

Übersicht CQT-Forschungsbericht 2010

1. Monte-Carlo-Computersimulationen von Spingläsern
2. Hochtemperaturreihenentwicklungen für ungeordnete Ferromagnete und Spingläser
3. Typische Gestalt flexibler Polymere in ungeordneten Medien
4. Selbstvermeidende Zufallswege auf ungeordneten Gittern
5. Semiflexibler Polymere in Zufallspotentialen
6. Wurm-Algorithmus und Schleifengase
7. Stochastische Transportmodelle
8. Teilchentransport durch thermischen Ratscheneffekt
9. Ensemble- und zeitgemittelte diffusive Prozesse
10. Grundzustandsanalyse der Tip4p-Wasserparametrisierung für gewöhnliches Eis
11. Nichtgleichgewichtsrelationen vom Jarzynski-Typ zur Bestimmung von Grenzflächen-
spannungen
12. „Geburt“ des ersten großen Kondensationströpfchens
13. Flüssig-Fest-Übergang bei elastischen Polymeren
14. Hierarchische Subphasenübergänge bei Nukleationsprozessen von Peptiden
15. Exakte Enumeration von Polymeren an Oberflächen
16. Adsorption von freien und verankerten Polymeren an Oberflächen
17. Spezifisches Bindungsverhalten kleiner Proteine an Halbleiteroberflächen
18. Thermodynamik der Polymeradsorption an eine flexible, fluktuierende Membran
19. Simulationen von Polymeren auf Graphikkarten
20. Quantenkritische Phänomene in uniformen und gemischten Heisenberg-Spinketten
21. Quanten-Kompass-Modell mit Schraubenrandbedingungen
22. Anwendung der Geometrothermodynamik auf schwarze Löcher
23. Kritische Amplitudenverhältnisse im Baxter-Wu-Modell
24. Kreuzkorrelationen und statistische Fehlerabschätzung in Monte-Carlo-Simulationen
25. Selbstadaptive Simulationen kritischer Phänomene
26. Neuartige Methoden für Monte-Carlo-Computersimulationen

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Monte-Carlo-Computersimulationen von Spingläsern
Monte Carlo computer simulations of spin glasses
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer
- 3 Gegenstand dieses Projekts sind umfassende Computersimulationen von Spinglasmodellen. Von besonderem Interesse ist dabei die Erforschung der stark zerklüfteten „Landschaft“ der freien Energie, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit bestimmte Spinkonfigurationen auftreten. Wir konzentrieren uns z. Zt. auf das kurzreichweitige Edwards-Anderson Ising (EAI) Spinglasmodell. Die Simulationen werden mit dem von uns entwickelten „PT-MuQ“ Algorithmus durchgeführt, der eine Kombination des „Parallel Tempering“ (PT) Verfahrens mit dem „Multi-Overlap“ (MuQ) Monte-Carlo-Algorithmus darstellt. Dieser Algorithmus wurde speziell für die Benutzung des Supercomputers JUROPA am JSC/NIC Jülich angepasst, da für die Untersuchung von Spingläsern eine sehr große Anzahl von Unordnungskonfigurationen simuliert werden müssen und dies unsere lokalen Computerressourcen übersteigt. Ein wesentlicher Vorteil unseres Algorithmus ist, dass wir damit auch bei sehr tiefen Temperaturen noch thermalisierte und somit verwendbare Daten erzeugen können. Wichtige Fragestellungen betreffen die in früheren Arbeiten gefundenen Abweichungen von theoretischen Vorhersagen bezüglich des „Finite-Size-Scaling“-Verhaltens der Barrierenhöhen in der freien Energie, die von den damals verwendeten relativ hohen Temperaturen herrühren könnten, und die kontroverse Diskussion in der Literatur, ob es klare, qualitative Unterschiede zwischen dem kurzreichweitigen EAI Spinglas und dem analytisch gelösten (unendlich) langreichweitigen Sherrington-Kirkpatrick (SK) Molekularfeld-Modell gibt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/22-1/2, DFG-Forscherguppe FOR877, DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy und externe Supercomputerzeit am JSC/NIC Jülich)

Forschungsbericht 2010

- 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 JSC/NIC Jülich)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Typische Gestalt flexibler Polymere in ungeordneten Medien
Shape characteristics of flexible polymers in disordered media
- 2 Dr. V. Blavatska (Lviv, Ukraine), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Das Verhalten linearer Polymere in ungeordneten Materialien kann durch selbstvermeidende Zufallswege (SAW) auf dem „Backbone“ von Perkulationsclustern modelliert werden. Besonders interessant ist der Einfluss der Unordnung auf die typische Gestalt der Polymere, die für viele Prozesse (z. B. in einer dichtgefüllten („crowded“) biologischen Zelle) von großer Bedeutung ist. Konzeptionell kann die dreidimensionale Anordnung der Monomere am besten durch die gemittelten Eigenwerte des Gyrationstensors charakterisiert werden. Ihre numerische Bestimmung für sehr viele Polymerkonformationen ist jedoch sehr aufwendig. Man betrachtet deshalb meist drehinvariante universelle Größen, die aus der Spur und Determinante des Gyrationstensors relativ einfach berechnet werden können. Die statistischen Ensembles von Polymerkonformationen in zwei und drei Dimensionen werden mittels numerischer Computersimulationen mit der „Pruned-Enriched“ Rosenbluth Kettenwachstumsmethode (PERM) erzeugt. Als qualitativ wichtigstes Resultat finden wir, dass durch die fraktalen Eigenschaften des Materials, d. h. der zugrunde liegenden Perkulationscluster, die Polymere stärker anisotrope und gestreckte (prolate) Konfigurationen annehmen als in einer homogenen, geordneten Umgebung. Ferner bestimmen wir die universellen Formparameter, die nicht von den Details des verwendeten Modells abhängen und deshalb auch mit feldtheoretischen Vorhersagen und experimentellen Ergebnissen verglichen werden können.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Forschergruppe FOR877)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Selbstvermeidende Zufallswege auf ungeordneten Gittern
Self-avoiding walks on disordered lattices
- 2 N. Fricke, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Eine zentrale Fragestellung dieser Diplomarbeit betrifft die besonderen Effekte beim Wechselspiel zweier Fraktale: „Self-Avoiding Walks“ (SAWs), deren erlaubte Schritte auf fraktale Mannigfaltigkeiten eingeschränkt sind. Mathematisch erwartet man einen nichttrivialen Einfluß auf die Skalierungsgesetze der SAWs und insbesondere auch multifraktale Eigenschaften. Physikalisch stellt dieses Problem eine minimalistische Modellierung von Polymeren in ungeordneten Medien dar, das aus biophysikalischer Sicht auch als typisches Beispiel für das (natürlich noch viel komplexere) Verhalten von Biomolekülen in dichten zellulären Umgebungen angesehen werden kann (sogenanntes „crowded cell“ Problem). Wir untersuchen diese Fragestellung vor allem mit Hilfe von Computersimulationen, wobei bei diesem Projekt stochastische Kettenwachstumsalgorithmen im Vordergrund stehen. Insbesondere wenn diese Monte-Carlo-Verfahren wie in dieser Arbeit noch durch eine geeignet gewählte, adaptive Populationskontrolle ergänzt werden (wie z. B. bei der „Pruned-Enriched“ Rosenbuth-Methode (PERM)), können sehr effiziente numerische „Experimente“ im Computer durchgeführt werden, die neue Einblicke in grundlegende physikalische Mechanismen ermöglichen. Zum Vergleich und Test unserer Simulationsmethoden führen wir darüber hinaus auch noch exakte Auszählungen aller erlaubten Konformationen für kurze SAWs durch, wobei eine neue rekursive Formulierung eventuell sogar einen echten Durchbruch für das Auszählen von SAWs auf fraktalen Mannigfaltigkeiten ermöglichen könnte.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Forschergruppe FOR877, DFG-Normalverfahren JA483/24-3 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFa-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Semiflexible Polymere in Zufallspotentialen
Semiflexible polymers in random potentials
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. K. Kroy (Abt. TKM), S. Schöbl, J. Zierenberg
- 3 Semiflexible Polymere unterscheiden sich von flexiblen Polymeren durch eine intrinsische Länge, die sogenannte Persistenzlänge. Diese ist ein Maß für die Längenskala, über die das Polymer von den thermischen Kräften merklich gebogen wird. Gegenstand dieses Projekts 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 Simulationsverfahren wie der Metropolis-Algorithmus mit modernen Methoden wie Wachstumsalgorithmen mit Kraftfeldern, welche die Wachstumsrichtung der Polymere steuern, kombiniert werden. Auf einem Gitter wird das Polymer als persistenter Zufallsweg modelliert. Die Zufallspotentiale kann man sich hier als Fehlstellen auf dem Gitter vorstellen. In enger Zusammenarbeit mit Gruppen, die analytische Rechnungen zu diesem Problem durchführen, 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 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Wurm-Algorithmus und Schleifengase
Worm algorithm and loop gases
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), M. Marenz, PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), Dr. habil. A.M.J. Schakel (Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Brasilien)
- 3 Der vor zehn Jahren von Prokofiev und Svistunov eingeführte Wurm-Algorithmus ist ein Monte-Carlo-Verfahren, das auf der Hochtemperaturreihendarstellung der Zustandssumme und Zweipunktfunktion von Spinmodellen und Gitterfeldtheorien beruht. Während die Zustandssumme nur geschlossene Linien („Schleifen“) liefert, führt die Entwicklung der Zweipunktfunktion auch auf offene Linien („Ketten“) mit einem Anfangs- und Endpunkt. Der Wurm-Algorithmus erzeugt ein statistisches Ensemble von Linienkonfigurationen durch stochastische Bewegung des Endpunktes nach einem Metropolis-Kriterium, wobei Schleifen offensichtlich entstehen, wenn der Endpunkt mit dem Anfangspunkt zusammenfällt, aber auch dann, wenn Teile der Kette später wieder ausgelöscht werden und eine u. U. deutlich kürzere Kette sowie eine Schleife zurückbleiben. Für das zweidimensionale Ising-Modell haben wir kürzlich die dynamischen Eigenschaften des Wurm-Algorithmus sehr sorgfältig studiert. Dabei wurden zwei mögliche Varianten betrachtet, wobei in der ersten die Linienstärken von 1 bis Unendlich variieren, während in der zweiten alle Linien gleichmäßig auf die Stärke 1 eingeschränkt sind. Dabei stellte sich heraus, dass die eingeschränkte Darstellung eine geringfügig schnellere Dynamik besitzt, also die erforderlichen Rechenzeiten reduziert. Der Wurm-Algorithmus ist hervorragend geeignet, um die Schleifengasdarstellung von Spinmodellen oder Gitterfeldtheorien zu studieren. Im letzteren Fall beruht dieser äquivalente Zugang auf der Tatsache, dass die Quanten (Teilchen) eines Quantenfeldes ebenso anhand derer Weltlinien (Trajektorien in der Raumzeit) beschrieben werden können. Dabei stellt sich dann u. a. die Frage, wie kritische Exponenten, die das universelle Verhalten des Systems in der Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs kennzeichnen, mit dem Wurm-Algorithmus bestimmt werden können. Aufbauend auf unsere früheren Arbeiten haben wir Observablen konstruiert, die genau dies ermöglichen. Diese Observablen, die teils aus der Perkolationstheorie und teils aus der Polymerphysik stammen, erforschen im Wesen die fraktale Struktur des Schleifengases. Zur Kontrolle unserer Vorhersagen haben wir das zweidimensionale Ising-Modell auf einem hexagonalen Gitter mit dem Wurm-Algorithmus simuliert. Da die kritischen Exponenten und eine Reihe anderer Eigenschaften dieses Modells exakt bekannt sind, erlaubt dies 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

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Stochastische Transportmodelle
Stochastic transport models
- 2 E. Ehrenpreis, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Prof. Dr. H. Meyer-Ortmanns (Jacobs University Bremen), H. Nagel, Dr. B. Waclaw (University of Edinburgh, UK), A. Wagner
- 3 Stochastische Transportmodelle zur Modellierung diffusiver Nichtgleichgewichtsprozesse sind von großer praktischer Bedeutung in vielen Bereichen. Beispiele reichen vom Autoverkehr und Fußgängerströmen über Kraftpropagation in granularen Medien wie Sand- oder Getreidesilos bis hinunter zu mikroskopischen Austauschprozessen in biologischen Zellen. Generisch können all diese Prozesse durch Angabe der Sprungraten für „Teilchen“ (also Autos, Fußgänger, Sand- oder Getreidekörner, Proteine, ...) zwischen benachbarten Positionen beschrieben werden. 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 (experimentell) vorgegebenen Eigenschaften. Wie müssen dann die Sprungraten gewählt werden, damit das System in diesen Zustand konvergiert? Für eine bestimmte Klasse solcher Modelle (mit sogenannter Paarfaktorisierung) untersuchen wir in einem anderen Teilprojekt das spontane Auftreten von Kondensaten, d. h. einer 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. Da diese analytischen Rechnungen nur näherungsweise durchgeführt werden können, sind wir seit einiger Zeit dabei, unsere zentralen theoretischen Vorhersagen durch numerische Computersimulationen zu stützen.