

Übersicht Forschungsbericht 2009

1. Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern
2. Hochtemperaturreihenentwicklungen für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser
3. Flexible Polymere in ungeordneten Medien
4. Mechanisches Verhalten semiflexibler Polymere in Zufallspotentialen
5. Schleifengase und der Wurm-Algorithmus
6. Statistische Physik komplexer Netzwerke
7. Teilweise asymmetrische Exklusionsprozesse
8. Diffusive Nichtgleichgewichtsprozesse
9. Teilchentransport per Ratscheneffekt
10. Ensemble- versus zeitgemittelte diffusive Prozesse
11. Hierarchische Subphasenübergänge bei Nukleationsprozessen von Polymeren
12. Adsorption von Polymeren an festen und fluktuierenden Oberflächen
13. Spezifisches Bindungsverhalten kleiner Proteine an Halbleiteroberflächen
14. Polymer-Simulationen auf Multi-Threading-Computerarchitekturen
15. Kooperative Sekundärstrukturbildung von flexiblen Polymeren
16. Flüssig-Fest-Übergang bei elastischen Polymeren
17. Barriere in der Freien Energie beim zweidimensionalen Verdampfungs-/Kondensationsübergang
18. Anisotropie der Grenzflächenspannung im dreidimensionalen Ising-Modell
19. Verdampfungs-/Kondensationsübergang von Ising-Tröpfchen
20. Phasenübergänge in eingeschränkter Geometrie: „Crossover“ von 2D nach 3D
21. Quantenphasenübergänge in Spinketten
22. Dimerisierte Heisenbergmodelle
23. Quanten-Kompass- und Plaquette-Orbital-Modelle
24. Kritische Amplitudenverhältnisse
25. Fußballfieber: Torverteilungen und nicht-Gaußsche Statistik
26. „Parallel Tempering Cluster“-Algorithmus
27. Varianzreduktion und Kreuzkorrelationen bei Markov-Ketten-Monte-Carlo-Simulationen
28. Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Monte-Carlo-Simulationen von Spingläsern
Monte Carlo simulations of spin glasses
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer
- 3 Gegenstand dieses Projekts ist die stark zerklüftete Landschaft der Freien Energie des kurzreichweitigen Edwards-Anderson Ising (EAI) Spinglasmodells mit vielen Minima und Maxima bei tiefen Temperaturen. Um diese Landschaft untersuchen zu können, verwenden wir den von uns entwickelten „PT-MuQ“ Algorithmus, eine Kombination des „Multi-Overlap“ Monte-Carlo-Algorithmus mit dem „Parallel Tempering“ Verfahren. Dieser Algorithmus wurde für die Benutzung der Supercomputer JUMP bzw. JUROPA am IAS/NIC Jülich angepasst, da für die Untersuchung von Spingläsern eine sehr große Anzahl an Unordnungsconfigurationen simuliert werden müssen und dies unsere lokalen Computerressourcen übersteigt. Der wesentliche Vorteil unseres neuen Algorithmus ist es, auch bei sehr tiefen Temperaturen noch thermalisierte und somit verwendbare Daten zu bekommen. Mittels unserer Simulationen wollen wir untersuchen, ob die in früheren Arbeiten gefundenen Abweichungen von der theoretischen Vorhersage bezüglich des „Finite-Size-Scaling“ Verhaltens der Barrierenhöhen in der freien Energie von der damals verwendeten relativ hohen Temperatur herrühren oder ein nachweisbarer Unterschied zwischen dem kurzreichweitigen EAI Spinglas und dem analytisch gelösten (unendlich) langreichweitigen Sherrington-Kirkpatrick Molekularfeld-Modell besteht.
