

Forschungsbericht 2006

1. Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern
2. Hochtemperaturreihenentwicklungen ungeordneter Systeme
3. Hochtemperaturreihenentwicklungen für „Bond“-Perkolation
4. Geometrische Beschreibung von Phasenübergängen
5. Perkolation von Vortexlinien im 3D kompakten U(1) Gitter-Higgs-Modell
6. Spincluster von Pottsmodellen auf Zufallsgraphen
7. „Balls-in-boxes“ Kondensation auf Netzwerken
8. Adsorption von Polymeren und Peptiden an festen Oberflächen
9. Verhalten synthetischer Peptide mit spezifischen Bindungseigenschaften an Halbleiteroberflächen
10. Helix-Coil-Übergänge bei synthetischen Peptiden
11. Realistische Charakteristiken der Faltung von Proteinen in mesoskopischen Modellen proteinartiger Heteropolymere
12. Mikrokanonische Analyse von Aggregationsprozessen proteinartiger Heteropolymere
13. Kristallisation und Kollaps flexibler kurzer „dünner“ und „dicker“ Polymere
14. Selbstvermeidende Zufallswege auf Fraktalen
15. Skalengesetze für logarithmische Korrektorexponenten
16. Kritische Amplitudenverhältnisse im Baxter-Wu-Modell
17. „Crossover“ von 2D nach 3D – Phasenübergänge in eingeschränkter Geometrie

18. Verdampfung und Kondensation eines Ising Tröpfchens
19. Oberflächenspannung des 2D Ising Modells mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung
20. Alterungsphänomene in Ferromagneten
21. Fußballfieber: Torverteilungen und nicht-Gaußsche Statistik
22. Quanten-Monte-Carlo-Simulationen
23. Das Spektrum des QCD Dirac-Operators auf dem Gitter und in der Random-Matrix Theorie
24. Wang-Landau multibondische Clustersimulationen für Phasenübergänge 2. Ordnung
25. Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden

Prof. Dr. Wolfhard Janke
FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie
FG Computational Quantum Field Theory
E-mail: wolfhard.janke@itp.uni-leipzig.de
<http://www.physik.uni-leipzig.de/CQT.html>

February 2007

Research Report 2006

(Abstracts in German)

1. Monte Carlo simulations of spin glasses
2. High-temperature series expansions for disordered systems
3. High-temperature series expansions for bond percolation
4. Geometrical approach to phase transitions
5. Vortex-line percolation in the 3D compact U(1) lattice Higgs model
6. Potts model spin clusters on random graphs
7. Balls-in-boxes condensation on networks
8. Adsorption of polymers and peptides to solid substrates
9. Behavior of specifically semiconductor-binding peptides
10. Helix-coil transitions of synthetic peptides
11. Realistic protein folding characteristics in mesoscopic models of protein-like heteropolymers
12. Microcanonical analysis of aggregation processes of protein-like heteropolymers
13. Crystallization and collapse of flexible “thin” and “thick” short-length polymers
14. Self-avoiding random walks on fractals
15. Scaling laws for logarithmic-correction exponents
16. Critical amplitude ratios in the Baxter-Wu model
17. Crossover from 2D to 3D – phase transitions in confined geometries
18. Evaporation/condensation transition of Ising droplets

19. Interface tension of the square lattice Ising model with next-nearest-neighbour interactions
20. Ageing phenomena in ferromagnets
21. Football fever: goal distributions and non-Gaussian statistics
22. Quantum Monte Carlo simulations
23. Spectrum of the QCD Dirac operator on the lattice and in random matrix theory
24. Wang-Landau multibondic cluster simulations for second-order phase transitions
25. Novel Monte Carlo simulation methods

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern

Monte Carlo simulations of spin glasses

2 Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Andreas Nußbaumer

3 In diesem Projekt untersuchen wir mittels Computersimulationen verschiedene Spinglasmodelle. Neben der Edwards-Anderson Ising (EAI) $\pm J$ -Formulierung betrachten wir vor allem das Sherrington-Kirkpatrick (SK) Molekularfeld- und das sog. ROM-Modell. Dafür wurde der von uns ursprünglich für das EAI-Modell entwickelte „Multi-Overlap“ Monte-Carlo-Algorithmus verallgemeinert und für die Benutzung des Supercomputers JUMP am ZAM/NIC Jülich angepaßt. Um eine effiziente Untersuchung der Ordnungsparameterverteilung auch bei sehr tiefen Temperaturen in der Spinglasphase zu gewährleisten, kombinierten wir diesen Algorithmus mit dem „Parallel-Tempering“ Verfahren. Sehr umfangreiche Simulationen des EAI-Modells mit diesem neuen Programmpaket sind in Vorbereitung. Für das SK-Modell haben wir damit bereits die Barrieren in der Freien Energie bestimmt und das „Finite-Size Scaling“ ihrer Höhen mit der Anzahl der Spins N analysiert. Unsere numerischen Daten zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit dem theoretisch abgeleiteten Gesetz $\propto N^\alpha$ und bestätigen den erwarteten Wert des Exponenten $\alpha = 1/3$. Als ein weiteres wichtiges Ergebnis finden wir, daß sich die Flanken der Barrierenhöhenverteilung sehr gut durch eine Fréchet-Verteilung beschreiben lassen. Die von uns gemessene Grundzustandsenergie für das SK-Modell stimmt ebenfalls sehr gut mit der theoretischen Vorhersage überein.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 “ENRAGE”: *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*, ESF-Forschungsprogramm SPHINX und externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Hochtemperaturreihenentwicklungen ungeordneter Systeme**

