

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern  
Monte Carlo simulations of spin glasses
- 2 M. Aust, F. Beyer, Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de),  
A. Nußbaumer
- 3 Gegenstand dieses Projekts sind hochoptimierte Computersimulationen von zwei verschiedenen Spinglasmodellen, nämlich das kurzreichweitige Edwards-Anderson Ising (EAI) Modell in der  $\pm J$ -Formulierung und das (unendlich) langreichweitige Sherrington-Kirkpatrick (SK) Molekularfeld-Modell. Für beide Modelle wollen wir die zerklüftete Landschaft der Freien Energie mit vielen Minima und Maxima bei sehr tiefen Temperaturen besser verstehen. 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 IAS/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 Barrierenhöhen in der freien Energie. 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. Diese sehr grundlegende Fragestellung soll in Zukunft eingehender untersucht werden.
- 4 Weiterführung: ja

- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2, DFG-Forscherguppe FOR 877, 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)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Hochtemperaturreihenentwicklungen für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser  
High-temperature series expansions for disordered ferromagnets and spin glasses
- 2 Dr. M. Hellmund (Fakultät für Mathematik und Informatik), Prof. Dr. W. 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 (sogenannter „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. Seit einiger Zeit konzentrieren wir uns deshalb verstärkt auf die Hochtemperaturreihenentwicklungen für Spingläser. Da wir damit einen sehr großen Parameterbereich erfassen können (Dimension  $D$ , Potts-Parameter  $q$ , Form der  $J_{ij}$ -Verteilung usw.), werden die umfangreichen

Analysen dieser Reihenentwicklungen in den abschließenden Arbeitsschritten noch einige Zeit in Anspruch nehmen.

- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Hochtemperaturreihenentwicklungen für „Baum“-Perkolation  
High-temperature series expansions for tree percolation
- 2 Dr. M. Hellmund (Fakultät für Mathematik und Informatik), Prof. Dr. W. Janke  
(janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 In diesem Teilprojekt konzentriert sich unsere Arbeit vor allem auf das „Baum“-Perkulationsmodell 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 relativ aufwendigen numerischen Computersimulationen verglichen werden können. In höheren Dimensionen sind unsere Ergebnisse von bisher unerreichter Genauigkeit.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (externe Supercomputerzeit am NIC Jülich)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Fraktale treffen Fraktale: Selbstvermeidende Zufallswege auf Perkolationsclustern  
Fractals meet Fractals: Self-avoiding random walks on percolation clusters
- 2 Dr. V. Blavatska, Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto: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. Perkolationscluster und SAWs zählen zu den am häufigsten anzutreffenden Fraktalen. Wenn wie hier zwei Fraktale aufeinander treffen, erwartet man ein sogenanntes multifraktales Verhalten, das nicht allein durch die führenden Exponenten (bzw. ganzzahligen Vielfachen davon) beschrieben werden kann. Vielmehr ergibt sich ein ganzes multifraktales Spektrum von unabhängigen kritischen Exponenten, die wir in diesem Projekt ebenfalls bestimmt haben. Dabei finden wir eine erstaunlich gute Übereinstimmung mit analytischen Näherungsverfahren auf feldtheoretischer Grundlage.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Forschungsstipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung und EU Incoming Fellowship No. MIF1-CT-2006-021867)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Geometrische Beschreibung von Phasenübergängen: Fraktale Dimensionen von Spinclustern und Schleifengasen  
Geometrical approach to phase transitions: Fractal dimensions of spin clusters and loop gases
- 2 Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto:janke@itp.uni-leipzig.de)), Dr. A. Schakel (FU Berlin), F. Winter (DESY Zeuthen)
- 3 Ordnungsübergänge in magnetischen Systemen sind durch das Anwachsen der Größe homogen magnetisierter Bereiche gekennzeichnet. Die Frage nach möglichen Verbindungen zwischen diesem geometrischen Perkolationsverhalten und den universellen kritischen Eigenschaften des Ordnungsübergangs wird seit langem in der statistischen Physik untersucht. Während seit etwa 30 Jahren bekannt ist, dass die perkolativen Eigenschaften von statistisch nach dem Fortuin-Kasteleyn-Coniglio-Klein-Modell ausgedünnten Spinclustern exakt das kritische Verhalten des Ordnungsübergangs widerspiegeln, wurde erst kürzlich klar, dass die eigentlichen geometrischen Cluster homogen magnetisierter Bereiche mit dem *trikritischen* Zweig des betrachteten kritischen Punkt zusammenhängen. 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, also eines Schleifengases betrachtet wurden. Letztere können allgemeiner als die Graphen einer Hochtemperaturentwicklung aufgefasst werden, die am kritischen Punkt perkolieren. Für den physikalisch interessantesten Fall des 3D XY Modells (das mit flüssigem Helium und Bose-Einstein-Kondensation in Zusammenhang steht) haben wir die fraktale Dimension dieser Graphen am kritischen Punkt zu  $D = 1.7626(66)$  bestimmt und gezeigt, dass die divergierende Längenskala der perkolierenden Graphen