- 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 IAS/NIC Jülich)

Forschungsbericht 2009

- 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 Ziele 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, konnte in vielen Fällen bereits erfolgreich abgeschlossen werden. Seit einiger Zeit widmen wir uns deshalb vor allem den 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. In einem anderen Teilprojekt konzentriert sich unsere Arbeit 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 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Flexible Polymere in ungeordneten Medien
Flexible polymers in disordered media
- 2 Dr. V. Blavatska, Niklas Fricke, Prof. Dr. W. 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. 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. Schließlich wurde auch die Reaktion der Polymere in ungeordneten Medien auf äußere Felder numerisch untersucht.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Forschungsstipendium der Alexander von Humboldt-Stiftung und DFG-Forschergruppe FOR877)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Mechanisches Verhalten semiflexibler Polymere in Zufallspotentialen
Mechanical properties of semiflexible polymers in random disorder
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. K. Kroy (Abt. TKM), S. Schöbl
- 3 Semiflexible Polymere bilden das Grundgerüst eukaryotischer Zellen. Sie unterscheiden sich von flexiblen Polymeren durch eine intrinsische Länge, die Persistenzlänge. Sie ist ein Maß für die Längenskala, über die das Polymer von den thermischen Kräften merklich gebogen wird. Gegenstand dieses Projektes ist die Untersuchung der mechanischen Eigenschaften semiflexibler Polymere in Zufallspotentialen. Die Potentiale bilden dabei die Umgebung ab, in der sich das Polymer in vivo befindet, z. B. ein Polymernetzwerk wie das Zytoskelett. In unseren Kontinuumssimulationen wird das Polymer als Heisenbergkette modelliert, der diskretisierten Form des „Wormlike-Chain“-Modells, welches das wohl prominenteste Modell für semiflexible Polymere ist. Die Potentiale sind Hart- bzw. Weichkugelflüssigkeiten. Da das Problem von persistenten Pfaden in derartigen Potentialen noch weitgehend unverstanden ist, ist es auch algorithmisch und mathematisch von großem Interesse. Um diese Probleme anzugehen, müssen herkömmliche Methoden wie der Metropolis-Algorithmus mit modernen Methoden wie Wachstumsalgorithmen und Kraftfeldern, welche die Wachstumsrichtung der Polymere steuern, kombiniert werden. Auf dem Gitter wird das Polymer als persistenter Zufallsweg simuliert. Die Zufallspotentiale kann man sich hier als Fehlstellen auf dem Gitter vorstellen. In enger Zusammenarbeit mit Gruppen, die analytische Rechnungen zu diesem Problem behandeln, und im Vergleich mit Experimenten, sollen auf diese Weise in Zukunft geeignete Einsichten in die mechanischen Eigenschaften von Zellen gefunden werden.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Schleifengase und der Wurm-Algorithmus
Loop gases and the worm algorithm
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), Dr. habil. A.M.J. Schakel
- 3 Der 2001 von Prokofiev und Svistunov eingeführte Wurm-Algorithmus ist ein Monte-Carlo-Verfahren zur numerischen Untersuchung von Feldtheorien definiert auf einem Gitter. Das Außergewöhnliche dieses Verfahrens ist, dass es nicht auf dem üblichen feldtheoretischen Zugang solcher Gittersysteme aufbaut, sondern auf deren dualer Beschreibung. Dieser äquivalente Zugang beruht auf der Tatsache, dass die Quanten (Teilchen) eines Quantenfeldes ebenso anhand derer Bahnen in Raumzeit (Weltlinien) beschrieben werden können. Statt Felder, definiert auf den Gitterpunkten eines Gitters, simuliert der Wurm-Algorithmus Weltlinien, definiert auf den Kanten des Gitters. Ein Ensemble fluktuierender (geschlossener) Weltlinien wird ein Schleifengas genannt. Der Wurm-Algorithmus ermöglicht also einen alternativen numerischen Zugang zur Gitterfeldtheorie, die im Rahmen der statistischen Physik als Hochtemperaturdarstellung von Spinsystemen bekannt ist. Es stellt sich nun die Frage, wie sich die kritischen Exponenten eines Spinsystems, die das universelle Verhalten in der Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs kennzeichnen, mit dem Wurm-Algorithmus bestimmen lassen. Aufbauend auf früheren Arbeiten haben wir Observablen untersucht, die dies ermöglichen. Diese Observablen, die teils aus der Perkolationstheorie und teils aus der Polymerphysik stammen, erforschen im Wesen die fraktale Struktur des Schleifengases. Zur Unterstützung unserer Vorhersagen haben wir das zweidimensionale Ising-Modell mit dem Wurm-Algorithmus simuliert. Da die kritischen Exponenten und eine Reihe von anderen Eigenschaften dieses Modells exakt bekannt sind, erlaubt es eine genaue Überprüfung nicht nur der Vorhersagen, sondern auch des Algorithmus selbst. Sowohl die kritischen Exponenten als auch die fraktale Dimension der Schleifen, die wir so numerisch über wurmspezifische Observablen bestimmt haben, stimmen hervorragend mit den exakten Ergebnissen überein.
