

Forschungsbericht 2007

1. Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern
2. Hochtemperaturreihenentwicklungen für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser
3. Hochtemperaturreihenentwicklungen für „Baum“-Perkolation
4. Selbstvermeidende Zufallswege auf Fraktalen
5. Geometrische Beschreibung von Phasenübergängen
6. Perkolation von Vortexlinien im 3D kompakten U(1) Gitter-Higgs-Modell
7. Potts-Modell Spincluster und „Loop“-Gase auf Zufallsgraphen
8. „Zero-Range“ Prozesse auf Netzwerken
9. Aggregation von Polymeren
10. Aggregation des mit der Alzheimer-Krankheit assoziierten $A\beta$ -Peptids
11. Adsorption von semiflexiblen Polymeren an festen Oberflächen
12. Untersuchung des spezifischen Bindungsverhaltens kleiner Proteine an Halbleiteroberflächen
13. Kinetik des Zwei-Zustands-Faltungsverhaltens von Proteinen im mesoskopischen Modell
14. Strukturbildungsprozesse bei flexiblen „dünnen“ und „dicken“ Polymeren
15. Kristallisation flexibler Polymere
16. Verdampfung und Kondensation eines Ising-Tröpfchens
17. Oberflächenspannung des 2D Ising Modells mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung

18. Alterungsphänomene in Ferromagneten
19. „Crossover“ von 2D nach 3D – Phasenübergänge in eingeschränkter Geometrie
20. Untersuchungen von Systemen mit Oberflächenfeldern
21. Quanten-Monte-Carlo-Simulationen
22. Kritische Amplitudenverhältnisse im Baxter-Wu-Modell
23. Skalengesetze für logarithmische Korrektorexponenten
24. Fußballfieber: Torverteilungen und nicht-Gaußsche Statistik
25. Multibondische Wang-Landau Clustersimulationen für kritische Phänomene
26. „Parallel Tempering“
27. Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden

Research Report 2007 (Abstracts in German)

1. Monte Carlo simulations of spin glasses
2. High-temperature series expansions for disordered ferromagnets and spin glasses
3. High-temperature series expansions for tree percolation
4. Self-avoiding random walks on fractals
5. Geometrical approach to phase transitions
6. Vortex-line percolation in the 3D compact U(1) lattice Higgs model
7. Potts model spin clusters and loop gases on random graphs
8. Zero-range processes on networks
9. Aggregation of polymers
10. Aggregation of the $A\beta$ peptide associated with Alzheimer's disease
11. Adsorption of semiflexible polymers at solid substrates
12. Investigation of the specific binding propensity of small proteins at semiconductor substrates
13. Kinetics of two-state folding in a mesoscopic protein model
14. Structure formation processes of flexible "thin" and "thick" polymers
15. Crystallization of flexible polymers
16. Evaporation/condensation transition of Ising droplets
17. Interface tension of the square lattice Ising model with next-nearest-neighbour interactions
18. Ageing phenomena in ferromagnets

19. Crossover from 2D to 3D – phase transitions in confined geometries
20. Boundary field induced first-order transition
21. Quantum Monte Carlo simulations
22. Critical amplitude ratios in the Baxter-Wu model
23. Scaling laws for logarithmic-correction exponents
24. Football fever: goal distributions and non-Gaussian statistics
25. Multibondic Wang-Landau cluster simulations for critical phenomena
26. Parallel tempering
27. 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 Mathias Aust, Frank Beyer, Dr. Elmar Bittner, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Andreas Nußbaumer