mit der thermischen Korrelationslänge übereinstimmt. Die von uns bestimmte fraktale Dimension der XY Hochtemperaturgraphen liegt zwischen der für selbstvermeidende Zufallswege ( $D = 1.7001(32)$ ) und der für Brownsche Zufallsbewegung oder Diffusion ( $D=2$ ).

- 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)

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Kompaktes U(1) Gitter-Higgs-Modell in 3D: Perkolation von Vortexlinien  
Compact U(1) lattice Higgs model: Percolation of vortex lines
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. A. Schakel (FU Berlin), S. Wenzel
- 3 Das kompakte U(1) Gitter-Higgs-Modell besitzt in drei Dimensionen punkt- und linienartige Defekte. Angeregt durch unsere Untersuchungen der geometrischen Charakterisierung von Phasenübergängen durch fraktale Dimensionen von Spinclustern und Schleifengasen in strukturell einfachen Modellen untersuchen wir in diesem Projekt das kritische Perkulationsverhalten von Netzwerken der linienartigen Defekte, die rein topologisch 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 folgt, 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 Perkulation. Besonders interessante Einsichten ergeben sich, wenn auch die punktförmigen Monopoldefekte des Modells berücksichtigt werden. Weiterführende Untersuchungen dieser miteinander in Wechselwirkung stehenden Netzwerke von Defektstrukturen 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)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Statistische Physik komplexer Netzwerke  
Statistical physics of complex networks
- 2 Dr. L. Bogacz (Jagellonen Universität Krakau, Polen), Prof. Dr. Z. Burda (Jagellonen Universität Krakau, Polen), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), H. Nagel, Dr. B. Waclaw
- 3 Im Rahmen einer Institutspartnerschaft der Alexander von Humboldt-Stiftung mit der Universität Krakau, Polen, analysieren wir in diesem Teilprojekt Kondensationsmechanismen auf Netzwerken. In „zero-range“ Prozessen auf sogenannten  $q$ -regulären Netzwerken, bei denen Teilchen nach bestimmten, sehr einfachen Regeln zwischen benachbarten Knoten hüpfen dürfen, beruht die Kondensation auf einer spontanen 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. In einem verwandten Unterprojekt werden Einflüsse der endlichen Netzwerkgröße („Finite-Size“ Effekte) systematisch untersucht.

- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Institutspartnerschaft Nr. 3.4–Fokoop–DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung und EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Diffusive Nichtgleichgewichtsprozesse  
Diffusive non-equilibrium processes
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. H. Meyer-Ortmanns (Jacobs Universität Bremen), J. Sopik (Jacobs Universität Bremen), Dr. B. Waclaw
- 3 Stochastische Transportmodelle zur Modellierung von diffusiven Nichtgleichgewichtsprozessen werden meist durch Angabe von Sprungraten von Teilchen zwischen benachbarten Positionen beschrieben. Ein Ziel der theoretischen Analyse ist dann die Vorhersage von stationären Zuständen und ihrer Eigenschaften. In einem Teilprojekt verfolgen wir die dazu inverse

Fragestellung: Gegeben sei ein stationärer Zustand mit bestimmten Faktorisierungseigenschaften (was i. Allg. eine analytische Behandlung stark vereinfacht). Wie müssen dann die Sprungraten gewählt werden, damit das System in diesen Zustand konvergiert? Für eine bestimmte Klasse solcher Modelle (mit Paarfaktorisation) untersuchen wir in einem anderen Teilprojekt das spontane Auftreten von Kondensaten, d.h. der Anhäufung von vielen Teilchen an einer einzigen oder wenigen benachbarten Positionen ab einer kritischen Dichte, was z.B. einem Verkehrsstau bei stochastischen Autobahnmodellen entspricht. Es gelingt uns, die Gestalt dieser Kondensate zu berechnen und einen qualitativen Zusammenhang mit den zugrunde liegenden Sprungraten herzustellen. Auf diese Weise können Klassen von Raten identifiziert werden, für die die Kondensate eine punktförmige, parabolische oder rechteckige Gestalt annehmen.

4 Weiterführung: ja

5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Institutspartnerschaft Nr. 3.4–Fokoop–DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung und EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics)

## **Forschungsbericht 2008**

0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory

1 Mikrokanonische Analyse von Polymeraggregation  
Microcanonical analysis of polymer aggregation

2 Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), C. Junghans  
(Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz)

3 In diesem Projekt wird analysiert, wie Systeme von mehreren Homopolymeren komplexe Strukturen, also Cluster, bilden. Dieser Prozeß könnte als strukturelle Grundlage für die Keimbildungsphase von Polymerkristallisation

wichtig sein, die gegenwärtig großes experimentelles Interesse hervorruft. In den theoretischen Untersuchungen geht es zunächst insbesondere um ein tieferes Verständnis des sogenannten „Back-bending“-Effekts, den wir in vorausgegangenen Untersuchungen der Aggregation von Heteropolymeren (Peptide) in einem einfachen Modell mittels Computersimulationen beobachtet hatten, der aber auch bei der Clusterbildung von Atomen experimentell nachgewiesen wurde. Ein besonderer Schwerpunkt liegt hierbei auf der mikrokanonischen Interpretation dieser strukturellen Übergänge für vergleichsweise kleine Systeme 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)

### **Forschungsbericht 2008**

0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory

1 Adsorption von semiflexiblen Polymeren an festen Oberflächen  
Adsorption of semiflexible polymers at solid substrates

2 PD Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto:janke@itp.uni-leipzig.de)), M. 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. Als theoretisches Werkzeug werden auch in diesem Projekt mikrokanonische Analysemethoden eingesetzt und weiterentwickelt.

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

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Spezifisches Bindungsverhalten kleiner Proteine an Halbleiteroberflächen  
Specific binding propensity of small proteins at semi-conductor substrates
- 2 PD Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. A. Beck-Sickinger (Inst. für Biochemie), K. Goede (Abt. HLP), Prof. Dr. M. Grundmann (Abt. HLP), Prof. Dr. A. Irbäck (Lund University, Sweden), Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto:janke@itp.uni-leipzig.de))
- 3 In dieser Kollaboration über Institutsgrenzen hinweg werden mit Hilfe von Experimenten und Monte-Carlo-Computersimulationen eines mikroskopischen, hybriden Modells die Faltungseigenschaften von mit Hilfe biochemischer Methoden gezielt synthetisierter Proteine 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 anschließend experimentell bestätigt werden konnten. Diese Ergebnisse erlauben wesentliche Schlussfolgerungen für den Zusammenhang zwischen Zusammensetzung und

Struktur des gebundenen Peptids, insbesondere einzelne Aminosäuren betreffend.