- 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 2009

- 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 den 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 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Teilweise asymmetrische Exklusionsprozesse
Partially asymmetric exclusion processes
- 2 Dr. R.A. Blythe (University of Edinburgh, UK), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. D.A. Johnston (Heriot-Watt University Edinburgh, UK), Dr. R. Kenna (Coventry University, UK)
- 3 Exklusionsprozesse sind einfache Modelle für Massentransport, die in einer Dimension teilweise exakt lösbar sind, durch ihre Nichtgleichgewichtseigenschaften aber ein nichttriviales Phasendiagramm aufweisen. Ein einfaches Beispiel sind Verkehrsstaus auf einspurigen Straßen. Wir betrachten in diesem Projekt speziell „teilweise asymmetrische Exklusionsprozesse“ und zeigen, dass deren Eigenschaften über die Transfermatrixdarstellung von gewichteten Motzkin-Gitterwegen interpretiert werden können. Insbesondere finden wir, dass für diese Beschreibung eine bestimmte Kettenbruchdarstellung (sogenannte „J-Brüche“) besonders geeignet ist.
- 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 2009

- 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), H. Nagel, 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.a. 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 Paarfaktorisierung) 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, EU RTN-Network Nr. MRTN-CT-2004005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics und DFG-Normalverfahren JA483/27-1)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Teilchentransport per Ratscheneffekt
Mass transport by thermal ratchets
- 2 M. Aust, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. R. Valiullin (Abt. GFP)
- 3 Im Rahmen des Projektes P8 der Forschergruppe FOR877 wird ein neuer Typ einer Temperaturratsche vorgeschlagen und theoretisch sowie experimentell untersucht. Das System besteht aus eindimensionalen Nanoporen, deren Durchmesser periodisch, aber unsymmetrisch variiert (Sägezahnprofil). In den Poren befindet sich ein binäres Flüssigkeitsgemisch, das unterhalb einer kritischen Temperatur T_c Phasenseparation zeigt. Wird das thermische Gleichgewicht gestört, indem periodisch zwischen Temperaturen über und unter T_c gewechselt wird, so ist nach Curies Prinzip durch die gebrochene Symmetrie ein Strom der beiden Flüssigkeitskomponenten in jeweils unterschiedliche Richtungen zu erwarten. Das System wurde als *kollektive Temperaturratsche mit entropischem Potential* klassifiziert und bildet somit ein genuin neuartiges Modell. Stark vereinfachte Computersimulationen („Random Walks“) wurden durchgeführt, um Parameter für das Porenprofil zu finden, die den resultierenden Strom maximieren. Die Simulationen für einzelne Parametrisierungen zeigten, dass ein kleiner Strom zu erwarten ist. Der Effekt blieb in den Simulationen allerdings zu klein, als dass daraus die optimale Geometrie hätte bestimmt werden können.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, DFG-Forschergruppe FOR877 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Ensemble- versus zeitgemittelte diffusive Prozesse
Ensemble- versus time-averaged diffusive processes
- 2 M. Aust, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Dieses Projekt zielt auf die Datenanalyse experimentell gewonnener Daten diffusiver Prozesse ab. Zur theoretischen Beschreibung dient das Modell des „*Continuous Time Random Walks*“ (CTRW). Dieses einfache mathematische Modell führt eine potenzgesetzartige Wartezeitwahrscheinlichkeitsverteilung $\psi(t) \sim t^{-(1+\alpha)}$ mit $0 < \alpha < 1$ zwischen zwei Schritten eines gewöhnlichen eindimensionalen „Random Walkers“ ein, um schwache Ergodizitätsbrechung und subdiffusives Verhalten zu erzeugen. Im Ensemblemittel über viele Trajektorien skaliert die mittlere quadratische Abweichung vom Ursprung mit t^α (Subdiffusion). Wird die mittlere quadratische Abweichung aber über die Zeit einer einzelnen Trajektorie gemittelt, wie beim „*Single Molecule Tracking*“ üblich, erscheint der Prozess interessanterweise normal diffusiv, wobei die formale Diffusionskonstante mit zunehmender Beobachtungsdauer abnimmt. Diese Ergebnisse, zuerst von I. Sokolov (HU Berlin) vorgestellt, wurden analytisch und in Computersimulationen reproduziert. In Zusammenarbeit mit S. Hertel und M. Wehring (AG Kärger) wird an Methoden gearbeitet und nach einem System gesucht, in dem sich dieses versteckte subdiffusive Verhalten mit NMR-Techniken nachweisen lässt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, DFG-Forschergruppe FOR877 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Hierarchische Subphasenübergänge bei Nukleationsprozessen von Polymeren
Hierarchical subphase transitions in nucleation processes of polymers
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), C. Junghans (Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz)
- 3 Das Verständnis von strukturellen Übergängen von vergleichsweise kleinen Systemen, für die die vereinfachenden Annahmen des für Phasenübergänge typischerweise betrachteten thermodynamischen Limes nicht anwendbar sind, ist von besonders großer Bedeutung für molekulare Systeme und deren Anwendung. In der Biologie und in nanotechnologischen Anwendungen sind derartige Strukturbildungsprozesse (Protein-Aggregation, Polymer-Kristallisation) von essentieller Bedeutung. In diesem Projekt untersuchen wir auf der Basis von mikrokanonischen Analysemethoden die Aggregation von Polymeren und die dabei auftretenden Vorgänge während der Nukleation, d.h. wenn die individuellen Polymere sukzessive immer größere Cluster bilden. Aufgrund der Komplexität dieser Prozesse führen wir multikanonische Monte-Carlo-Computersimulationen vereinfachter Modelle durch, wobei mit diesen Simulationen primär die Zustandsdichte des untersuchten Systems präzise bestimmt werden kann. Aufgrund der logarithmischen Beziehung zwischen Zustandsdichte und mikrokanonischer Entropie bietet sich dieses Simulationsverfahren auf natürliche Weise an. Aus der mikrokanonischen Entropie kann die kalorische Temperatur abgeleitet werden, die in der Nähe des strukturellen Übergangs ein sehr charakteristisches, hierarchisches Verhaltensmuster aufweist („Backbending“-Effekt), aus dem sich Informationen zu den einzelnen Subprozessen gewinnen lassen.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2/3)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Adsorption von Polymeren an festen und fluktuierenden Oberflächen
Polymer adsorption to solid and fluctuating surfaces
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Karalus, M. Möddel
- 3 Die Untersuchung allgemeiner struktureller Eigenschaften bei der Bindung von Polymeren an Oberflächen ist Gegenstand dieses Projektes. Viele Anwendungen im Bereich der Biosensorik und der molekularen Nanoelektronik sind davon abhängig, unter welchen Bedingungen die Bindung überhaupt möglich ist, wie sie kontrolliert strukturiert werden kann und wie spezifisch sie ist. Die funktionale Spezifität ist auch von grundlegender Bedeutung in biologischen Zellsystemen, wo der Austausch von Substanzen und Signalen zwischen dem extra- und intrazellulären Bereich durch in der Zellmembran verankerte bzw. an sie gebundene Proteine gewährleistet wird. Wir untersuchen in diesem Projekt einfache hybride Modelle für die Wechselwirkung von Polymeren mit festen, planaren Oberflächen, sowie die Strukturbildung von Polymeren an fluktuierenden Polymernetzwerken, die das Verhalten einer Membran simulieren. Besondere Bedeutung kommt in unseren Untersuchungen, für die umfangreiche erweiterte Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt werden müssen, den thermisch und durch die Änderung der Wechselwirkungsparameter verursachten strukturellen Übergängen zu. Dabei werden die Daten in verschiedenen statistischen Gesamtheiten untersucht, um Details der energetischen und entropischen Einflüsse bei der Adsorption besser verstehen zu können. Da unser Interesse bevorzugt endlich großen Systemen gilt, ist eine detaillierte Analyse der Endlichkeitseffekte vonnöten. Es sind auch vor allem die Endlichkeitseffekte, die die Identifizierung der strukturellen Phasen sehr schwierig gestalten. Allerdings ist es uns gelungen, für die Adsorption von flexiblen Polymeren an einem festen planaren Substrat das vollständige Phasendiagramm zu konstruieren, und wir sind nun dabei, die Details der einzelnen Übergänge auszuarbeiten.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2/3, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFa-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 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 (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. A. Beck-Sickinger (Inst. für Biochemie), Dr. 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)