3 In diesem Projekt untersuchen wir mittels Computersimulationen zwei verschiedene Spinglasmodelle, nämlich das Edwards-Anderson Ising (EAI) Modell in der $\pm J$ -Formulierung und das Sherrington-Kirkpatrick (SK) Molekularfeld-Modell. Für beide Modelle wollen wir das Verhalten bei sehr tiefen Temperaturen untersuchen. Hierfür war es erforderlich, den von uns entwickelten "Multi-Overlap" Monte-Carlo-Algorithmus mit dem „Parallel Tempering“ Verfahren zu kombinieren und für die Benutzung des Supercomputers JUMP am ZAM/NIC Jülich anzupassen. Frühere Ergebnisse für das EAI-Modell zeigten bei Temperaturen knapp unterhalb des Glasübergangs ein abweichendes Verhalten von der theoretischen Vorhersage bezüglich des „Finite-Size-Scaling“ Verhaltens der Freien Energie Barrierenhöhe. Um diese Abweichungen zu verstehen, haben wir zuerst das SK-Modell untersucht, um die Methode zur Bestimmung der mittleren Barrierenhöhe mittels der Ordnungsparameterverteilung zu überprüfen, da das Skalierungsgesetz für dieses Modell abgeleitet wurde. Die Ergebnisse stimmen für tiefe Temperaturen sehr gut mit der theoretischen Vorhersage überein, zeigen aber starke „Finite-Size“ Effekte in der Nähe des Glasübergangs. Daher haben wir mit sehr umfangreichen Simulationen für das EAI-Modell begonnen und erste Ergebnisse deuten darauf hin, dass für dieses Modell auch für sehr tiefe Temperaturen ein abweichendes Verhalten von der theoretischen Vorhersage zu erwarten ist.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2, EU RTN-Network No. 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 **Hochtemperaturreihenentwicklungen für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser**

High-temperature series expansions for disordered ferromagnets and spin glasses

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

3 Ziel dieses sehr umfangreichen und langwierigen Projekts sind die Erzeugung und Analyse von Hochtemperaturreihenentwicklungen für D -dimensionale q -Zustand Potts-Modelle mit eingefrorener (sog. „quenched“) Unordnung in den Kopplungskonstanten J_{ij} . Methodisch verwenden wir hierfür die Sterngraphenmethode. 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 für die ferromagnetischen Modelle die Reihenentwicklungen bis zur 21. Ordnung wesentlich verlängert werden. Die Bestimmung der kritischen Singularitäten, also insbesondere der kritischen Temperaturen und Exponenten, ist in vielen Fällen bereits erfolgreich abgeschlossen worden. In der letzten Zeit haben wir uns verstärkt den Reihenentwicklungen für Spingläser zugewandt, die im nächsten Schritt analysiert werden sollen.

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 „Baum“-Perkolation

High-temperature series expansions for tree percolation

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

3 In diesem Teilprojekt konzentrierte sich unsere Arbeit vor allem auf das „Baum“-Perkolationsmodell in beliebigen Dimensionen, das als Spezialfall $q \rightarrow 0$ in der allgemeinen Formulierung des q -Zustand Potts-Modells enthalten ist. Hierfür ist es uns erstmals gelungen, kritische Exponenten durch Reihenentwicklungen zu bestimmen, die in niedrigen Dimensionen mit numerischen Computersimulationen verglichen werden können.

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 Selbstvermeidende Zufallswege auf Fraktalen

Self-avoiding random walks on fractals

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

3 Das Skalierungsverhalten von linearen Polymeren in ungeordneten Medien kann durch selbstvermeidende Zufallswege (SAW) auf dem „Backbone“ von Perkolationsclustern modelliert werden. Um zum Teil deutliche 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 Skalierungseigenschaften von Unordnungsmittelwerten des „End-to-End“ Abstandes und der Anzahl der selbstvermeidenden Zufallswege mit gegebener Schrittzahl charakterisieren. Für zwei-, drei- und vierdimensionale Systeme konnten auf diese Weise sehr genaue Ergebnisse gewonnen werden. Weiterhin wurden multifraktale Eigenschaften untersucht.