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

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Mesoskopisches Proteinmodell für die Kinetik des Zwei-Zustands-Faltungsverhaltens  
Mesoscopic protein model for the kinetics of two-state folding
- 2 PD Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. 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)

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Strukturbildungsprozesse bei flexiblen „dünnen“ und „dicken“ Polymeren  
Structure formation processes of flexible “thin” and “thick” polymers
- 2 PD Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto:janke@itp.uni-leipzig.de)), Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), T. 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 und DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Kristallisation einer flexiblen Polymerkette  
Crystallization of a flexible polymer chain
- 2 PD Dr. M. Bachmann, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Schnabel, T. Vogel
- 3 Als Fortsetzung früherer Analysen des Kristallisationsverhaltens von Gittermodellen flexibler Polymere werden geometrische und thermodynamische Eigenschaften flexibler Homopolymere im Kontinuum mit speziell auf das Problem zugeschnittenen multikanonischen Computersimulationsverfahren 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 bei den atomaren Clustern finden wir auch hier bei den Einzelpolymerkristallen unter bestimmten Umständen verschiedene Varianten von ikosaederähnlichen Formen. Dabei kommt der Kettenlänge wie in vielen anderen Projekten eine besondere Bedeutung bei. Unterschiede, die im Tieftemperaturbereich mit 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  $\theta$ -Übergangs.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Verdampfung und Kondensation eines Ising-Tröpfchens  
Evaporation/condensation transition of Ising droplets
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.unileipzig.de), A. Nußbaumer, M. Wiedenmann
- 3 Mit Hilfe von Computersimulationen des Ising-Modells mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung auf einem Quadratgitter haben wir zunächst analytische Ergebnisse zum Verdampfungs-/Kondensationsübergang in einem System mit Flüssigkeit und Dampf überprüft. Hierfür wurde die Äquivalenz zwischen einem 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 den theoretischen Vorhersagen und können Aussagen über die Stärke von „Finite-Size“-Korrekturen für endliche Systeme machen, die analytisch nicht bestimmbar sind. Ein ebenso gutes Ergebnis finden wir auch für den Fall von Nächster-Nachbar-Wechselwirkungen auf einem Dreiecksgitter, für den 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 der theoretischen Analyse. Gegenwärtig sind wir dabei, die Gültigkeit dieser Gesetzmäßigkeiten auch in drei Dimensionen zu überprüfen, was sich allerdings numerisch als eine wesentlich größere Herausforderung erwiesen hat.
- 4 Weiterführung: ja

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

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Phasenübergänge in eingeschränkter Geometrie: „Crossover“ von 2D nach 3D  
Phase transitions in confined geometries: Crossover from 2D to 3D
- 2 PD Dr. M. Hasenbusch, Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto: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 hochoptimierter 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. Die so gewonnenen Erfahrungen haben wir dann zum analogen Studium des XY-Modells ausgenutzt, das als effektives Modell für die universellen Eigenschaften von superflüssigen Heliumfilmen dient, die experimentell mit sehr hoher Genauigkeit gemessen werden können.
- 4 Weiterführung: ja

- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/23-1/2/3)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Oberflächenfeldinduzierte Phasenübergänge 1. Ordnung  
Boundary field induced first-order transitions
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Wird im zweidimensionalen Ising-Modell auf einer Seite ein inhomogenes Oberflächenmagnetfeld angelegt (z.B. positiv in der oberen und negativ in der unteren Hälfte), findet man in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke einen Bereich, in welchem das System eine Grenzfläche zwischen zwei unterschiedlich geordneten Phasen besitzt. In einer kürzlichen Veröffentlichung [M. Clusel und J.-Y. 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 483/23-1/2 und EU RTN-Network No. MRTN-CT-2004-005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Ferromagnete im äußeren Magnetfeld  
Ferromagnets in an external magnetic field
- 2 Dr. L. Bogacz (Jagellonen Universität Krakau, Polen), Prof. Dr. D. Ihle (Abt. TKM), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), I. Juhasz-Junger (Abt. TKM)
- 3 Ferromagnetische Quantenspinketten und zweidimensionale Lagen von Spins mit Spinquantenzahlen  $S=1/2, 1, 3/2, 2, \dots$  in einem äußeren Magnetfeld wurden einerseits mit analytischen Methoden der Greenschen Funktionen und andererseits in Monte-Carlo-Computersimulationen mit Hilfe der „Stochastic Series Expansion“ (SSE) Methode untersucht. Die Motivation dafür stammt aus früheren analytischen Untersuchungen von I. Junger und D. Ihle (Abt. TKM), die für die scheinbar einfache Spin-1/2-Kette in einem schwachen Magnetfeld einen nicht erwarteten Doppelpeak in der Temperaturabhängigkeit 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. Ferner wurde auch die magnetische Suszeptibilität und die transversale sowie longitudinale Korrelationslänge des Systems sowohl analytisch als auch numerisch bestimmt. Für ein bestimmtes quasi-eindimensionales  $S=1/2$  Kupfersalz konnten wir durch Fits an unsere Daten die Austauschwechselwirkung zwischen den Spins abschätzen und damit vorhersagen, bei welcher Temperatur die beiden Peaks auftreten sollten. Eine experimentelle Bestätigung unserer Vorhersage steht allerdings noch aus. In einem weiteren Schritt ist auch die Abhängigkeit dieses Doppelpeakeffekts von höheren Spinquantenzahlen  $S = 1, 3/2, 2, \dots$  untersucht worden, wobei sich auch hierbei die analytischen und numerischen Methoden sehr gut gegenseitig ergänzt haben. Als Ergebnis finden wir, dass für  $S > 1$  nur noch

ein Peak auftritt, was auch allgemein auf zweidimensionale Ferromagnete zutrifft.

- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Quantenphasenübergänge in Spinketten  
Quantum phase transitions in spin chains
- 2 R. Bischof, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. H.-P. Ying (Zhejiang University, Hangzhou, China), Prof. Dr. B. Zheng (Zhejiang University, Hangzhou, China)
- 3 In diesem Projekt 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. In ihrer Tieftemperaturphase zeigen diese Modelle wichtige Supraleitungsphänomene. Der von uns gewählte 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.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

## Forschungsbericht 2008

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Dimerisierte Heisenbergmodelle  
Dimerised Heisenberg models
- 2 Dr. L. Bogacz (Jagellonen Universität Krakau, Polen), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Wenzel, PD Dr. S. Wessel (Universität Stuttgart)
- 3 In diesem Projekt untersuchen wir dimerisierte antiferromagnetische Heisenbergmodelle auf zweidimensionalen Gittern, bei denen die Spins über zwei unterschiedliche Kopplungskonstanten  $J$  und  $J'$  wechselwirken, die in einem systematischen Muster angeordnet sind. Quantenkritische Phasenübergänge für Temperatur  $T = 0$  können dann durch Variation des Parameters  $J/J'$  studiert werden. Eine allgemein akzeptierte effektive feldtheoretische Beschreibung durch das nichtlineare Sigmamodell suggeriert, dass die (quanten)kritischen Exponenten in die  $O(3)$  Universalitätsklasse des klassischen 3D Heisenbergmodells fallen. Für die meisten studierten Kopplungskonstantenmuster (z.B. „Leiter“, „Plaquette“) konnte dies durch unsere Quanten-Monte-Carlo-Simulationen in der „Stochastic Series Expansion“ (SSE) Formulierung bestätigt werden. Eine interessante Ausnahme bildet das „staggered“ Muster, für das wir numerische Evidenz für eine neuartige Universalitätsklasse finden. Die Unterschiede zur konventionellen 3D  $O(3)$  Universalitätsklasse sind zwar nicht sehr groß, aber statistisch signifikant. Weitergehende Untersuchungen der magnetischen Suszeptibilität bei endlichen Temperaturen bestätigen dieses bemerkenswerte Ergebnis. Erste analytische Betrachtungen und weitere Simulationen gezielt ausgewählter Kopplungskonstantenmuster suggerieren, dass das unkonventionelle kritische Verhalten mit topologischen Termen zusammenhängen könnte, die für bestimmte Muster in der effektiven feldtheoretischen Beschreibung auftreten.
- 4 Weiterführung: ja

- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Stipendium der deutschen Studienstiftung, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Quanten-Kompass- und Plaquette-Orbital-Modelle  
Quantum compass and plaquette orbital models
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Wenzel
- 3 Modellierungsansätze und Computersimulationen von quantenstatistischen Eigenschaften magnetischer Materialien sind sowohl von praktischer als auch von großer konzeptioneller Bedeutung. Eine wichtige Rolle spielen dabei sogenannte Quantenphasenübergänge, die am absoluten Temperaturnullpunkt ausschließlich durch Quanteneffekte getrieben werden. Aber auch bei Phasenumwandlungen, die bei endlichen Temperaturen auftreten, kann der Wettstreit zwischen thermischen und quantenstatistischen Fluktuationen zu vielen neuen Phänomenen Anlaß geben. Darunter fällt insbesondere die Klasse der Kompass-Modelle, die mit Methoden der Festkörperphysik experimentell realisiert werden können (z.B. in Mott-Isolatoren) und auf der theoretischen Seite interessante Abbildungen auf effektive topologische Quantenfeldtheorien vom Chern-Simons Typ erlauben. Die bisherigen Erkenntnisse legen eine mögliche Verbindung mit topologischen Quantencomputern nahe, deren Qubits fehlertolerant sein sollten. Wir überprüfen in diesem Projekt mit Hilfe von Computersimulationen einige spekulative Behauptungen durch einen sehr sorgfältigen Vergleich des klassischen und quantenmechanischen Modells, wodurch vor allem ungewöhnlich starke Randeffekte besser verstanden werden können. Ausschlaggebend für die erzielte Genauigkeitsverbesserung war der Einsatz von hochoptimierten Simulationsmethoden, die teilweise von uns gezielt weiterentwickelt wurden. Aufbauend auf diese Erfahrungen schlagen wir dann ein

neuartiges Modell mit qualitativ ähnlichen Eigenschaften vor, bei dem aber die Randeffekte wesentlich besser zu kontrollieren sind. Für dieses Plaquette-Orbital-Modell lassen sich dann auch zufällig auftretende Verunreinigungseinflüsse wesentlich aussagekräftiger untersuchen als bisher.

- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Stipendium der deutschen Studienstiftung, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

### **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Kritische Amplitudenverhältnisse  
Critical amplitude ratios
- 2 Prof. Dr. B. Berche (Nancy Universität, Frankreich), Prof. Dr. P. Butera (Mailand, Italien), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. L. 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  $\chi$  in der Nähe der kritischen Temperatur  $T_c$  durch ein Potenzgesetz beschreiben,  $\chi \sim \Gamma_{\pm} |T/T_c - 1|^{-\gamma}$ , wobei  $\gamma$  der kritische Exponent ist und  $\Gamma_+$  bzw.  $\Gamma_-$  die kritische Amplitude in der Hoch- bzw. Tieftemperaturphase bezeichnet. Das Amplitudenverhältnis  $\Gamma_+ / \Gamma_-$  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, haben wir auch das 2D Baxter-Wu-Modell (ein Modell mit Dreispinwechselwirkung auf einem Dreiecksgitter) betrachtet, 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 (DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Fußballfieber: Torverteilungen und nicht-Gaußsche Statistik  
Football fever: goal distributions and non-Gaussian statistics
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer, Dr. M. Weigel (Universität Mainz)
- 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 modelliert 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. Auf dem Wissenschaftssommer 2008 im Rahmen des Jahres der Mathematik wurden unsere Vorhersagen dann einem empirischen Test unterworfen: An zwei Tischkickergeräten konnten die Besucher auf dem Leipziger Augustusplatz Spielergebnisse beisteuern. Eine ständig aktualisierte Online-Auswertung ergab, dass deren Verteilung tatsächlich erstaunlich viele Parallelen zur höchsten deutschen Spielklasse, der 1. Bundesliga, aufweist.

