

Wanderungen in zerklüfteten Energie-Landschaften

Giorgio Parisi erhält eine Hälfte des diesjährigen Physik-Nobelpreises für seine Theorien komplexer Systeme.

Kurt Binder

Mit dem Nobelpreis für Physik 2021 wird der italienische Physiker Giorgio Parisi ausgezeichnet für „die Entdeckung des Zusammenspiels von Unordnung und Fluktuationen in physikalischen Systemen vom atomaren bis zum planetarischen Maßstab“. Sein zentraler Beitrag besteht darin, eine Molekularfeldtheorie für Spingläser entwickelt zu haben [1].

Um Giorgio Parisi's Leistung möglichst verständlich zu erläutern, muss hier etwas weiter ausgeholt werden: Spingläser sind magnetische Materialien, die erst seit rund 50 Jahren bekannt sind, das Phänomen des Ferromagnetismus dagegen seit Jahrtausenden. Jedem geläufig ist die Magnetnadel im Kompass, die im Magnetfeld der Erdkugel die Richtung zum Nordpol anzeigt. Seit der Weiss'schen Molekularfeldtheorie (1907) wissen wir, dass die magnetischen Momente der Eisen-Atome durch Wechselwirkungen gekoppelt sind. In der Folge richten sich diese Momente spontan parallel aus. Erst bei hohen Temperaturen, oberhalb der Curie-Temperatur T_c , zerstören thermische Fluktuationen diese magnetische Ordnung.

Werner Heisenberg (1928) erklärte diese Wechselwirkung mittels Quantenmechanik. Die Kopplung kann auch das umgekehrte Vorzeichen haben, was eine antiparallele Ausrichtung benachbarter magnetischer Momente (die wir hinfort als „Spins“ bezeichnen wollen) hervorruft, also Antiferromagnetismus. Methoden wie Neutronenbeugung können die Bragg-Reflexe dieser Überstruktur des Kristall-

Giorgio Parisi



Giorgio Parisi wurde 1948 in Rom geboren und promovierte bereits 1970 an der Universität Rom I, „La Sapienza“ bei Nicola Cabibbo mit Arbeiten über Elementarteilchentheorie. Diesem Gebiet blieb er zunächst treu und arbeitete in Frascati, an der Columbia University in New York (1973/74) sowie in Paris am Institut des Hautes Études Scientifiques (1976/77) bzw. an der École Normale

Supérieure (1977/78). Bis 1980 hatte er seine Originalität und wissenschaftliche Produktivität mit über 70 sehr beachteten Arbeiten auf diesem Gebiet unter Beweis gestellt. Von 1981 bis 1992 war er Professor in Rom an der Universität Rom III, „Tor Vergata“. Seit 1992 lehrt und forscht er an seiner Heimat-Universität Rom I.



Im Jahr 2011 zeichnete die DPG – vertreten durch ihren damaligen Präsidenten Wolfgang Sandner (rechts) – Giorgio Parisi mit der Max-Planck-Medaille aus.

gitters nachweisen [2]. Bei Annäherung an die Néel-Temperatur T_N , unterhalb der diese Ordnung der Spins auftritt, zeigt sich diese Phasenumwandlung auch durch eine Spitze der magnetischen Suszeptibilität bei T_N [3]. Diese Kenngröße misst die Magnetisierung, die ein kleines angelegtes Magnetfeld in einem Material bewirkt.