4 Weiterführung: ja

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

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), Frank Winter (FU Berlin)

3 Durch eine Kombination von analytischen und numerischen Methoden soll in diesem Projekt eine möglichst einfache geometrische Beschreibung von einer Vielfalt von Phasenübergängen erreicht werden. Dabei bilden 2D Modelle zunächst das Hauptthema, da hierfür viele exakte Ergebnisse für Vergleiche herangezogen werden können. So kann z.B. das kritische Verhalten des q -Zustand-Potts-Modells durch eine exakte Umschreibung als Perkolation von stochastisch definierten, sog. Fortuin-Kasteleyn-Clustern beschrieben werden, wobei die kritischen Eigenschaften des Modells in der fraktalen Struktur der Cluster kodiert sind. Im Rahmen dieses Projekts wurde schon vorher gezeigt, daß naive Spincluster trikritische Eigenschaften in ihrer fraktalen Struktur enthalten, die mit einem zugeordneten verdünnten Modell in Verbindung gebracht werden können. Ferner wurde eine Abbildung gefunden, die die fraktalen Dimensionen der beiden Clustertypen ineinander überführt. Die Richtigkeit dieser Abbildung konnte durch numerische Monte-Carlo-Simulationen für das 2D Ising-Modell ($q = 2$) bestätigt werden, wobei sowohl die fraktale Dimension der Cluster als auch die der Clusterränder betrachtet wurden. 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. Schließlich wurden auch die fraktalen Eigenschaften von perkolierenden Hochtemperaturgraphen für das 3D Ising- und XY-Modell numerisch studiert.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/17-3 und 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 Das kompakte U(1) Gitter-Higgs-Modell besitzt in drei Dimensionen punkt- und linienartige Defekte. Wir untersuchen in diesem Projekt das kritische Perkulationsverhalten von Netzwerken der linienartigen Defekte, die rein geometrisch definiert sind. Ein Vergleich mit dem kritischen Verhalten der magnetischen und energetischen Größen des Systems zeigt, daß die Perkolationübergänge für kleine Werte der Higgs-Kopplung mit der Linie von Phasenübergängen 1. Ordnung der thermodynamischen Größen übereinstimmen. 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. Die Perkulationsobservablen zeigen auch in diesem Bereich singuläres Verhalten und die gemessenen kritischen Exponenten fallen in die Universalitätsklasse der isotropen Perkolation. Weiterführende Untersuchungen dieser Netzwerke sind geplant.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (EU RTN-Network No. 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 **Potts-Modell Spincluster und „Loop“-Gase auf Zufallsgraphen**

Potts model spin clusters and loop gases on random graphs

2 Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Adriaan Schakel (FU Berlin), 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. Analoge Abbildungen zwischen regulären Gittern und fluktuierenden Zufallsgraphen lassen sich auch für „Loop“-Gase durchführen. Auf diese Weise erhält man theoretische Voraussagen für die fraktalen Dimensionen dieser „gravitierenden“ „Loop“-Gase.

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 „Zero-Range“ Prozesse auf Netzwerken

Zero-range processes on networks

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

Aggregation of polymers

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Christoph Junghans (Max-Planck-Institut für Polymerforschung Mainz)

3 In diesem Projekt wird analysiert, wie Systeme von mehreren Homopolymeren komplexe Strukturen, also Cluster, bilden. Dabei geht es insbesondere um ein tieferes Verständnis des sogenannten Backbending-Effekts, der bei der Aggregation von Heteropolymeren in einem einfachen Modell beobachtet wurde, aber auch experimentell bei der Clusterbildung von Atomen nachgewiesen wurde. Ein besonderer Schwerpunkt liegt hierbei auch auf der Interpretation dieser strukturellen Übergänge bei vergleichsweise kleinen Systemen im Rahmen der statistischen Physik. Das führt unmittelbar auf die Frage nach der Bedeutung und Anwendbarkeit der gängigen Theorien für Phasenübergänge bzw. einer eventuellen Reformulierung für kleine Systeme, deren Bedeutung für nanotechnologische Anwendungen unbestreitbar ist.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Aggregation des mit der Alzheimer-Krankheit assoziierten $A\beta$ -Peptids