High-temperature series expansions for disordered systems

2 Dr. Meik Hellmund (Fakultät für Mathematik und Informatik),
Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 Gegenstand dieses sehr umfangreichen Projekts sind die Erzeugung und Analyse von Hochtemperaturreihenentwicklungen für D -dimensionale q -Zustand Potts-Modelle mit eingefrorener („quenched“) Unordnung in den Kopplungskonstanten J_{ij} . Besonders wichtige Spezialfälle sind Ferromagnete mit zufälligen Verunreinigungen (z.B. $J_{ij} = J_1 \geq 0$ oder $J_2 \geq 0$) und Spingläser ($J_{ij} = \pm J$). Durch eine Reihe von deutlichen algorithmischen Verbesserungen (Reduktion des Rechenaufwands um mehr als 6 Größenordnungen) konnten die Reihenentwicklungen bis zur 21. Ordnung wesentlich verlängert werden. Neue Ergebnisse konnten für das „Bond-Diluted“ Ising-Modell in 3, 4 und 5 Dimensionen gewonnen werden, wobei insbesondere die obere Grenzdimension $D = 4$ von Interesse ist, da hier im reinen Modell logarithmische Korrekturen zur Molekularfeldtheorie auftreten und für den ungeordneten Fall eine spezielle Singularitätsstruktur vorhergesagt wurde. Für höheren Dimensionen bestätigen unsere Ergebnisse die kritischen Exponenten der Molekularfeldtheorie und insbesondere die Unabhängigkeit dieser Exponenten von der Unordnungsstärke auch für stark ausgedünnte Gitter nahe der Perkolationsschwelle.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Hochtemperaturreihenentwicklungen für „Bond“-Perkolation**

High-temperature series expansions for bond percolation

2 Dr. Meik Hellmund (Fakultät für Mathematik und Informatik),
Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 In diesem Teilprojekt konzentrierte sich unsere Arbeit vor allem auf die Schwellwerte und kritischen Exponenten des „Bond“-Perkulationsmodells in beliebigen Dimensionen, das als Spezialfall $q \rightarrow 1$ in der allgemeinen Formulierung des q -Zustand Potts-Modells enthalten ist. Hier wurde insbesondere Perkolation auf hochdimensionalen Gittern (bis $D = 14$) untersucht und die Perkolationsschwelle präzise bestimmt. Ein weiterer Aspekt ist der Spezialfall $q \rightarrow 0$ (Baum-Perkolation), für den erstmals kritische Exponenten durch Reihenentwicklungen bestimmt wurden.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Geometrische Beschreibung von Phasenübergängen

Geometrical approach to phase transitions

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de],
Dr. Adriaan Schakel (FU Berlin)

3 Das Ziel dieses Projekts ist, durch analytische und numerische Methoden zu einer möglichst einfachen geometrischen Beschreibung von einer Vielfalt von Phasenübergängen zu gelangen. Dabei bilden 2D Modelle zunächst das Hauptthema, da hierfür viele exakte Ergebnisse für Vergleiche herangezogen werden können. Mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen ist die fraktale Struktur des 2D Ising-Modells in der Nähe des kritischen Punktes untersucht worden. Durch eine exakte Umschreibung kann das kritische Verhalten des Modells als Perkolation von geeignet definierten, sog. Fortuin-Kasteleyn-Clustern beschrieben werden. Sowohl die fraktale Dimension dieser Cluster als auch die der Clusterränder sind numerisch mit hoher Präzision bestimmt worden. Beide fraktale Strukturen kodieren die kritischen Eigenschaften des Modells. Im Rahmen dieses Projekts wurde schon vorher gezeigt, daß naive Spincluster (tri-)kritische Eigenschaften in ihrer fraktalen Struktur enthalten, und zwar die des verdünnten Modells. Es wurde eine Abbildung gefunden, die die fraktalen Dimensionen der beiden Clustertypen ineinander überführt. Die Richtigkeit dieser Abbildung konnte durch numerische Simulationen bestätigt werden. Aufbauend auf diese numerischen Ergebnisse konnten wir das berühmte Resultat von de Gennes, das die Hochtemperaturentwicklung des $O(N)$ -Modells im Limes $N \rightarrow 0$ mit der Konformationsentropie einer selbstvermeidenden Polymerkette verknüpft, auf beliebige $-2 \leq N \leq 2$ erweitern. Auch der sog. Θ -Punkt, an dem eine Polymerkette kollabiert, wurde entsprechend verallgemeinert.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/17-3, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 "ENRAGE": *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Perkolation von Vortexlinien im 3D kompakten U(1) Gitter-Higgs-Modell**