- 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)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Multibondische Wang-Landau Clustersimulationen für kritische Phänomene  
Multibondic Wang-Landau cluster simulations for critical phenomena
- 2 Prof. Dr. B. A. Berg (Florida State University, Tallahassee, USA),  
Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto: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 Gewichtsfaktoren 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, Alexander von Humboldt-Stiftung (Forschungspreis für B.A. Berg) und US Department of Energy Contract DE-FG02-97ER41022)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 „Parallel Tempering“  
Parallel tempering
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke ([janke@itp.uni-leipzig.de](mailto:janke@itp.uni-leipzig.de)), A. 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, welches 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)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Kreuzkorrelationen bei Skalierungsanalysen von Phasenübergängen  
Cross correlations in scaling analyses of phase transitions
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. M. Weigel (Universität Mainz)
- 3 Bei thermischen oder „Finite-Size“ Skalierungsanalysen von Monte-Carlo-Computersimulationen in der Nähe von Phasenübergängen werden häufig verschiedene Schätzer für dieselbe Meßgröße verwendet, weil dadurch statistische Fluktuationen reduziert werden können. Allerdings treten dabei u.U. starke Kreuzkorrelationen auf, die in der Vergangenheit oft sogar in Hochpräzisionsstudien ignoriert worden sind, was zu einer Unterschätzung der

tatsächlichen statistischen Fehler führt. Wir schlagen deshalb eine relativ einfache Erweiterung der konventionellen Analysemethoden vor, die diese Kreuzkorrelationen berücksichtigt und darüber hinaus die Verwendung verbesserter Schätzer mit wesentlich kleineren Fluktuationen erlaubt. Da diese Erweiterung nur einen sehr geringen zusätzlichen Rechenaufwand erfordert, erhält man in gegebener Rechenzeit oft wesentlich genauere Endergebnisse. Wir demonstrieren dies in exemplarischen Simulationen des zwei- und dreidimensionalen Isingmodells.

- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/22-1/2, JA 483/23-3 und EU RTN-Network No. MRTN-CT-2004-005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics)

## **Forschungsbericht 2008**

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie  
Computational quantum field theory
- 1 Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden  
Novel Monte Carlo simulation methods
- 2 M. Aust, PD Dr. M. Bachmann, R. Bischof, Dr. E. Bittner, F. Beyer, Dr. V. Blavatska, Dr. L. Bogacz (Jagellonen Universität Krakau, Polen), Dr. M. Hasenbusch, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), M. Möddel, A. Nußbaumer, Dr. A. Schakel (FU Berlin), S. Schnabel, J. Schluttig (Universität Heidelberg), S. Schöbl, T. Vogel, B. Waclaw, Dr. M. Weigel (Universität Mainz), S. Wenzel, M. Wiedenmann
- 3 In den letzten Jahren sind eine Reihe neuartiger Algorithmen für Monte-Carlo-Simulationen vorgeschlagen worden, die die benötigten Rechenzeiten z. T. 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 gut etablierteren Verfahren oft nur sehr schwer zu beurteilen. Begleitend zu den anderen Projekten führen wir deshalb systematische Vergleiche durch, wobei z. Z. „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 sogenannten „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 483/23-1/2, JA 483/24-1/2, DFG-Forschergruppe FOR877, Institutspartnerschaft Nr. 3.4-Fokoop-DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“, DFH-UFA Graduiertenschule CDFA-02-07 und EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004-005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics)