in Festkörpern. Ein Festkörper kann als Ganzes verschoben werden ohne seine Energie zu ändern. Auch das Verhalten eines Gas-Flüssigkeits-Gemisches in der Umgebung eines kritischen Punktes kann als Symmetriebrechung beschrieben werden. Auch in einem Bose-Einstein-Kondensat, z.B. im superflüssigen Helium, oder in einem Supraleiter hat man eine Symmetriebrechung, die durch eine vielleicht etwas unanschauliche Kondensatwellenfunktion beschrieben wird.

Auch in der Hochenergiephysik spielt die Symmetriebrechung eine große Rolle. Man nimmt an, dass die verschiedenen Teilchen eigentlich alle masselos wären und das Universum von einer Symmetrie mit einer großen Zahl von Freiheitsgraden regiert wird und dass diese Symmetrie auch explizit vorhanden war, als das Universum noch sehr heiß war. Mit dem Abkühlen brach aber ein hypothetisches Higgs-Feld diese Symmetrie. Seinen Anregungen, den Higgs-Teilchen rückt man durch den Bau großer Beschleuniger zu Leibe. Diese

Symmetriebrechung selbst macht man in erheblichem Umfang für die Massen uns bekannter Teilchen verantwortlich. Bei dem Higgs-Feld wie auch bei den erwähnten Kondensat-Wellenfunktionen handelt es sich um keine räumlich gerichtete Größen. Sie zeichnen also keine Richtung im Raum aus im Gegensatz etwa zu einer Magnetisierung.

Bricht man eine kontinuierliche Symmetrie, das heißt, können sich die Dipole mit gleicher Energie in beliebiger Richtung ausrichten, dann treten Goldstone-Moden auf. Dann genügt gewissermaßen eine beliebig kleine Energie, um die Dipole oder allgemein den Ordnungs-Parameter von Ort zu Ort langsam zu verdrehen, was zu beliebig kleinen Frequenzen der Schwingungen führt. Häufig ist dann die Frequenz ω proportional zum Wellenvektor q, der nichts anderes ist als 2π dividiert durch die Wellenlänge, und man hat einen Zusammenhang $\omega = cq$, wobei c die Geschwindigkeit der Welle, z.B. der Schallwelle in einem Festkörper ist. Jedoch sind auch andere Beziehungen möglich: Für ferromagnetische Spinwellen auf Grund einer isotropen Austauschwechselwirkung findet man z.B. $\omega \propto q^2$. Einen anderen Zusammenhang für die Magnetisierung im Dreiecks-Gitter werden wir unten finden. Die chirale Symmetriebrechung (das heißt einer Symmetriebrechung zwischen linkshändigen und rechtshändigen Teilchen) der starken Wechselwirkung in der Hochenergiephysik führt zu den Pionen als Goldstone-Bosonen.

Im vorliegenden Fall haben wir zunächst keine kontinuierliche Symmetrie. Dies liegt an der eigentümlichen Form der Dipol-Wechselwirkung, die von der Richtung der Verbindungslinie zweier Dipole und nicht nur vom Abstand zwischen zwei Dipolen abhängt. Im Beispiel der zwei Dipole gibt es zwei diskrete Lagen der Dipole mit niedrigster Energie. Für ein unendlich ausgedehntes Gitter mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung ist die Energie pro Anzahl N der Dipole sowohl im Dreiecksgitter wie im quadratischen Gitter von der Orientierung unabhängig. (Dies ist anders in anisotropen Gittern oder auch in einem Bienenwaben-Gitter. Die niedrigen Zustände der Bienenwaben-Gitter $< 1,1 >$ und $< 2,2 >$ zeigen gar keine niedrigen ω^2). Man errechnet

$$E_{0\mathrm{quad}}/N = -2.5494, \quad E_{0\mathrm{drei}}/N = -2.7591. \tag{16}$$

Dass sich beim Dreiecks- und dem quadratischen Gitter trotzdem eine Vorzugsrichtung einstellt, liegt an der Berandung, die dem System eine Anisotropie aufprägt. Das bedeutet aber, dass in hinreichend großen Systemen Goldstone-Moden auftreten, die allerdings an der Berandung deformiert werden. Eine Rechnung ergibt

$$\omega^2_{\mathrm{quad}} = (0.966 - 0.821\cos(\beta)\cos(\phi))q^2, \tag{17}$$

$$\omega^2_{\mathrm{drei}} = (14.5 - 7.1\cos(\beta - \phi))q. \tag{18}$$

Dabei gibt ϕ (Gl. 5) die Orientierung der Magnetisierung und β die Orientierung des Wellenvektors $\mathbf{q} = q(\cos\beta, \sin\beta)$ an. Das ungewöhnliche Verhalten $\omega_{\mathrm{drei}} \propto \sqrt{q}$ rührt von der Langreichweitigkeit der Dipolwechselwirkung her.