Vortex-line percolation in the 3D compact U(1) lattice Higgs model

2 Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Adriaan Schakel(FU Berlin), Sandro Wenzel

3 Wir untersuchen das kritische Perkolationsverhalten von Netzwerken aus Vortexlinien im 3D kompakten U(1) Gitter-Higgs-Modell, die rein geometrisch definiert sind, und vergleichen dieses mit dem kritischen Verhalten der magnetischen und energetischen Größen des Systems. Wir finden, daß die Perkolationübergänge für kleine Werte der Higgs-Kopplung mit der Linie von Phasenübergängen 1. Ordnung der thermodynamischen Größen übereinstimmt. Eine Abweichung beobachten wir für den Bereich wo kein Phasenübergang im strengen thermodynamischen Sinne erfolgt, sondern nur eine Phasengrenze, die sog. Kertész-Linie, vorhanden ist. Nur die Perkolationsobservablen zeigen auch in diesem Bereich singuläres Verhalten, das durch Perkolationsexponenten charakterisiert werden kann, nicht aber die üblichen thermodynamisch definierten Größen. Weiterführende Untersuchungen dieser Netzwerke sind geplant.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 "ENRAGE": *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Spincluster von Potts-Modellen auf Zufallsgraphen

Potts model spin clusters on random graphs

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Martin Weigel (Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland)

3 Ordnungsübergänge in magnetischen Systemen sind durch das Anwachsen der Größe homogen magnetisierter Bereiche in der Nähe des Phasenübergangs gekennzeichnet. Die Frage nach möglichen Verbindungen zwischen diesem geometrischen Perkulationsverhalten und den universellen kritischen Eigenschaften des Ordnungsübergangs wird seit langem in der statistischen Physik untersucht. Während seit etwa 30 Jahren bekannt ist, daß die perkulativen Eigenschaften von statistisch nach dem Fortuin-Kasteleyn-Coniglio-Klein-Modell ausgedünnten Spinclustern exakt das kritische Verhalten des Ordnungsübergangs des betrachteten Modells widerspiegeln, wurde erst in jüngerer Zeit klar, daß die eigentlichen Cluster homogen magnetisierter Bereiche mit dem *trikritischen* Zweig des betrachteten kritischen Punkt zusammenhängen. Wir betrachteten hier speziell das Verhalten des Potts-Modells auf den Zufallsgraphen der Formulierung von (zweidimensionaler) Quantengravitation mit Hilfe von dynamischen Triangulierungen. Es stellt sich heraus, daß sich unter Zuhilfenahme einer Dualität von kritischem und trikritischem Zweig und der Liouville-Theorie der Quantengravitation exakte Werte für die fraktalen Dimensionen und weitere kritische Exponenten der geometrischen und stochastischen Cluster des Potts-Modells auf Zufallsgraphen theoretisch berechnen lassen. Diese Resultate finden wir für den Fall des Ising-Modells durch ausführliche numerische Simulationen bestätigt.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (EU-Forschungsnetz HPRN-CT-1999-000161 “Discrete Random Geometries: From Solid State Physics to Quantum Gravity” und EU-Marie-Curie-Stipendium MEIF-CT-2004-501422)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 „Balls-in boxes“ Kondensation auf Netzwerken

Balls-in-boxes condensation on networks

2 Dr. Leszek Bogacz, Prof. Dr. Zdzisław Burda (Jagellonian Universität Krakau, Polen) Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Bartłomiej Waclaw

3 In diesem Teilprojekt der Alexander von Humboldt-Institutspartnerschaft mit der Universität Krakau analysieren wir zwei verschiedene Kondensationsmechanismen in “zero-range” Prozessen auf Netzwerken. In sogenannten q -regulären Netzwerken beruht die Kondensation auf spontaner Brechung der Permutationssymmetrie, während sie in irregulären Netzwerken auf eine explizite Verletzung dieser Symmetrie zurückzuführen ist. Als Beispiel für den letzteren Fall betrachten wir ein minimalistisches Modell, in dem die Irregularität durch einen einzigen Q -Knoten mit $Q \neq q$ hervorgerufen wird. Die Statik und Dynamik des “zero-range” Prozesses hängt hier vom Parameter $\alpha = \ln(Q/q)$ ab. Als zentrales Ergebnis können wir analytisch zeigen, daß die Verteilung der Teilchenanzahlen auf den regulären Knoten exponentiell abfällt und daß die Zeitskala für das Schmelzen eines Kondensats auf dem Q -Knoten exponentiell mit der Netzwerkgröße N anwächst. Dieses Verhalten unterscheidet sich deutlich von dem für reguläre Netzwerke mit $\alpha = 0$, wo die Zustandssumme invariant ist unter Permutationen der Besetzungszahlen der verschiedenen Knoten und die Zeitskala für das Schmelzen des Kondensats typischerweise nur mit einer Potenz der Netzwerkgröße anwächst.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Institutspartnerschaft Nr. 3.4-Fokoop-DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 “ENRAGE”: *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*, EU-Marie Curie Development Host Fellowship Nr. HPMD-CT-2001-00108 und DAAD Forschungsstipendium)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Adsorption von Polymeren und Peptiden an festen Oberflächen