1971/72 wurden solche Spitzen in der Suszeptibilität auch bei nichtmagnetischen Metallen wie Cu, Ag oder Au gefunden, wenn dort wenige Atomprozent magnetischer Atome als (statistisch verteilte) Verunreinigung im Kristallgitter enthalten waren [4]. Anders als bei Antiferromagneten gaben Untersuchungen mit Neutronenbeugung keinen Hinweis auf irgendeine Art von kooperativer Ausrichtung der Spins. Andererseits haben Methoden, die dynamische Größen messen, eine klare Evidenz für einen Übergang bei der Temperatur T_f der Suszeptibilitäts-Spitze gefunden, z. B. die frequenzabhängige Suszeptibilität, Mössbauer-Effekt, magnetische Kernresonanz oder Myon-Spin-Relaxation [5, 6]. Besonders interessant ist der Befund, dass das Spektrum der Relaxationszeiten der Spins, die weit oberhalb von T_f im Bereich von Pikosekunden liegen, sehr breit wird und bei T_f makroskopische Zeitskalen erreicht. Dies ist analog auch vom Übergang einer unterkühlten Flüssigkeit zum festen, amorphen Glas bekannt: Im Glas sind die Positionen der Atome in einer unregelmäßigen Anordnung eingefroren, statt ein regelmäßiges Kristallgitter zu bilden [7].

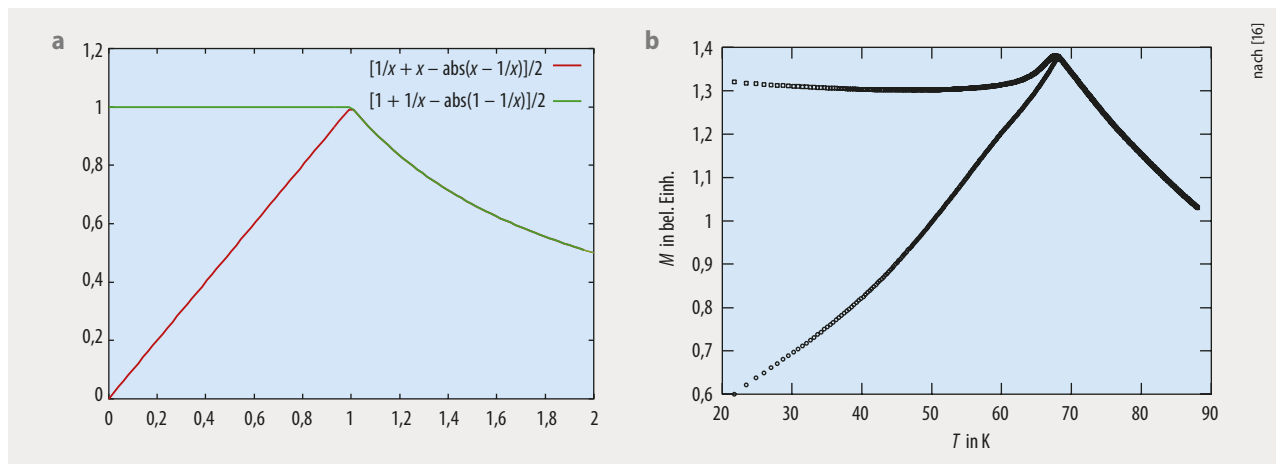


Abb. 1 Die analytischen Ergebnisse der Molekularfeldtheorie für die Suszeptibilität eines Spinglases als Funktion der Temperatur (in Einheiten der Einfriertemperatur, a) stimmen qualitativ gut mit den experimentellen Ergebnissen für ein CuMn-Spinglas (b) überein. Unterhalb der Spitze, die an der Einfriertemperatur auftritt, ist zu unterscheiden zwischen der Suszeptibilität gemessen bei langsamer Abkühlung im angelegten kleinen Magnetfeld (obere Kurven) und der Suszeptibilität bei Abkühlung ohne angelegtes Feld (untere Kurven).

Daher nannte man diese ungeordneten magnetischen Systeme „Spingläser“ und hoffte, mit ihrer Untersuchung Einsichten zu gewinnen über den Übergang von Flüssigkeiten zum strukturellen Glas, der in vieler Hinsicht theoretisch unverstanden war – und noch immer ist [8].

Nach ihrer Entdeckung stießen Spingläser auf sehr großes Interesse. 1975 lieferten Sam F. Edwards und Philip W. Anderson für sie die erste Theorie [9]. Im Jahr 1977 wurde Anderson – zusammen mit N. F. Mott und J. H. van Vleck – mit dem Physik-Nobelpreis ausgezeichnet „für fundamentale theoretische Untersuchungen der elektronischen Struktur magnetischer und ungeordneter Systeme“.

Wie in der Theorie üblich wurde das Problem zunächst radikal vereinfacht durch Weglassen von Details, die als weniger relevant galten. Die Kopplung zwischen weit entfernten Spins im Metall entsteht durch Leitungselektronen. Das Vorzeichen der Kopplung oszilliert mit dem Abstand auf der Skala der Fermi-Wellenlänge, und die Stärke klingt mit der inversen dritten Potenz des Abstands ab. Edwards und Anderson betrachteten das Modellproblem von Spins auf allen Gitterplätzen i, j mit gaußverteilten Austauschkopplungen J_{ij} , also entsprechend der Wahrscheinlichkeit $P(J_{ij}) \propto \exp[-J_{ij}^2 / 2(\Delta J)^2]$ [9]. Selbst für dieses vereinfachte Modell ist die Molekularfeldnäherung nicht einfach: Man muss die freie Energie F des Modells berechnen,

$$F = -k_B T \ln Z, \tag{1}$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist, T die absolute Temperatur und Z die Zustandssumme für eine gewählte Realisierung $\{J_{ij}\}$ aller statistisch gewählten Kopplungen. Danach ist die Mittelung mit obiger Verteilung $P(J_{ij})$ auszuführen, was nicht ohne Weiteres lösbar ist [5, 6].

Daher griffen die Autoren [9] auf die „Replica Methode“ zurück. Edwards hatte sie 1971 bereits für seine Arbeiten zur Theorie der Gummielastizität benutzt [10]. Hier liegt ein Ensemble einander durchdringender Knäuel langer Ketten flexibler Makromoleküle vor, die durch statistisch verteilte kovalente chemische Verknüpfungsbindungen

zwischen verschiedenen dieser Polymere (crosslinks) ein ungeordnetes Netzwerk bilden. Zu mitteln ist hier über die Zufallspositionen dieser Verknüpfungspunkte. Die Replica-Methode geht von der Formel aus

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}, \tag{2}$$

denn die Potenz Z^n lässt sich schreiben als

$$\exp(n \ln Z) \approx 1 + n \ln Z + \dots$$

Wäre n ganzzahlig ($n = 1, 2, 3, \dots$), ließe sich die Mittelung über die Unordnung relativ leicht ausführen und würde die Terme $S_i^\alpha S_j^\beta$ ($\alpha \neq \beta$) liefern. Die Replicas werden also durch die Unordnungsmittelung gekoppelt. In der Molekularfeldnäherung führt das auf einen „Ordnungsparameter“ [9, 11]

$$q^{\alpha\beta} = \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle \quad (\alpha \neq \beta), \tag{3}$$

wobei die Klammern $\langle \dots \rangle$ die thermische Mittelung bedeuten. Nachdem aber für Gleichung (2) die analytische Fortsetzung von ganzzahligem n nach $n \rightarrow 0$ postuliert wird, erhebt sich die Frage, wie mit den Replica-Indizes α, β in Gleichung (3) umzugehen ist.

Edwards und Anderson [9] und bald darauf Sherrington und Kirkpatrick [11] ließen im Limes $n \rightarrow 0$ die Replica-Indizes weg. In dieser „replica-symmetrischen“ Lösung gibt es nur einen einzigen Spinglas-Ordnungsparameter q . Diese Theorie fand enormes Interesse; damals erschien in den Zeitschriften über Festkörperphysik praktisch jeden Tag ein neuer Artikel über Spingläser, wenn die experimentellen Arbeiten dazuzählen. Es stellte sich aber bald heraus, dass die Theorie mit der Mathematik „zu freihändig umgegangen“ worden war!