Aggregation of the $A\beta$ peptide associated with Alzheimer's disease

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

3 In diesem Projekt werden Aggregationsformen eines Sequenzabschnittes des Alzheimerproteins $A\beta$ -42 untersucht. Insbesondere liegt unser Augenmerk hierbei auf einer bisher nur in Computersimulationen beobachteten fibrillaren Struktur. Geometrische Formen dieser Art sind als Ionenkanäle denkbar, denen eine ausschlaggebende Funktion bei der Ausbildung der Alzheimer-Krankheit zukommen könnte. Aus experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß das Eindringen extrazellulärer Kalzium-Ionen in Nervenzellen zu deren Degeneration führen kann. Mithilfe von Molekulardynamik- und Monte-Carlo-Computersimulationen untersuchen wir die Häufigkeit solcher Fibrillen und ähnlicher Strukturen unter physiologischen Bedingungen, deren Stabilität und mittlere Lebensdauer.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, Gradientenschule „BuildMoNa“ und projektbezogenes Personenaustauschprogramm mit Schweden (DAAD-STINT))

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Adsorption von semiflexiblen Polymeren an festen Oberflächen

Adsorption of semiflexible polymers at solid substrates

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

3 Die umfassende Untersuchung des Bindungsverhaltens von Homopolymeren an festen Oberflächen mit Hilfe eines einfachen Modells für semiflexible Polymere 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 lange Polymerketten 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 483/24-1/2)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Untersuchung des spezifischen Bindungsverhaltens kleiner Proteine an Halbleiteroberflächen**

Investigation of the specific binding propensity of small proteins at semiconductor substrates

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 Mit Hilfe von Experimenten und Monte-Carlo-Computersimulationen eines mikroskopischen, hybriden Modells wird das Faltungsverhalten von Proteinen unter Einfluß eines Halbleitersubstrates untersucht. Durch geeignete paarweise Mutationen von Peptidsequenzen, deren Bindungsverhalten zum Beispiel an Si(100)-Oberflächen aus den Experimenten bekannt ist, wurden anhand des Computermodells Vorhersagen entwickelt, die nun wiederum experimentell zu überprüfen sind. Treten diese Prognosen ein, dann können daraus wesentliche Schlußfolgerungen für den Zusammenhang zwischen Zusammensetzung und Struktur des gebundenen Peptids, insbesondere einzelne Aminosäuren betreffend, abgeleitet werden.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, Gradiertenschule „BuildMoNa“ und projektbezogenes Personenaustauschprogramm mit Schweden (DAAD-STINT))

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Kinetik des Zwei-Zustands-Faltungsverhaltens von Proteinen im mesoskopischen Modell**

Kinetics of two-state folding in a mesoscopic protein model

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Anna Kallias (Volkswagen AG Wolfsburg)

3 Eine ganze Reihe von Proteinen zeigt ein erstaunlich einfaches Faltungsverhalten bei der Ausbildung der nativen Struktur. Dazu gehört insbesondere die Klasse der Proteine, bei denen die Faltungskinetik im wesentlichen durch zwei Zustände, denaturiert und gefaltet, bestimmt wird und durch entsprechende Modelle beschrieben werden kann. Im Gegensatz zu den typischerweise benutzten Modellen, die alle Atome des Proteins einbeziehen, haben wir ein sehr einfaches, um viele atomare Details reduziertes Modell für hydrophob-polare Proteine analysiert und trotz der Vereinfachungen für eine entsprechende Sequenz aus hydrophoben und polaren Aminosäuren ein sehr charakteristisches Zwei-Zustands-Verhalten gefunden. Diese Studie hat, in Fortsetzung früherer erfolgreicher Analysen, dabei deutlich gezeigt, daß viele Aspekte des tertiären Faltungsverhaltens von Proteinen auf einer mesoskopischen Skala ablaufen und daher nicht notwendigerweise von atomaren Details der Moleküle, sondern nur wenigen spezifischen Eigenschaften, abhängen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 **Strukturbildungsprozesse bei flexiblen „dünnen“ und „dicken“ Polymeren**

Structure formation processes of flexible “thin” and “thick” polymers

2 Dr. Michael Bachmann, Prof. Dr. Wolffhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Dr. Thomas Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), Thomas Vogel