Adsorption of polymers and peptides to solid substrates

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 Die umfassende Untersuchung des Bindungsverhaltens von Homopolymeren und proteinartigen Heteropolymeren mit Hilfe einfacher Gittermodelle offenbart ein überraschend reiches Spektrum an strukturellen Pseudophasen. Teilweise ist die Dominanz bestimmter Strukturen auf die endliche Größe der Polymere zurückzuführen und verschwindet im sogenannten thermodynamischen Limes, d.h., in der Extrapolation zu unendlich großen Systemen. Die Tatsache, daß insbesondere Proteine endlich sind und daher nicht ins Unendliche fortgesetzt gedacht werden können, macht aber auch eine systematische Betrachtungsweise dieser Subphasen erforderlich, da sie prinzipiell auch experimentell verifizierbar sind.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Verhalten synthetischer Peptide mit spezifischen Bindungseigenschaften an Halbleiteroberflächen

Behavior of specifically semiconductor-binding peptides

2 Dr. Michael Bachmann, Karsten Goede (Abteilung HLP), Prof. Dr. Marius Grundmann (Abteilung HLP), Prof. Dr. Anders Irbäck (Lund University, Sweden), Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Simon Mitternacht (Lund University, Sweden), Stefan Schnabel

3 Im Mittelpunkt dieses Projektes steht die Untersuchung des Verhaltens von vier synthetischen Peptidsequenzen in wäßriger Lösung. Von experimenteller Seite war kürzlich nachgewiesen worden, daß drei der Sequenzen ein besonders schlechtes Bindungsverhalten an (100) Silizium-Oberflächen aufweisen, während die vierte sehr viel besser an diesem Substrat haftet. Tatsächlich konnten wir mit Hilfe eines mikroskopischen Proteinmodells zeigen, daß sich das thermodynamische Verhalten dieser vierten Sequenz bereits im Lösungsmittel (ohne Substrat) von den anderen unterscheidet, was vornehmlich auf sterische Eigenschaften der in den Sequenzen enthaltenen Aminosäure Prolin zurückzuführen ist.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1, projektbezogenes Personenaustauschprogramm mit Schweden (DAAD-STINT))

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Helix-Coil-Übergänge bei synthetischen Peptiden**

Helix-coil transitions of synthetic peptides

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Tarık Çelik (Hacettepe University, Ankara, Turkey), Gökhan Gököğlü (Hacettepe University, Ankara, Turkey), Prof. Dr. Wolffhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 Anhand von Ergebnissen aus multikanonischen Monte-Carlo-Computersimulationen eines “All-Atom”-Proteinmodells werden thermodynamische und strukturelle Eigenschaften der im Faltungsprozeß auftretenden Helix-Coil-Übergänge verschiedener synthetischer Peptide analysiert und miteinander verglichen. Von besonderem Interesse ist dabei, inwieweit die Eigenschaften der strukturellen Übergänge von den Sequenzen der Peptide abhängen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1, TÜBİTAK (The Scientific & Technological Research Council of Turkey) Stipendium, Stipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Realistische Charakteristiken der Faltung von Proteinen in mesoskopischen Modellen proteinartiger Heteropolymere**

Realistic protein folding characteristics in mesoscopic models of protein-like heteropolymers

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Stefan Schnabel

3 Ein faszinierendes Ergebnis unserer Untersuchungen des Faltungsverhaltens von Heteropolymeren in stark vereinfachten, vergrößerten hydrophob-polaren Modellen auf mesoskopischer Skala ist, daß typische natürliche Charakteristiken der tertiären Faltung von Proteinen trotz Vernachlässigung sämtlicher mikroskopischer Details reproduziert werden können. Das ist als deutlicher Hinweis darauf zu verstehen, daß tertiäre Proteinfaltung eine im wesentlichen durch hydrophobe Kräfte und intrinsische sterische Beschränkungen bedingte Strukturbildung ist.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Mikrokanonische Analyse von Aggregationsprozessen proteinartiger Heteropolymere**

Microcanonical analysis of aggregation processes of protein-like heteropolymers

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Christoph Junghans

3 In diesem Projekt, bei dem es primär um thermodynamische Eigenschaften des Aggregationsprozesses von Proteinen ging, wurde eingehend ein fundamentaler Aspekt der statistischen Physik untersucht: Die Bedeutung der unterschiedlichen Interpretationen der Analyse endlich großer Systeme bei fester Energie (mikrokanonisch) oder Temperatur (kanonisch). Im vorliegenden Fall führt die Phasenseparation und die damit verbundene Grenzflächenspannung zum sogenannten „Backbending“-Effekt, d.h., der Abkühlung des Aggregates trotz Energiezufuhr. In der Konsequenz ist die Temperatur – auch experimentell – kein geeigneter Steuerparameter mehr. Seitens der Statistik ist die mikrokanonische der kanonischen Betrachtungsweise, zumindest in der physikalischen Interpretation der Ergebnisse, vorzuziehen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Kristallisation und Kollaps flexibler kurzer „dünner“ und „dicker“ Polymere**