- 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-Normal-verfahren JA 483/24-1/2, DFG-Gradiertenschule „BuildMoNa“ und projektbezogenes DAAD-STINT Personenaustauschprogramm mit Schweden)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Polymer-Simulationen auf Multi-Threading-Computerarchitekturen
Polymer simulations on multi-threading computer architectures
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), J. Groß, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich)
- 3 Dieses Projekt dient der Portierung, dem Test und der Anwendung von parallelisierten Simulationsprogrammen für Strukturbildungsvorgänge von Polymeren auf modernsten Computertechnologien. Dazu gehören vor allem Prozessoren in PC- und Grafiksystemen, die über viele unabhängige Prozessorkerne mit gemeinsam genutztem Speicher verfügen. Das hat den Vorteil, dass Prozesse (oder Teile davon) dynamisch auf die einzelnen Kerne verteilt werden können, ohne explizite Adressräume für jeden einzelnen Prozess reservieren zu müssen (wie das auf den aktuellen Supercomputern noch nötig ist) und dass von den Einzelprozessen gemeinsam genutzte Daten instantan ohne zusätzliche Kommunikation geändert werden können. Da diese „Multicore“-Technologien im preiswerten PC-Segment voraussichtlich wegweisend sind, d.h. sich zukünftig weiter durchsetzen werden, ist es sinnvoll, die volle Kapazität dieser Architekturen für unsere Anwendungen zugänglich zu machen. Wir untersuchen dabei primär den Effizienzgewinn bei sogenannten „Parallel-Tempering“-Monte-Carlo-Methoden für einfache Polymermodelle, an deren thermodynamischen Eigenschaften wir interessiert sind. In ersten Vergleichstests haben wir bereits erhebliche Leistungssteigerungen im Vergleich zu Simulationen auf Einzelkern-Prozessoren nachweisen können, so dass sich dieser Ansatz für derartige Anwendungen als praktikabel und effizient erweist.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2/3)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Kooperative Sekundärstrukturbildung von flexiblen Polymeren
Cooperative secondary structure formation of flexible polymers
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), Dr. T. Vogel
- 3 In diesem Projekt untersuchen wir die natürliche Ausbildung sekundärer Polymerstrukturen wie Helizes und Faltblattstrukturen mit Hilfe eines sehr einfachen Polymermodells mit Lennard-Jones-Wechselwirkungen zwischen nichtverbundenen Monomeren und der zusätzlichen Eigenschaft einer vorgegebenen „Dicke“ der Polymerkette. Jeder Polymerstruktur kann mit Hilfe ihres globalen Krümmungsradius eine solche effektive „Dicke“ zugewiesen werden. Wird der Strukturraum nun derart eingeschränkt, dass nur Strukturen mit einer vorgegebenen Mindestdicke erlaubt sind, dann kann für Klassen von Polymeren, die dieser Einschränkung unterliegen (z.B. durch die räumliche Ausdehnung ihrer Seitenketten), untersucht werden, welche Arten von Strukturen von diesen Polymeren bevorzugt eingenommen werden. Das ob der Einfachheit des Modells etwas überraschende Ergebnis ist, dass darunter die z.B. von Proteinen bekannten helikalen und faltblattartigen Sekundärstrukturen entsprechende strukturelle Phasen bilden, ohne dass dafür eine spezifische Wechselwirkung (z.B. für Wasserstoffbrücken) im Modell berücksichtigt wurde. Da es sich aufgrund der Konzeption des globalen Krümmungsradius um eine effektive Mehrkörperwechselwirkung handelt, kann die offenbar darauf und auf die attraktive Wechselwirkung zwischen den Monomeren zurückzuführende Sekundärstrukturbildung als kooperativer Prozess verstanden werden, also als Ursache für einen makroskopischen Effekt, hervorgerufen durch spontane Kooperation einzelner Teile des Systems. Wir haben darüber hinaus das Modell an ein Wärmebad gekoppelt und aus entsprechenden Monte-Carlo-Simulationen das strukturelle Phasendiagramm für diese „dicken“ Polymere bestimmt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2/3 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFa-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Flüssig-Fest-Übergang bei elastischen Polymeren