Schwankungsquadrate, die per definitionem positiv sein müssten, waren in dieser Theorie negativ, was nicht sein kann [12]. Dieses Versagen lag aber *nicht* an der Molekularfeldnäherung. Denn diese ist exakt für Modelle, in denen

jeder Spin mit jedem anderen Spin wechselwirkt, und zwar mit einer Stärke, die nicht vom Abstand abhängt [11].

Ein radikal neues Konzept

An dieser Stelle kam Giorgio Parisi ins Spiel: 1979/80 beendete er mit etwa einem halben Dutzend allein verfasster Arbeiten mehrere Jahre des Rätselratens, ob und wie die Replica-Methode zu „retten“ sei. Die von Parisi mit besonderer Intuition gefundene Lösung heißt „Replica-Symmetrie-Brechung“ [1]: Wenn $n \rightarrow 0$ geht, wird aus der Matrix q^{ab} eine Funktion $q(x)$ einer kontinuierlichen Variable x . Um diese Funktion $q(x)$ explizit zu finden, gibt es aber kein offensichtliches Kriterium!

Es würde zu weit führen, den von Parisi eingeschlagenen Weg im Detail (siehe z. B. [5, 6, 13]) darzustellen, hier müssen wir uns auf bruchstückartige Hinweise beschränken. Die $n \times n$ -Matrix q^{ab} besitzt Diagonalelemente $q^{aa} = 0$ und wird systematisch iterativ in immer kleinere Untermatrizen der Größe $m_\ell \times m_\ell$ aufgespalten. Bei großem positiven n gilt $n > m_1 > m_2 > \dots > 1$. Im Limes $n \rightarrow 0$ kehren sich die Ungleichungen um: $0 < m_1 < m_2 < \dots < 1$. Bei unendlich vielen solchen Partitionierungen entsteht eine kontinuierliche Variable $m_\ell \rightarrow x$, mit $0 < x < 1$.

Die hier vorliegende physikalische Interpretation ist die Existenz einer komplexen „Landschaft“ der freien Energie für $T < T_f$. Es gibt viele „Täler“, die durch unendlich hohe „Gebirgsbarrieren“ voneinander getrennt sind. Diese „Täler“ entsprechen den möglichen Ordnungszuständen des Spinglases. Diese Zustände sind aber nicht orthogonal zueinander, sondern können einen Überlapp q besitzen. Von zentraler Bedeutung ist hier die Wahrscheinlichkeit $P(q)$, dass ein Überlapp der Größe q vorkommt: $P(q) = dx(q)/dq$. Werden die (diskret gedachten) Zustände nach der Größe des Überlapps geordnet dargestellt, entsteht eine baumartige Struktur, man spricht von „ultrametrischer Symmetrie“.

Diese Theorie war so bahnbrechend und innovativ, dass es lange gedauert hat, rigoros zu beweisen, dass sie wirklich die niedrigste freie Energie des Modells liefert [14]. Es zeigt sich, dass die Molekularfeldtheorie der Spingläser deren Suszeptibilität in qualitativem Einklang mit den Experimenten beschreiben kann (Abb. 1).

Heutiger Stand und weitere Anwendungen

Diese Molekularfeldtheorie der Spingläser und darauf aufbauende Konzepte glasartiger Systeme haben sich als außerordentlich fruchtbar erwiesen, wie ein Blick auf die umfangreiche weiterführende Literatur zeigt, beispielsweise [15]. In den letzten Jahren fanden langsame Relaxationsprozesse besondere Beachtung, die bei der „Alterung“ auftreten. Damit sind Prozesse gemeint, die stattfinden, wenn man ein System erst zur Temperatur $T < T_f$ bringt und dann erst eine (makroskopisch große) Zeit t_w abwartet, bevor die Relaxation untersucht wird [16–19]. Im Jahr 2020 erschien eine Publikation [19] als Gemeinschaftsarbeit von 28 Autoren, darunter neben Giorgio Parisi auch Experimentalphysiker [18] (Abb. 2). Allerdings liegt hier nicht