Crystallization and collapse of flexible “thin” and “thick” short-length polymers

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Ulrich H.E. Hansmann (NIC, Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Thomas Neuhaus (NIC, Forschungszentrum Jülich), Thomas Vogel

3 Dieses Projekt betrifft strukturelle Übergänge von Polymermodellen, bei denen das Polymer als linienartig („dünn“) oder mit effektiver Ausdehnung senkrecht zur Bindungsrichtung („dick“) betrachtet wird. Die Dicke, die effektiv der räumlichen Ausdehnung von Seitenketten Rechnung trägt, wird dabei simuliert durch einen vorgegebenen globalen Krümmungsradius, durch den aber auch das Verhalten bei strukturellen Übergängen beeinflusst wird. Ein Aspekt dieses Projektes ist also die Analyse des Phasenverhaltens von Polymermodellen in Abhängigkeit der Dicke. In einem damit in Zusammenhang stehenden Unterprojekt haben wir mit Hilfe eines einfachen Gittermodells untersucht, wie Kristallisation und Kollaps flexibler Polymere von der Anzahl der Monomere abhängen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Selbstvermeidende Zufallswege auf Fraktalen

Self-avoiding random walks on fractals

2 Dr. Viktoria Blavatska, Prof. Dr. Yuriy Holovatch (Ukrainian Academy of Sciences, Lviv, Ukraine), Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 In diesem Projekt studieren wir das Skalierungsverhalten von linearen Polymeren in ungeordneten Medien, die durch selbstvermeidende Zufallswege (SAW) auf dem „Backbone“ von drei- und vierdimensionalen Perkolationsclustern modelliert werden. Um Diskrepanzen in früheren analytischen Arbeiten besser zu verstehen, verwenden wir hier numerische Computersimulationen mit der „Pruned-Enriched“ Rosenbluth Kettenwachstumsmethode (PERM). Unser Hauptaugenmerk liegt dabei auf den kritischen Exponenten, die die Unordnungsmittelwerte des „End-to-End“ Abstandes und der Anzahl der selbstvermeidenden Zufallswege charakterisieren.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Forschungsstipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Skalengesetze für logarithmische Korrektorexponenten**

Scaling laws for logarithmic-correction exponents

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Prof. Dr. Desmond A. Johnston (Heriot-Watt University, Edinburgh, Schottland), Dr. Ralph Kenna (Coventry University, England)

3 Das kritische Verhalten von Phasenübergängen wird häufig durch multiplikative logarithmische Korrekturen modifiziert. Durch eine allgemeine Analyse der Fisher- und Lee-Yang-Nullstellen von Zustandssummen zeigen wir, daß die kritischen Exponenten dieser logarithmischen Korrekturen ähnlich wie die der führenden Singularitäten untereinander in Beziehung stehen. Wir leiten einen neuen Satz von Skalengesetzen ab, der mit allen verfügbaren Ergebnissen in der Liiteratur konsistent ist. Für einige Modelle gelingt es uns auf diese Weise, neue Vorhersagen für logarithmische Korrekturen zu machen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 "ENRAGE": *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Kritische Amplitudenverhältnisse im Baxter-Wu-Modell

Critical amplitude ratios in the Baxter-Wu model

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Prof. Dr. Lev N. Shchur (Landau Institute, Chernogolovka, Rußland)

3 Neben kritischen Exponenten sind bei Phasenübergängen 2. Ordnung auch gewisse Amplitudenverhältnisse universell, d.h. sie hängen also ebenfalls nicht von den Details des betrachteten Systems ab. So läßt sich z.B. die magnetische Suszeptibilität χ in der Nähe der kritischen Temperatur T_c durch ein Potenzgesetz beschreiben, $\chi \sim \Gamma_{\pm} |T/T_c - 1|^{-\gamma}$, wobei γ der kritische Exponent ist und Γ_+ bzw. Γ_- die kritische Amplitude in der Hoch- bzw. Tieftemperaturphase bezeichnet. Das Amplitudenverhältnis Γ_+/Γ_- ist dann universell. Kürzlich ist dieses Amplitudenverhältnis für das 2D q -Zustand Potts-Modell mit $q = 2, 3$ und 4 mit analytischen Methoden approximativ berechnet worden. Während diese Vorhersage für $q = 2$ und 3 mit Hilfe von numerischen Methoden (Monte-Carlo-Simulationen und Hochtemperaturreihenentwicklungen) bestätigt werden konnte, ist die Situation für $q = 4$ noch weitgehend unklar. Der Grund hierfür sind vermutlich vor allem die relativ starken logarithmischen Korrekturen zum führenden Skalenverhalten. Um diese Vermutung zu überprüfen, betrachten wir das 2D Baxter-Wu-Modell (ein Modell mit Dreispinwechselwirkung auf einem Dreiecksgitter), das in derselben Universalitätsklasse liegt, von dem aber bekannt ist, daß keine logarithmischen Korrekturen auftreten. Für dieses Modell wurden deshalb umfangreiche Monte-Carlo-Simulationen auf großen Gittern durchgeführt.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Gastwissenschaftlerprogramm)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **„Crossover“ von 2D nach 3D – Phasenübergänge in eingeschränkter Geometrie**

Crossover from 2D to 3D – phase transitions in confined geometries

2 Thomas Haase, Prof. Dr. Wolfram Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 Phasenübergänge in 2D und 3D Systemen mit ansonsten identischen Wechselwirkungen unterscheiden sich auch in ihrem qualitativen Verhalten deutlich, d.h. sie sind z.B. durch unterschiedliche kritische Exponenten charakterisiert. Mehrschichtsysteme, die heutzutage auch experimentell zugänglich sind, können als Interpolation zwischen diesen beiden Grenzfällen aufgefaßt werden. Dabei treten in Abhängigkeit von der Schichtdicke „Crossover“-Effekte auf, die in diesem Projekt zunächst für das Ising-Modell mit Hilfe numerischer Computersimulationen genauer untersucht werden. Die Ergebnisse für (effektive) kritische Exponenten können mit allgemeinen Skalierungsbetrachtungen und mit feldtheoretischen Vorhersagen verglichen werden.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/23-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Verdampfung und Kondensation eines Ising Tröpfchens**

Evaporation/condensation transition of Ising droplets

2 Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Thomas Neuhaus (NIC Jülich), Andreas Nußbaumer

3 Wir wollen in diesem Projekt mittels Computersimulationen die analytischen Ergebnisse von Biskup *et al.* [*Europhys. Lett.* **60** (2002) 21] zum Kondensations-/Verdampfungsübergang in einem System mit Dampf und Flüssigkeit im Grenzfall unendlich großer Systeme überprüfen und die Korrekturen für endliche Systeme („Finite-Size Scaling“) herausarbeiten. Dazu verwenden wir die Äquivalenz zwischen dem Gitter-Gas-Modell und dem Spin-1/2 Ising-Modell. Wir simulieren das zweidimensionale Ising-Modell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung auf einem quadratischen Gitter, wobei die Magnetisierung mittels Kawasaki-Dynamik konstant gehalten wird, was einer konstanten Teilchenzahl im Flüssigkeit/Dampf System entspricht. Unter Verwendung analytischer Ergebnisse für die Suszeptibilität, die spontane Magnetisierung und die freie Energie der Grenzfläche im unendlich großen System finden wir eine sehr gute Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage. Um die Universalität der Skalengesetze zu untersuchen, wurden auch umfangreiche Simulationen für andere Gitter- bzw. Wechselwirkungstypen durchgeführt, die noch abschließend ausgewertet werden müssen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Oberflächenspannung des 2D Ising Modells mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung

Interface tension of the square lattice Ising model with next-nearest-neighbour interactions

2 Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Andreas Nußbaumer

3 In einer kürzlich veröffentlichten Arbeit von Zandvliet [*Europhys. Lett.* **73** (2006) 747] wurde ein analytisches Ergebnis für die Oberflächenspannung des 2D Ising Modells mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung abgeleitet. Ziel dieses Projekts war es, die Richtigkeit dieser Ergebnisse zu untersuchen. Hierbei haben wir festgestellt, daß der von Zandvliet verwendete Zugang zur klassischen „Solid-on-Solid“ (SOS) Näherung äquivalent ist, welche für Nächster-Nachbar-Wechselwirkung nur in Hauptachsenrichtung mit der exakten Lösung von Onsager übereinstimmt. Um zu untersuchen wie gut die Näherungslösung von Zandvliet für das Modell mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung übereinstimmt, führten wir umfangreiche Monte-Carlo-Simulationen durch und bestimmten mittels einer „Finite-Size Scaling“ Analyse sowohl die Übergangspunkte als auch die Oberflächenspannung für verschiedene Wechselwirkungsstärken. Mit unseren Ergebnissen konnten wir zeigen, daß die von Zandvliet angegebene Formel für die Oberflächenspannung zwar eine ziemlich gute Näherung ist, aber keine exakte Lösung darstellt.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Alterungsphänomene in Ferromagneten

Ageing phenomena in ferromagnets

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Eric Lorenz, Rodrigo Megaidés (Brunel Univ. of West London, England)

3 Wenn ein vollständig ungeordneter Ferromagnet plötzlich auf eine Temperatur unterhalb des Curiepunktes in seine geordnete Phase abgekühlt wird, zeigt seine zeitliche Relaxation Alterungsphänomene, die kürzlich mit Hilfe dynamischer Symmetrieargumente theoretisch beschrieben werden konnten. Da diese Argumente auf verschiedenen Annahmen beruhen, sind die daraus folgenden Voraussagen für das Ising-Modell mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen überprüft worden, wobei eine sehr gute Übereinstimmung gefunden wurde. Dennoch ist es für die Allgemeingültigkeit der Aussagen wichtig, noch weitere Vergleiche durchzuführen. Wir haben deshalb das 2D 3- und 8-Zustand Potts-Modell betrachtet und sowohl Zwei-Zeit-Korrelationen als auch die thermoremanente Antwortfunktion mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen bestimmt. Hierbei präpariert man sehr viele statistisch unabhängige Startsituationen, verfolgt dann jeweils die Zeitentwicklung des Systems und bestimmt schließlich Mittelwerte. Unsere Resultate zeigen auch für diese beiden Modelle eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen.

Recht ähnliche Phänomene lassen sich auch für das sog. gonihe-drische Spinmodell beobachten, das ursprünglich als effektive Beschreibung von Oberflächen- bzw. "String"-Modellen entwickelt worden ist. Nach einer detaillierten Überprüfung und teilweisen Erweiterung bisheriger Ergebnisse für die Formulierung mit diskreten Ising-Spins ($s = \pm 1$) haben wir dieses Modell auf kontinuierliche XY-Spins ($\vec{s} = (\cos(\theta), \sin(\theta))$) erweitert und mit ersten Untersuchungen der dort ebenfalls auftretenden Alterungsphänomene begonnen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1 und ESF-Forschungsprogramm SPHINX "Statistical Physics of Glassy and Non-Equilibrium Systems")

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Fußballfieber: Torverteilungen und nicht-Gaußsche Statistik**

Football fever: goal distributions and non-Gaussian statistics

2 Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Andreas Nußbaumer, Martin Weigel (Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland)

3 Mit Hilfe von statistischen Methoden analysieren wir Fußballergebnisse und untersuchen, wie sich die kooperative Natur des Spiels in den gemittelten Eigenschaften auswirkt, wie z. B. in der Verteilung der Anzahl der Tore der Heim- bzw. der Gastmannschaft. Es zeigt sich, daß die Verteilungen und insbesondere die Flanken *nicht* durch das Poisson- oder Binomialmodell beschrieben werden können, dem unkorrelierte Zufallsereignisse zu Grunde liegen. Stattdessen können die Daten mittels weniger elementarer Verteilungen, wie beispielsweise der negativen Binomialverteilung oder der Extremwertverteilung, beschrieben werden. Um dieses Verhalten mikroskopisch zu verstehen, bedarf es dabei jedoch weder eines Extremal- noch eines Warteprozesses. Mittels eines modifizierten Bernoulli-Prozesses, der aus einem Poissonmodell und einer einfachen Komponente der *Selbstverstärkung* („*self-affirmation*“) besteht, können die Abweichungen zur Gaußschen Statistik erklärt werden. Die bisher verwendeten phänomenologischen Verteilungen ergeben sich dann als Spezialfälle unseres Systems. Wir haben historische Fußballergebnisse vieler europäischer Ligen und internationaler Turniere analysiert, und finden, dass unsere vorgeschlagenen Modelle sehr universell anwendbar sind. Im einzelnen haben wir die Ergebnisse der deutschen Frauen-Bundesliga, der höchsten Spielklassen der Männer in der BRD und DDR während des Kalten Krieges und der deutschen Bundesliga nach der Wiedervereinigung 1990 betrachtet. Dabei wurde unter anderem untersucht, ob der Selbstverstärkungseffekt von kulturellen und politischen Umständen abhängt.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 “ENRAGE”: *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics* und EU-Marie-Curie-Stipendium MEIF-CT-2004-501422)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Quanten-Monte-Carlo-Simulationen

Quantum Monte Carlo simulations

- 2 Rainer Bischof, Dr. Leszek Bogacz, Dr. Peter Crompton, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Sandro Wenzel Prof. Dr. He-Ping Ying (Zhejiang University, Hangzhou, China), Prof. Dr. Bo Zheng (Zhejiang University, Hangzhou, China)

- 3 In einem Teilprojekt wenden wir den (kontinuierlichen) Quanten-Monte-Carlo-Loop-Cluster-Algorithmus zur Simulation von Quantenphasenübergängen in quasi-eindimensionalen Systemen an, die im sogenannten „Valence Bond Solid“ Bild beschrieben werden können und wichtige Supraleitungsphänomene in der Tieftemperaturphase zeigen. Dieser Algorithmus gestattet das Studium von Bereichen, die früher aus algorithmischen Gründen nicht erreicht werden konnten. Insbesondere können damit auch Quanteninterferenzeffekte für gemischte Spinketten mit höheren Spinquantenzahlen untersucht werden.

Ferner wurden ferromagnetische Spinketten in einem äußeren Magnetfeld mit Hilfe der “Stochastic Series Expansion (SSE)” Methode untersucht. Die Motivation dafür stammt von kürzlichen analytischen Untersuchungen von I. Junger und D. Ihle (Abt. TKM), die für die scheinbar einfache Spin-1/2-Kette einen nicht erwarteten Doppelpack in der spezifischen Wärme ergeben haben. Diesen überraschenden Effekt haben wir zunächst mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen überprüft, wobei als neues Ergebnis nun auch die Systemgrößenabhängigkeit systematisch studiert werden konnte. In einem weiteren Schritt ist auch die Abhängigkeit dieses Effekts von höheren Spinquantenzahlen $S = 1, 3/2, 2, \dots$ untersucht worden, wofür parallel analytische Näherungsformeln in der Abt. TKM entwickelt wurden.

- 4 Weiterführung: ja

- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Stipendium der deutschen Studienstiftung, EU-Marie Curie Development Host Fellowship Nr. HPMD-CT-2001-00108 und projektbezogenes DAAD Personenaustauschprogramm mit China)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Das Spektrum des QCD Dirac-Operators auf dem Gitter und in der Random-Matrix Theorie

Spectrum of the QCD Dirac operator on the lattice and in random matrix theory

2 Dr. Gernot Akemann (Brunel Univ. of West London, England),
Dr. Elmar Bittner [bittner@itp.uni-leipzig.de]

3 Wir vergleichen analytische Ergebnisse der Random-Matrix Theorie mit Simulationen der zwei-Farben QCD auf dem Gitter unter Berücksichtigung des chemischen Potentials. Unter Verwendung von Staggered Fermionen sind die Eigenwerte des Dirac-Operators komplex konjugierte Paare und die Wirkung reell. Dadurch können wir mittels standard Monte-Carlo-Verfahren diese Theorie simulieren und finden eine sehr gute Übereinstimmung mit den Random-Matrix Ergebnissen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 "ENRAGE": *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics* und externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Wang-Landau multibondische Clustersimulationen für Phasenübergänge 2. Ordnung**

Wang-Landau multibondic cluster simulations for second-order phase transitions

2 Prof. Dr. Bernd A. Berg (Florida State University, Tallahassee, USA), Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de]

3 Bei Phasenübergängen 2. Ordnung ist der interessierende kritische Energiebereich größer als mit kanonischen Monte-Carlo-Simulationen abgedeckt werden kann. Grundsätzlich kann ein beliebig gewählter erweiterter Bereich erreicht werden, indem man zunächst mit Hilfe einer Wang-Landau Rekursion die spektrale Dichte approximiert und dann mit festgehaltenen Gewichtungsfaktoren eine multikanonische Simulation durchführt. Dabei verliert man in der konventionellen Formulierung allerdings den Vorteil von Clusteralgorithmen. Wir entwickeln in diesem Projekt deshalb eine Clusterversion der Wang-Landau Rekursion mit anschließenden multibondischen Simulationen. Unsere Ergebnisse für das 2D und 3D Ising-Modell zeigen, daß mit diesem neuen Verfahren die Effizienz gegenüber der konventionellen Wang-Landau/multikanonischen Methode um Potenzen in der Gittergröße gesteigert werden kann, wenn die erfaßten Energiebereiche geeignet mitskaliert werden.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/23-1 und US Department of Energy Contract DE-FG02-97ER41022)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden

Novel Monte Carlo simulation methods

2 Mathias Aust, Dr. Michael Bachmann, Rainer Bischof, Dr. Elmar Bittner, Frank Beyer, Dr. Viktoria Blavatska, Dr. Leszek Bogacz, Dr. Peter Crompton, Thomas Haase, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Christoph Junghans, Anna Kallias, Eric Lorenz (Amsterdam, Niederlande), Andreas Nußbaumer, Dr. Adriaan Schakel (FU Berlin), Stefan Schnabel, Jakob Schluttig (Universität Heidelberg), Thomas Vogel, Bartłomiej Waclaw, Dr. Martin Weigel (Univ. of Waterloo, Canada), Sandro Wenzel

3 In den letzten Jahren sind eine Reihe neuartiger Algorithmen für Monte-Carlo-Simulationen vorgeschlagen worden, die die benötigten Rechenzeiten z.Tl. drastisch herabsetzen. Es ist deshalb von großer Wichtigkeit, diese Entwicklungen zu verfolgen und durch eigene Implementierungen zu testen. Einige dieser Verfahren sind nur recht heuristisch begründet und erfordern noch eingehende Untersuchungen. Insbesondere ist aus den Angaben in der Literatur die Effizienz der verschiedenen neuen Algorithmen im Vergleich zu anderen, bereits etablierteren Verfahren oft nur sehr schwer zu beurteilen. Begleitend zu den anderen Projekten führen wir deshalb systematische Vergleiche durch, wobei z.Zt. „Parallel Tempering“, „Broad“- und „Flat-Histogram“-Techniken, multikanonische Methoden, das Wang-Landau-Verfahren, Hochtemperaturgraphenmethoden, verschiedene Wurmalgorithmen, „Loop-Cluster“-Algorithmen und stochastische Reihentwicklungen für Quanten-Monte-Carlo-Simulationen sowie nicht-Markov Strategien bei sogenannte „Chain Growth“-Algorithmen mit optimierter Populationskontrolle („Go-With-The-Winners“) für (Hetero-)Polymersimulationen im Vordergrund unserer Untersuchungen stehen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1, JA 483/23-1 und JA 483/24-1, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 “ENRAGE”: *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Economics*, EU-Marie Curie Development Host Fellowship Nr. HPMD-CT-2001-00108)