Liquid-solid transition of elastic polymers
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. S. Schnabel, Dr. T. Vogel
- 3 Wir untersuchen in diesem Projekt den Übergang von kollabierten, aber ungeordneten „flüssigen“ Strukturen zu geordneten „festen“ Kristallen für endliche elastische Polymere. Von besonderem Interesse und ausschlaggebender Bedeutung sind hierbei Oberflächeneffekte, d.h. die Art des Wachstums von Schichten auf der Oberfläche der Nukleationskeime. Eine detaillierte und für verschiedene Systemgrößen vergleichende Analyse erfordert sehr anspruchsvolle Simulationstechniken - in diesem Falle eine erweiterte Variante der multikanonischen Monte-Carlo-Methode. Wir finden ganz eindeutige Hinweise auf die nicht-systematische Abhängigkeit der Art des Kristallisationsvorganges von der Kettenlänge, was eine Analyse des Übergangs mit Hilfe üblicher Verfahren aus der statistischen Physik (z.B. Skalenmethoden) unmöglich macht. Darüber hinaus können wir zeigen, dass sich die elastischen Polymere bei der Kristallisation ähnlich verhalten wie atomare Cluster. Damit lassen sich offenbar qualitative Aussagen zum Kristallisationsprozess der Polymere auf allgemeine Nukleationsprozesse übertragen. Eine große Aufgabe für die Zukunft besteht nun darin, dies auch quantitativ auf eine Art „Universalitätsprinzip“ zurückzuführen, was insofern sehr schwierig ist, da bestimmte wesentliche Eigenschaften von Kristallisationsvorgängen häufig spezifisch vom System bzw. Modell abhängen und Detailaussagen daher nicht allgemeingültig sein können.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2/3, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Barriere in der Freien Energie beim zweidimensionalen Verdampfungs-/Kondensationsübergang
Free-energy barrier at the two-dimensional evaporation/condensation transition
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer
- 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 Nächste-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. Des Weiteren wurde die am Verdampfungs-/Kondensationsübergang auftretende Barriere in der Freien Energie mit aufwendigen Methoden eingehend untersucht.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA 483/24-1/2, DFG-Forscherguppe FOR 877, EU RTN-Network No. MRTN-CT-2004-005616 „ENRAGE“: Random Geometry and Random Matrices: From Quantum Gravity to Econophysics und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Anisotropie der Grenzflächenspannung im dreidimensionalen Ising-Modell
Anisotropy of the interface tension of the three-dimensional Ising model
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer
- 3 Im Rahmen dieses Projekts bestimmten wir die Grenzflächenspannung des dreidimensionalen Ising-Modells in Abhängigkeit von der Ausrichtung der Oberfläche. Die Fragestellung, welche hierbei beantwortet werden sollte, war, wie stark der Einfluss der Anisotropie der Grenzflächenspannung im Tropfenbildungsprozess im Ising-Modell ist. Hierfür mussten wir erst eine neue Simulationsmethode entwickeln, welche die Barrieren in der Freien Energie beim Tropfen/Streifen-Übergang und beim Kondensationsübergang ohne signifikanten Computerzeitaufwand überwinden kann. Hierfür stellte sich eine Kombination aus dem „Multimagnetic“ Algorithmus und der „Parallel Tempering“-Methode als am besten geeignet heraus. Mit Hilfe dieser neuen Simulationsmethode konnten wir eine große Anzahl an Temperaturen unterhalb des kritischen Punktes untersuchen, wobei wir die Grenzflächenspannung in den Richtungen 100, 110 und 111 gemessen haben. Zur Erzeugung der Oberflächen mit der gewünschten Ausrichtung haben wir wie schon in einem früheren Projekt „verdrehte“ Randbedingungen verwendet.
- 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 DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFa-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Verdampfungs-/Kondensationsübergang von Ising-Tröpfchen
Evaporation/condensation transition of Ising droplets
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer, M. Wiedenmann
- 3 Die Arbeit untersucht den Tröpfchen-Übergang im dreidimensionalen Isingmodell mit Nächsten-Nachbar-Wechselwirkungen. Mittels der Gittergasanalogie liefert dieses ein einfaches Modell zur Untersuchung von Kondensation und Verdampfung. Als wesentliches Hilfsmittel dienen optimierte Monte-Carlo-Simulationstechniken und Analysealgorithmen, mit deren Hilfe unter anderem die räumliche Struktur der Tröpfchen besser verstanden wird. Ein weiterer Schwerpunkt der aktuellen Arbeit ist die Diskrepanz zum analytisch lösbaren zweidimensionalen Fall. Nach einer Reskalierung wichtiger Größen ist dort die Übereinstimmung zur theoretischen Vorhersage sehr gut. Ziel ist es, auch im dreidimensionalen Modell diese Übereinstimmung zu erhalten. Schwierigkeiten bereitet hier der mit der Systemgröße exponentiell steigende Rechenaufwand. Um „Finite-Size“-Artefakte zu minimieren und verlässliche Aussagen über makroskopische Systeme treffen zu können, sind möglichst große untersuchte Systeme von entscheidender Bedeutung. Deshalb ist es notwendig den verwendeten Simulationsalgorithmus ständig zu verbessern.
- 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 2009

- 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 (Humboldt-Universität zu Berlin), Prof. Dr. W. 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 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 2009

- 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)
- 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.
Mittels (Multi-) Histogramm-Umgewichtungsmethoden können die pseudokritischen Punkte verschiedener Observablen aus Simulationen von endlichen Systemen genau bestimmt werden. Diese werden per „Finite-Size Scaling“-Analysen in den thermodynamischen Limes extrapoliert. Die Umgewichtung konnte erfolgreich auch auf sogenannte „verbesserte“ Schätzer angewendet werden.
Im speziellen werden gemischte Spinketten mit alternierender Kopplung und anisotroper Austauschwechselwirkung untersucht, deren kritische Punkte und Exponenten nicht bekannt sind und mit jenen der bekannten uniformen Spinketten (speziell Heisenberg- und Haldanekette) verglichen werden können. Zu diesem Zweck konnte der für das Heisenbergmodell anwendbare „Unordnungsparameter“ für gemischte Spinketten verallgemeinert werden. Mit einer kleinen Abwandlung ist dieser dem Stringparameter, der die Phasen der Haldanekette unterscheidet, äquivalent. Bei der Bestimmung der kritischen Exponenten kommt u.a. auch die kürzlich beschriebene Auswertung der Korrelationen der Ergebnisse aus verschiedenen Messungen zur Anwendung.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 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), Dr. 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“, DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 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), Dr. 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“, DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 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 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, 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 (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2009

- 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 z.B. in der Verteilung der Anzahl der Tore der Heim- bzw. der Gastmannschaft auswirkt. 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. Mittels eines modifizierten Bernoulli-Prozesses, der aus einem Poissonmodell und einer einfachen Komponente der *Selbstverstärkung* („*self-affirmation*“) besteht, können die Abweichungen zur Gaußschen Statistik mikroskopisch erklärt werden. 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 der Messe „Studieren in Mitteldeutschland“ haben wir mit unserem Fußballprojekt die Universität Leipzig vertreten und dabei unsere Vorhersagen einem empirischen Test unterworfen: An einem Tischkickergerät konnten die Besucher auf der Neuen Messe Leipzig Spielergebnisse beisteuern. Die anschließende Auswertung ergab, dass deren Verteilung tatsächlich erstaunliche Parallelen zur höchsten deutschen Spielklasse, der 1. Bundesliga, aufweist. So sind auch diese Ergebnisse nicht durch das Poisson- oder Binomialmodell zu beschreiben, sondern durch unseren modifizierten Bernoulli-Prozess.