das von Parisi [1] gelöste Edwards-Anderson-Sherrington-Kirkpatrick-Modell [9, 11] zugrunde, in dem jeder Spin mit jedem anderen wechselwirkt. Stattdessen kommt ein Modell zum Einsatz, bei dem Ising-Spins ($S_i = \pm 1$) auf den Plätzen eines einfach-kubischen Gitters mit ihren nächsten Nachbarn gemäß statistisch gewählter Kopplungen $J_{ij} = \pm J$ wechselwirken.

Dieses Modell wird mittels Monte-Carlo-Simulation untersucht [16, 17, 19]. Monte-Carlo-Simulationen dieses Modells wurden zwar schon seit Jahrzehnten versucht [5], auch vom Autor dieses Artikels: Aber im letzten Jahrhundert haben bei der Leistungsfähigkeit der Computer zu viele Größenordnungen gefehlt, um für derartige Simulationen von Spingläsern schlüssige Ergebnisse zu erhalten.

Die Ergebnisse der „JANUS-Kollaboration“ [17] waren erst möglich durch den Aufbau eines für Spinglas-Simulationen dedizierten Spezialrechners [20]. Wie zu erwarten war auch bei dieser Entwicklung Giorgio Parisi eine treibende Kraft: Sein Interesse, analytisch nicht lösbare Probleme mittels Monte-Carlo-Simulation auf dedizierten Spezialrechnern zu lösen, reicht lange zurück. Um nichtperturbative Effekte in der Elementarteilchentheorie mittels Gittertheorie zu studieren, initiierte er in den 1980er-Jahren das „APE Projekt“ [21]. Dieses stieß auch in Deutschland auf großes Interesse. In der Theorieabteilung von DESY in Berlin-Zeuthen wurden später solche Rechner installiert und betrieben. Dieses Gebiet der Gittertheorie