3 Dieses Projekt betrifft strukturelle Übergänge von Polymermodellen, bei denen das Polymer als linienartig („dünn“) oder mit effektiver Ausdehnung („dick“ bzw. “tube“- oder zylinderartig) betrachtet wird. Die Dicke, die effektiv der räumlichen Ausdehnung von Seitenketten Rechnung trägt, wird dabei simuliert durch einen vorgegebenen globalen Krümmungsradius, der aber auch maßgeblich das Verhalten bei strukturellen Übergängen beeinflusst. Mit Hilfe eines einfachen Modells auf regulären Gittern in drei Dimensionen haben wir die Kristallisation und den Kollaps flexibler Polymere endlicher Länge untersucht und konnten Aussagen über das Verhalten dieser Übergänge für beliebige Kettenlängen machen. Für kurze Polymere mit Zylindergeometrie untersuchen wir die Entwicklung der Grundzustände in Abhängigkeit von der Zylinderdicke sowie Phasendiagramme in Abhängigkeit von der Länge und Dicke bei endlichen Temperaturen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2)

0 FG Computerorientierte Quantenfeldtheorie

Research Group Computational Quantum Field Theory

1 Kristallisation flexibler Polymere

Crystallization of flexible polymers

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

3 Als Fortsetzung früherer Analysen des Kristallisationsverhaltens von Gittermodellen flexibler Polymere werden geometrische und thermodynamische Eigenschaften flexibler Homopolymere im Kontinuum untersucht. Von besonderem Interesse ist dabei die Ähnlichkeit der Bildung kompakter, kristallartiger Strukturen im Vergleich mit Prozessen, die bei der Abkühlung von Edelgasen beobachtet werden. Wie auch in anderen Projekten kommt dabei der Kettenlänge eine besondere Bedeutung bei. Unterschiede, die im Tieftemperaturbereich bei variierender Kettenlänge auftreten, können ähnlich wie bei Gitterpolymeren durch Kristallisationsübergänge in unterschiedliche Grundzustände erklärt werden. Bei höheren Temperaturen und insbesondere im Bereich des Evaporationsüberganges ist der Einfluss der Systemgröße geringer und erlaubt die Analyse des sogenannten Θ -Übergangs.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2 und Gradierenschule „BuildMoNa“)

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], Andreas Nußbaumer, Micha Wiedenmann

3 Mit Hilfe von Computersimulationen des Ising-Modells mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung auf einem Quadratgitter haben wir das analytische Ergebnis von Biskup *et al.* [*Europhys. Lett.* **60** (2002) 21] zum Verdampfungs-/Kondensationsübergang in einem System mit Flüssigkeit und Dampf überprüft. Hierfür haben wir die Äquivalenz zwischen dem Gitter-Gas-Modell und dem Spin-1/2 Ising-Modell ausgenutzt. So wurde beispielsweise im Ising-Modell die Magnetisierung mittels Kawasaki-Dynamik konstant gehalten, 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. Ein ebenso gutes Ergebnis finden wir auch für Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen auf einem Dreiecksgitter, für das die theoretischen Überlegungen analog gelten sollten, aber nicht bewiesen sind. Um die Allgemeingültigkeit weiter zu untermauern, haben wir auch das Ising-Modell mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung auf einem Quadratgitter studiert. Hier mußten wir zuerst die für die Reskalierung notwendigen Parameter mittels Computersimulationen bestimmen, da keine analytischen Ergebnisse bekannt sind. Wir finden auch in diesem Fall eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Ergebnis von Biskup *et al.*. Als nächster Schritt soll nun die Gültigkeit der theoretischen Vorhersage in drei Dimensionen überprüft werden.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2)

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 483/22-1/2)

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

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 Voraussetzungen 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. In einem größeren Zusammenhang sind diese Untersuchungen insbesondere für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser von großer struktureller Bedeutung.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2)

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, Dr. Martin Hasenbusch, Prof. Dr. Wolfhard 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. Dünne Filme und Schichtsysteme, 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. Von besonderem Interesse ist dabei das Skalierungsverhalten der Übergangstemperaturen als Funktion der Schichtdicke, das bisher noch nie überzeugend bestimmt werden konnte. Durch eine Kombination mehrerer optimierter Monte-Carlo-Methoden erhoffen wir uns hier deutliche Fortschritte. 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 Untersuchungen von Systemen mit Oberflächenfeldern