- 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 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 „Parallel Tempering Cluster“-Algorithmus
Parallel tempering cluster algorithm
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Bei der „Finite-Size Scaling“ Analyse von Phasenübergängen zweiter Ordnung benötigt man zur Bestimmung der kritischen Exponenten oft einen relativ großen Temperaturbereich um den kritischen Punkt. Da einzelne Monte-Carlo-Simulationen auch in Verbindung mit der Umgewichtungsmethode diesen Temperaturbereich nicht abdecken können, muss man entweder mehrere Einzelsimulationen für unterschiedliche Temperaturen um den kritischen Punkt herum laufen lassen und dann mittels der „Multi-Histogram“-Umgewichtungsmethode die Analyse durchführen, oder man verwendet unseren neuen „Parallel Tempering Cluster“-Algorithmus. Dieser basiert auf der „Parallel Tempering“-Methode, welche neben der automatischen Bestimmung der notwendigen Simulationstemperaturen zur Abdeckung des Temperaturbereichs auch ein Dekorrelieren der Daten liefert. Da am kritischen Punkt aber die Standardversion der „Parallel Tempering“- Methode mit der Verwendung des Metropolis-Algorithmus immer noch relativ große Autokorrelationszeiten aufweist, haben wir eine neue Variante entwickelt. Dabei verwenden wir für die Simulation der einzelnen Replika den „Swendsen-Wang Cluster“-Algorithmus und tauschen diese mittels dem „Parallel Tempering“-Kriterium. Der wesentliche Vorteil unseres neuen Verfahrens besteht darin, dass nun alle Daten bei den simulierten Temperaturen sehr kleine Autokorrelationszeiten besitzen und der dynamische kritische Exponent deutlich kleiner ist als in der Standardversion. Somit kann ohne großen Mehraufwand an Computerzeit die Anzahl der statistisch unabhängigen Messungen erhöht oder zu größeren Systemen gegangen werden, was die Genauigkeit in der Bestimmung der kritischen Exponenten signifikant steigert.
- 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 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Varianzreduktion und Kreuzkorrelationen bei Markov-Ketten-Monte-Carlo-Simulationen
Variance reduction and cross correlations in Markov chain Monte Carlo simulations
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. M. Weigel (Universität Mainz)
- 3 Die den üblichen Monte-Carlo-Simulationen zugrundeliegenden Markovketten führen in den resultierenden Zeitreihen für Messgrößen zu teilweise erheblichen zeitlichen Autokorrelationen. Neben diesen wohlbekanntem Effekten entstehen jedoch weitere (Kreuz-)Korrelationen, wenn das gleiche Datenmaterial für die Berechnung mehrerer verschiedener Schätzfunktionen verwendet wird. Wird dieser Effekt, insbesondere für die Mittelung von Schätzungen, nicht korrekt berücksichtigt, so resultieren hieraus systematisch falsche Fehlerabschätzungen. Mithilfe eines einfachen Rezepts der Datenanalyse unter Verwendung der „jackknife“-Methode oder anderer auf der Erhebung von Meta-Stichproben basierender Verfahren lassen sich solche Probleme in einfacher Weise vermeiden. Darüberhinaus ermöglicht eine Kovarianzanalyse die Formulierung optimaler Schätzer mit oft erheblich reduzierter Varianz im Vergleich zu konventionellen Schätzfunktionen.
- 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 2009

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Neuartige Monte-Carlo-Simulationsmethoden
Novel Monte Carlo simulation methods
- 2 M. Aust, PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), R. Bischof, Dr. E. Bittner, Dr. V. Blavatska, N. Fricke, J. Groß, PD Dr. M. Hasenbusch (Humboldt Universität zu Berlin), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Karalus, M. Marenz, M. Möddel, H. Nagel, PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), A. Nußbaumer, Dr. A. Schakel, Dr. S. Schnabel, S. Schöbl, Dr. T. Vogel, Dr. B. Waclaw, Dr. M. Weigel (Universität Mainz), Dr. S. Wenzel, M. Wiedenmann, B. Winkler, J. Zierenberg
- 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 etablierten 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-Normal-verfahren JA 483/22-1/2, JA 483/23-1/2/3, JA 483/24-1/2/3, 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)