Die Körper unserer Umgebung haben in der Regel eine unregelmässige Struktur (Einkristalle und reine Diamanten sind selten). Das macht die Körper unsere

Umgebung schwerer beschreibbar, aber auch interessanter. Solch eine Unordnung wurde hier in Form des Zufallsgitters realisiert. Diese Unordnung kann zu Glaseigenschaften führen. Typisch sind die vielen energetischen Minima. Beim Abkühlen wird das System nicht das tiefste Minimum finden. Aber schon vorher kann es sich nur noch in einem begrenzten Bereich bewegen, da die Potentialbarrieren zu anderen Bereichen zu groß werden. Man sagt dann, das System ist in einem Glaszustand. Das führt dann zu Eigenschaften, die sich von denen eines geordneten Körpers unterscheiden. Zum Beispiel werden in Gläsern bei tiefen Temperaturen andere spezifische Wärmen gemessen. Typisch ist für diese Systeme auch, dass es auch theoretisch gar nicht klar ist, wie man den Grundzustand bestimmen soll.

Interessant ist, dass auch in einem geordneten Gitter die Dipolwechsel-Wirkung zu vielen energetischen Minima führt, so dass man hier von Dipolgläsern sprechen kann.

Ein kleiner Spaß, das Modell H, und ein Wunsch zum Schluss

Theoretische Physiker führen häufig einfache Modelle ein in der Hoffnung, dass das Modell noch die wesentlichen Eigenschaften des Systems zeigt. Was liegt näher, als bei der Emeritierung von **H**einz **H**orner und Siegfried **H**unklinger das **H**-Modell zu untersuchen. Vergleichen Sie hier den aufrecht festen Grundzustand und den beschwingten höchst angeregten Zustand, beide im stabilen Gleichgewicht.

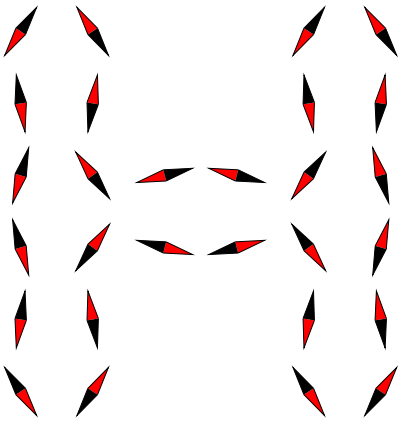


Fig. 6a: Das H-Modell im Grundzustand

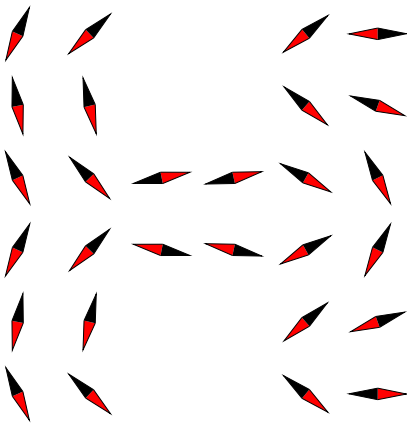
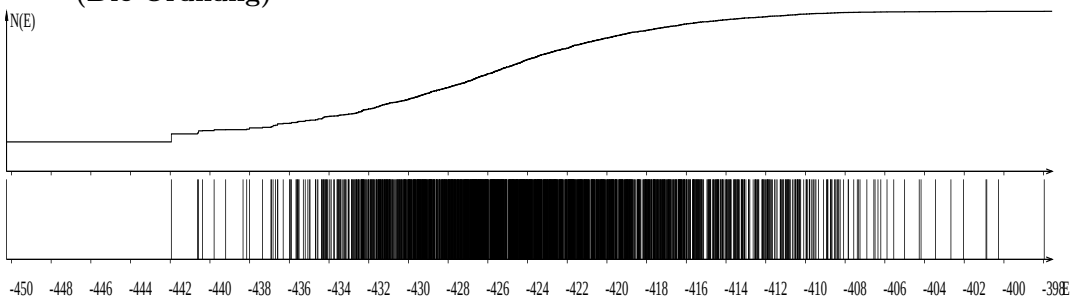