Boundary field induced first-order transition

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

3 Wird im zweidimensionalen Ising-Modell ein inhomogenes Oberflächenmagnetfeld angelegt, findet man in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke einen Bereich, in welchem das System eine Grenzfläche zwischen zwei unterschiedlich geordneten Phasen besitzt. In einer analytischen Arbeit von Clusel and Fortin [*J. Phys. A.: Math. Gen.* **39** (2006) 995] wurde gezeigt, daß diese Grenzfläche nur bis zu einem bestimmten Verhältnis von Breite zu Länge des Systems auftreten kann. Wir haben diese Voraussage mittels Computersimulationen überprüft und bestätigt. Zur Bestimmung der Übergangspunkte als Funktion der Temperatur verwendeten wir eine von uns neuentwickelte Simulationsmethode. Diese Methode basiert auf dem „Multi-Magnetic“ Monte-Carlo-Algorithmus und wurde mit der „Parallel Tempering“ Methode kombiniert, wobei die einzelnen Replika nicht in der Temperatur sondern in der Magnetfeldstärke getauscht werden. Mit dieser Methode konnten wir auch erstmals die Spin-Spin-Korrelationsfunktion sehr genau messen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2, JA 483/23-1 und EU RTN-Network No. 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 Quanten-Monte-Carlo-Simulationen

Quantum Monte Carlo simulations

2 Rainer Bischof, Dr. Leszek Bogacz (Jagellonian Universität Krakau, Polen), 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 Doppelpeak 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, Graduiertenschule „Build-MoNa“ und projektbezogenes DAAD Personenaustauschprogramm mit China)

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 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 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 Literatur 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 **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, Dr. Martin Weigel (Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland)

3 Wir analysieren Fußballergebnisse mittels statistischer Methoden 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 beispielsweise mittels 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 Bernoulliprozesses, 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 483/22-1/2 und EU RTN-Network No. 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 **Multibondische Wang-Landau Clustersimulationen für kritische Phänomene**

Multibondic Wang-Landau cluster simulations for critical phenomena

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 „Parallel Tempering“

Parallel tempering

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

3 Der wesentliche Vorteil der „Parallel Tempering“ Methode besteht darin, daß durch das Tauschen von Replika/Konfigurationen von tiefen zu höheren Temperaturen die verlangsamte Simulationsdynamik bei tiefen Temperaturen verbessert wird und daher mögliche Barrieren in der Freien Energie überwunden werden können. So werden geordnete Konfigurationen durch das Tauschen über die kritische Temperatur dekorreliert und können nach dem Rücktausch zu tiefen Temperaturen einen anderen Bereich des Phasenraums erreichen, welcher ohne das zwischenzeitliche Erwärmen nur sehr schwer zugänglich gewesen wäre. Mißt man aber die Häufigkeit, wie oft ein Replika von der tiefsten zur höchsten Temperatur tauscht, findet man beispielsweise im zweidimensionalen Ising-Modell schon für relativ kleine Systeme eine starke Abweichung von einem ungestörten „Random Walk“ Verhalten, welcher im Idealfall erreicht werden sollte. Wir untersuchen diese Abweichung und können mittels eines vereinfachten Modells die Ursache identifizieren. Mit diesem Wissen können wir nun die „Parallel Tempering“ Methode gezielt dahingehend verbessern, daß auch große Systeme damit effizient simuliert werden können.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2 und EU RTN-Network No. 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 **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 (Jagellonian Universität Krakau, Polen), Dr. Martin Hasenbusch, Prof. Dr. Wolfhard Janke [janke@itp.uni-leipzig.de], Monika Möddel, Andreas Nußbaumer, Dr. Adriaan Schakel (FU Berlin), Stefan Schnabel, Jakob Schluttig (Universität Heidelberg), Thomas Vogel, Bartłomiej Waclaw, Dr. Martin Weigel (Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland), Sandro Wenzel, Micha Wiedemann

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 Wurmgorithmen, „Loop-Cluster“-Algorithmen und stochastische Reihenentwicklungen 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 483/22-1/2, JA 483/23-1, JA 483/24-1/2 und EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 “ENRAGE”: *Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics*)