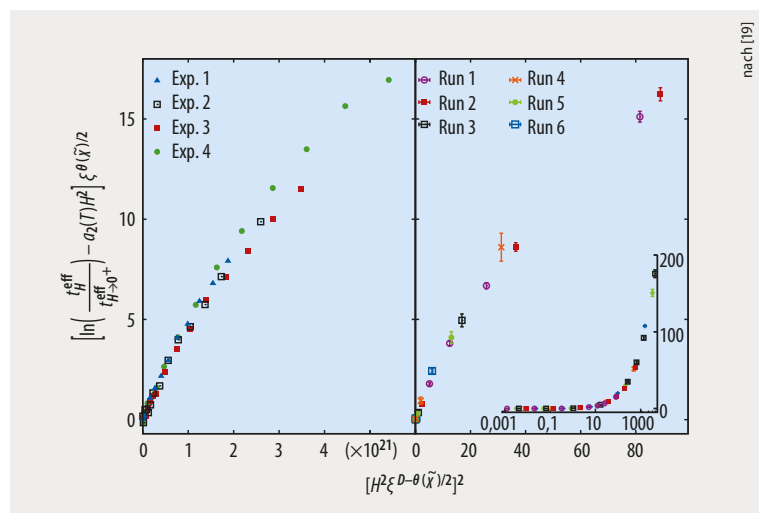


Abb. 2 Der nichtlineare Teil des Logarithmus' der Relaxationszeit t_H^{eff} skaliert aufgetragen gegen die skalierte 4. Potenz des Magnetfelds H . Links sind experimentelle Daten gezeigt, gewonnen an einem $\text{Cu}_{94}\text{Mn}_6$ -Einkristall ($T_f = 31,5$ K), bei vier Temperaturen zwischen 28,5 und 29 K (Exp. 1, 2, 3, 4), mit Wartezeiten t_w von 10 000 bis 20 000 Sekunden. Die Korrelationslänge ξ liegt bei 320 bis 390, gemessen in Einheiten des mittleren Abstands der Mn-Atome. Die Dimension D ist 3 und der „Replicon“-Exponent θ hat etwa den Wert 0,34. Die Relaxationszeit wird normiert mit ihrem Wert für H gegen Null, und ein Term proportional H^2 – mit einem durch Fit bestimmten Koeffizienten $a_2(T)$ – muss vor der Skalierung abgezogen werden. Rechts sind die Simulationen zu diesen Daten gezeigt, Ising-Spins auf dem einfach-kubischen Gitter mit Wechselwirkung $\pm J$ ($T_f = 1,102$ J), Lineardimension 160 Gitterkonstanten, drei Monte-Carlo-Läufe jeweils bei $T = 0,9$ J und $T = J$, mit Wartezeiten von 2^{22} bis 2^{32} versuchten Spin-Flips pro Spin. In der Simulation wurde t_H^{eff} bestimmt aus der Zeit, bei der ein Maximum der Spin-Korrelationsfunktion auftritt. Das Vorhandensein der gezeigten Skalierung verifiziert die Vorhersagen der analytischen Theorie.

rie wird weiterhin intensiv untersucht – heutzutage mithilfe kommerzieller Supercomputer.

Auch abseits der Spingläser hat die Replica-Methode einschließlich der Replica-Symmetrie-Brechung auf breiter Front Fortschritte ermöglicht, was sich hier nur andeuten lässt. Viele dieser Anwendungen gehen über die Probleme traditioneller theoretischer Physik hinaus, z. B. Optimierungsprobleme [22]. Ein bekanntes Beispiel ist das „Problem des fahrenden Händlers“, der auf einer Reise N Orte hintereinander aufsuchen soll. In diesem Modellproblem führen schnurgerade Straßen von jedem Ort zu jedem anderen, wobei die jeweiligen Entfernungen zwischen den Orten bekannt sind. Nun stellt sich folgende Frage: Wie verläuft die kürzeste Route für diese Reise? Während bei der Suche nach einem Spinglas-Grundzustand eine Spinkonfiguration gesucht wird, welche die Gesamtenergie des Systems minimiert, ist hier das Minimum der gesamten Streckenlänge gesucht.

Ein weiteres Gebiet, das von Konzepten der Spinglas-Theorie sehr profitiert hat, ist die Funktionsweise neuronaler Netze [23 – 25]. Darüber gibt es bereits inhaltsreiche Bücher [26], weshalb dieses Beispiel hier nur beiläufig angeführt sein soll. Man denkt dabei weniger an reale biologische Prozesse im Gehirn, die manche der Modelle [23, 24] motiviert haben. Hauptanwendung ist die Informationsverarbeitung in künstlichen Netzen gebildet aus einfachen Prozessoren [26]. Diese Netze lassen sich gewissermaßen mit in den Wechselwirkungen $\{J_{ij}\}$ „codierten“ Mustern „trainieren“, was deren Wiedererkennung ermöglicht. Sowohl zu den Optimierungsproblemen als auch den neuronalen Netzen hat Giorgio Parisi mit seinen Mitarbeitern viele wichtige Beiträge geleistet, aber auch zu vielen weiteren wichtigen Problemen: So ist beispielsweise die KPZ-Gleichung [27] für getriebene Grenzflächen mit seinem Namen verbunden.

Nur höchst selten finden sich theoretische Physiker mit einem ähnlich eindrucksvollen Œuvre wie Giorgio Parisi. Sehr bemerkenswert ist auch die Breite seiner wissenschaftlichen Interessen – sie reichen bis zum Flug der Starenschwärme über der Stadt Rom [28].

Literatur

- [1] G. Parisi, Phys. Lett. **73A**, 203 (1979), Phys. Rev. Lett. **43**, 1754 (1979), J. Phys. A **13**, L115, (1980), J. Phys. A **13**, 1101 (1980), J. Phys. A **13**, 1887 (1980) und Phys. Rep. **67**, 25 (1980)
- [2] E. Balcar und S. Lovesey, Theory of Magnetic Neutron and Photon Scattering, Clarendon, Oxford (1989)
- [3] P. Mohn, Magnetism in the Solid State, Springer, Berlin (2003)
- [4] V. Canella und J. Mydosh, Phys. Rev. **B6**, 4220 (1972)
- [5] K. Binder und A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986)
- [6] K. H. Fischer und J. Hertz, Spin Glasses, Cambridge University Press, Cambridge (1991)

- [7] J. Jäckle, Rep. Progr. Phys. **49**, 171 (1986)
- [8] K. Binder und W. Kob, Glassy Materials and Disordered Solids, World Scientific, Singapur (2011)
- [9] S. F. Edwards und P. W. Anderson, J. Phys. F: Metal Physics **5**, 965 (1975)
- [10] S. F. Edwards, in: Polymer Networks, A. J. Chomppff und S. Newman (Hrsg.), Plenum Press, New York (1971), S. 83
- [11] D. Sherrington und S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 1792 (1975)
- [12] J. R. L. de Almeida und D.-J. Thouless, J. Phys. A **11**, 983 (1978)
- [13] M. Mezard, G. Parisi und M. A. Virasovo, Spin Glass Theory and Beyond, World Scientific, Singapur (1987)
- [14] M. Talagrand, J. Stat. Phys. **126**, 837 (2007)
- [15] W. Janke (Hrsg.), Rugged Free Energy Landscapes: Common Computational Approaches to Spin Glasses, Structural Glasses, and Biological Macromolecules, Springer, Berlin (2008)
- [16] G. Parisi, Physik Journal, August/September 2011, S. 29
- [17] M. Baity-Jesi et al., Phys. Rev. Lett. **118**, 157202 (2017)
- [18] S. Guchhait und R. Orbach, Phys. Rev. Lett. **118**, 157203 (2017)
- [19] Q. Zhai et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 237202 (2020)
- [20] M. Baity-Jesi et al., Computer Phys. Commun. **185**, 550 (2014)
- [21] M. Albanese et al., Computer Phys. Commun. **45**, 345 (1987)
- [22] M. Mezard und A. Montanari, Information, Physics, and Computation, Oxford University Press, Oxford (2009)
- [23] W. A. Little, Math. Biosci. **19**, 10 (1974)
- [24] J. J. Hopfield, PNAS **79**, 2554 81982
- [25] D. J. Amit, H. Gutfreund und H. Sompolinsky, Phys. Rev. **A32**, 1007 (1985)
- [26] H. Nishimori, Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing, Oxford University Press, Oxford (2001)
- [27] M. Kardar, G. Parisi und Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56**, 889 (1986)
- [28] M. Ballerini et al., PNAS **105**, 1232 (2008)

Der Autor



Kurt Binder (FV Dynamik und Statistische Physik) promovierte 1969 bei Helmut Rauch (Atominstytut der Österreichischen Universitäten, Wien) und wechselte danach an das Physik-Department der TU München, wo er 1973 habilitierte. Sein Interesse für Spingläser wurde 1974 bei einem Gastaufenthalt bei Bell Laboratories (USA)

geweckt, durch einen Vortrag von P. W. Anderson über dessen gerade entstandene Theorie. Nach Professuren in Saarbrücken (1974 bis 77) und Köln (bzw. IFF, FZ Jülich, 1977 bis 83) übernahm er eine Professur an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz. Seit 2012 ist Kurt Binder emeritiert.

Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Kurt Binder, Institut für Physik, JGU Mainz, Staudinger Weg 9, 55128 Mainz