Fig. 6b: Das H-Modell im höchsten gefundenen Anregungszustand

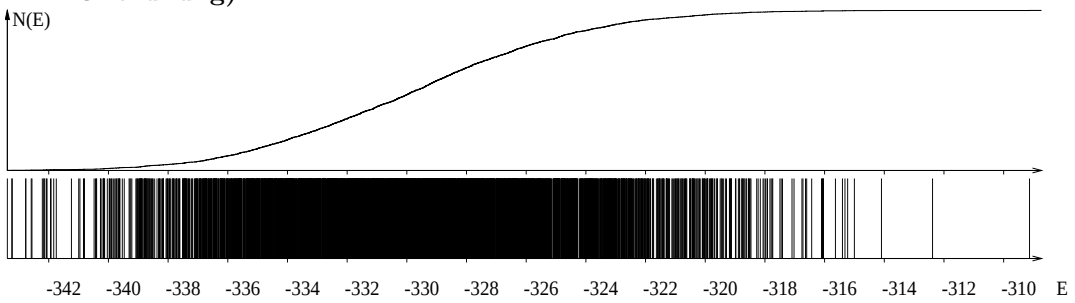
Unseren beiden Emeriti Heinz Horner und Siegfried Hunklinger wünschen wir noch viele Jahre im aufrechten und beschwingten Zustand.

Das Energiespektrum für das Dreiecksgitter mit 169 Magneten (Die Ordnung)



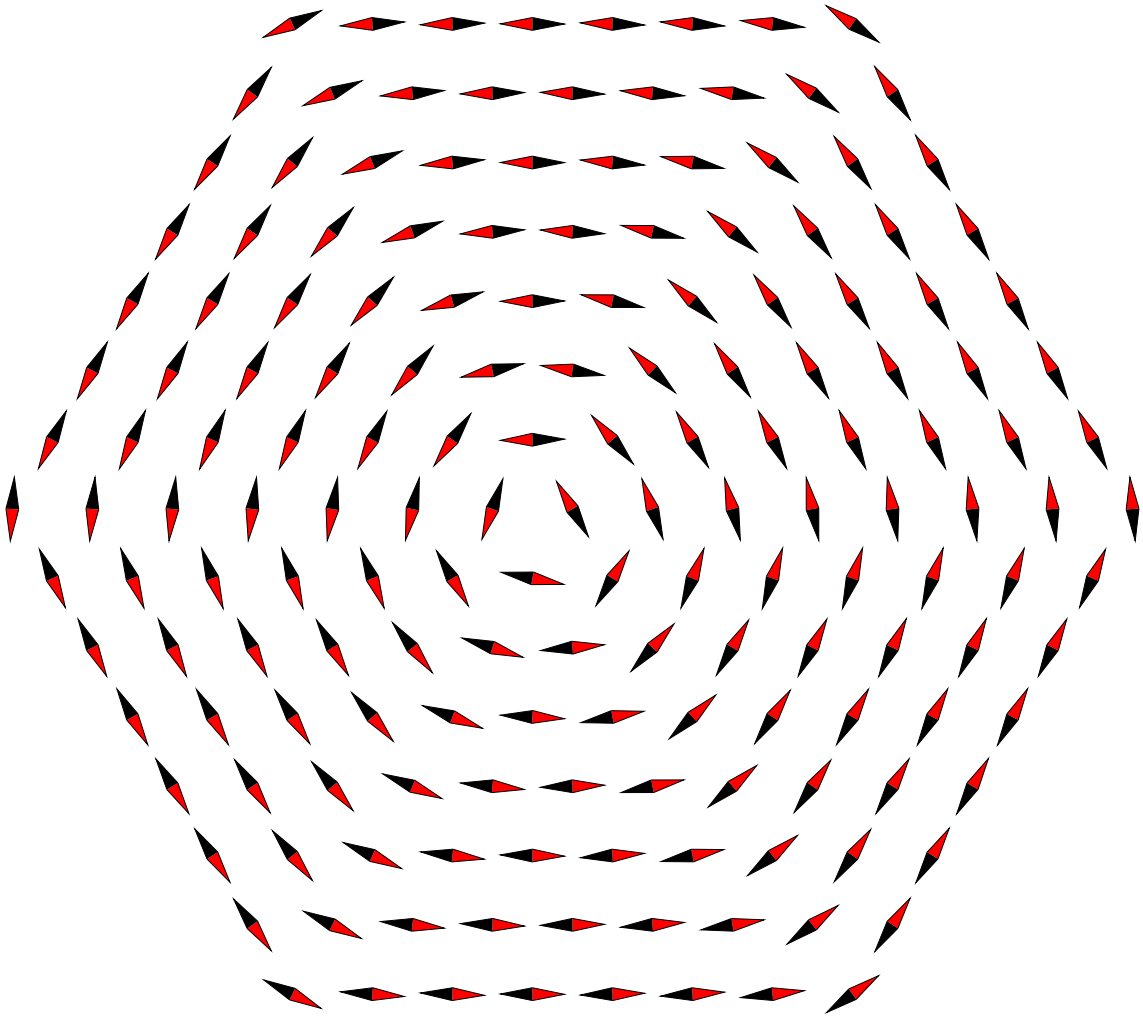
Anzahl Gitterpunkte: 169, Gefundene Energie-Niveaus: 1797, Läufe: 3000

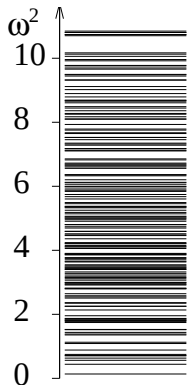
Das Energiespektrum für das Zufallsgitter mit 127 Magneten (Die Unordnung)



Anzahl Gitterpunkte: 127, Gefundene Energie-Niveaus: 3000, Läufe: 3000

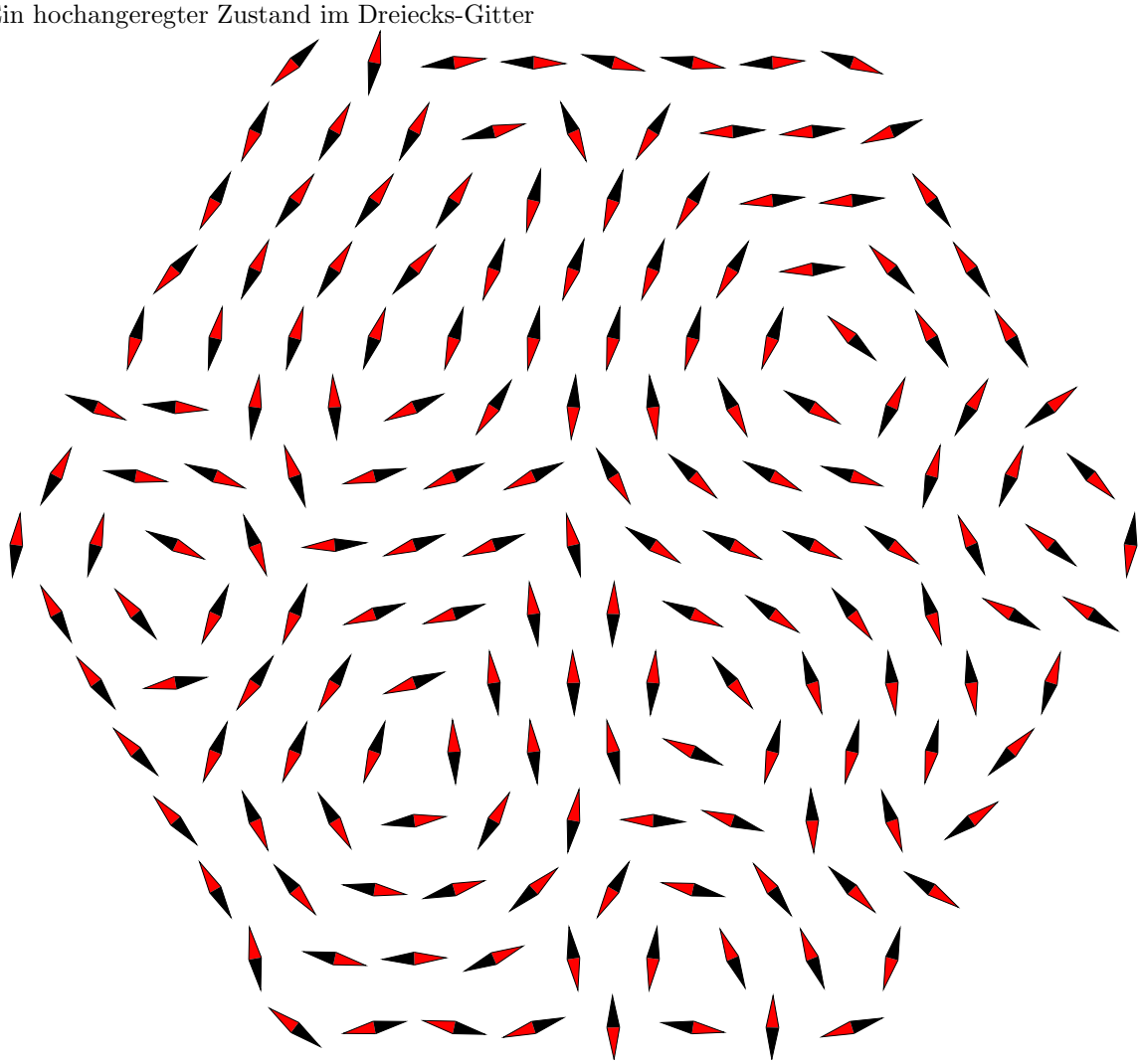
Der Grundzustand im Dreiecks-Gitter

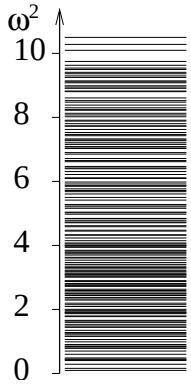




$E_1 = -450.24465$ (552 mal) $\omega_1^2 = 0.13554$

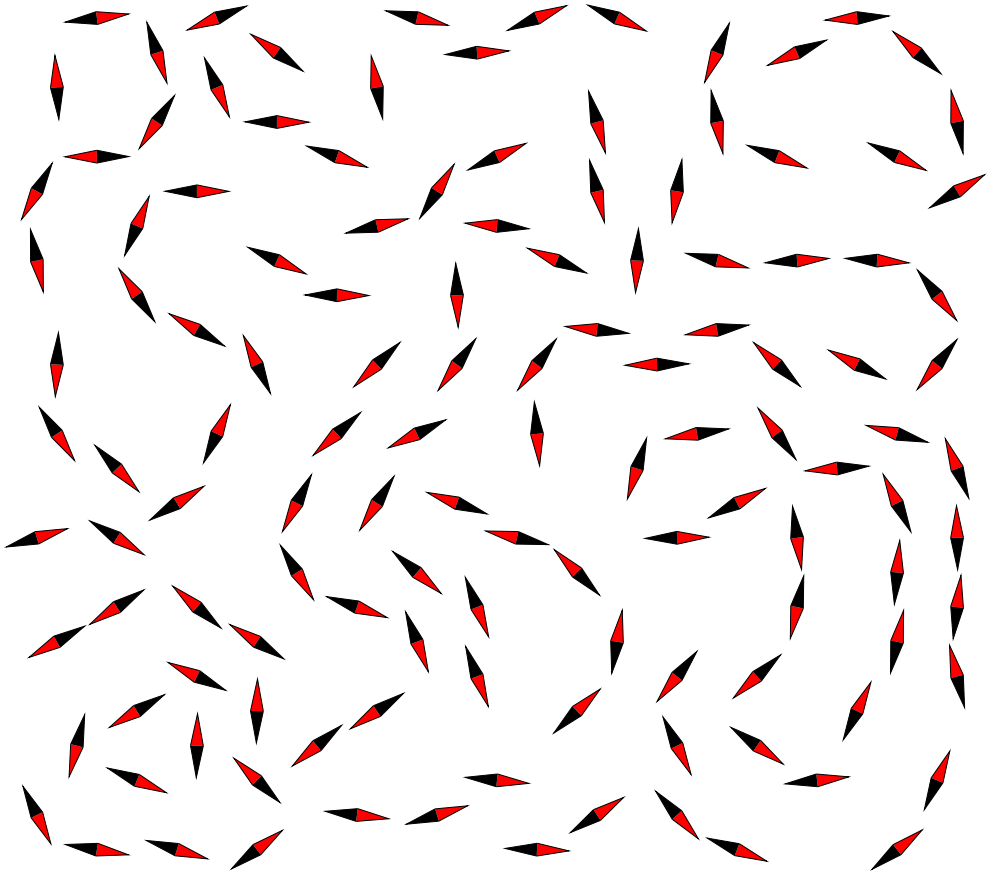
Ein hochangeregter Zustand im Dreiecks-Gitter

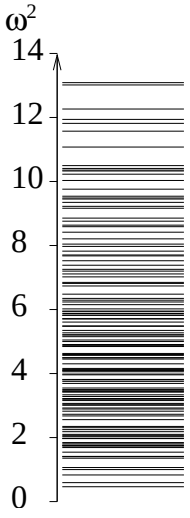




$E_{1796} = -400.27316$ (1 mal) $\omega_1^2 = 0.09705$

Der niedrigste gefundene Zustand im Zufallsgitter





$E_1 = -343.38631$ (1 mal) $\omega_1^2 = 0.46215$