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/27-1)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Teilchentransport durch thermischen 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 Projekts P8 der Forschergruppe FOR877 wurde ein neuer Typ einer Temperaturratsche vorgeschlagen und sowohl theoretisch als auch 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 nun das thermische Gleichgewicht gestört, indem periodisch zwischen Temperaturen überhalb und unterhalb von T_c gewechselt wird, so ist nach Curies Prinzip durch die gebrochene Symmetrie ein Strom der beiden Flüssigkeitskomponenten in jeweils unterschiedliche Richtungen zu erwarten. Dieses System kann als *kollektive Temperaturratsche mit entropischem Potential* klassifiziert werden und bildet somit ein neuartiges Modell. Stark vereinfachte Computersimulationen von „Random Walks“, die die Bewegung der Flüssigkeitskomponenten qualitativ modellieren, wurden durchgeführt, um Parameter für das Porenprofil zu bestimmen, die den resultierenden Strom maximieren. Die Simulationen für einzelne Parametrisierungen zeigten, dass tatsächlich ein kleiner Strom zu erwarten ist. Der Effekt blieb in den Simulationen allerdings zu klein, um daraus die optimale Geometrie zuverlässig bestimmen zu können.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Forschergruppe FOR877 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Ensemble- und zeitgemittelte diffusive Prozesse
Ensemble- and 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 wurden zunächst analytisch und in Computersimulationen reproduziert. Derzeit wird an Methoden gearbeitet, die Hinweise auf geeignete Systeme geben, in denen sich dieses versteckte subdiffusive Verhalten mit NMR-Techniken nachweisen lässt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Forschergruppe FOR877 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Grundzustandsanalyse der Tip4p-Wasserparametrisierung für gewöhnliches Eis
Ground-state analysis of Tip4p water parameterizations for ordinary ice
- 2 Prof. Dr. B.A. Berg (Florida State University, Tallahassee, USA), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), J. Zierenberg
- 3 Bei vielen Computersimulationen auf chemischer oder biologischer Skala spielen Wassermoleküle eine wichtige Rolle. Da dabei häufig große Temperaturbereiche betrachtet werden, muss sichergestellt sein, dass das verwendete Wassermodell über weite Bereiche zuverlässige Resultate liefert. In diesem Projekt haben wir das populäre Tip4p-Modell studiert, bei dem das Wassermolekül H_2O als starr angenommen wird und die Wechselwirkungen durch 12-6 Lennard-Jones- und Coulombwechselwirkungen modelliert werden (wobei die Ladung des Sauerstoffs effektiv in einen vierten Wechselwirkungspunkt verschoben ist). Besonderes Augenmerk wurde dem Grundzustand der Wassermoleküle in der gewöhnlichen Eisphase gewidmet. Insbesondere konnten wir mit relativ aufwendigen Minimierungstechniken zeigen, dass die Moleküle in einem kugelförmigen „Eiskristall“ bis auf Randeffekte hexagonal angeordnet sind, und die erwartete Pauling-Entartung des Grundzustands verifizieren. Berechnungen der Strukturparameter in Abhängigkeit von den Tip4p-Wechselwirkungsparametern und Vergleiche mit verwandten Wassermodellen (z. B. Tip3p) wurden ebenfalls durchgeführt. Diese Kalibrierungen sind eine wichtige Voraussetzung für weiterführende Untersuchungen, z. B. des Schmelzverhaltens von Wassereis.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Alexander von Humboldt-Stiftung, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“ und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Nichtgleichgewichtsrelationen vom Jarzynski-Typ zur Bestimmung von Grenzflächenspannungen
Non-equilibrium relations of Jarzynski type for determination of interface tensions
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), B. Winkler
- 3 Ein wesentliches Ziel dieses Projekts war es, Nichtgleichgewichtsrelationen vom Jarzynski-Typ auf Bestimmungen von Grenzflächenspannungen anzuwenden. Um die Methode zu entwickeln, wurde im Rahmen einer Bachelorarbeit als einfaches Beispiel das Isingmodell betrachtet. Dafür wurden zunächst verschiedene allgemeine Aspekte der Nichtgleichgewichtsthermodynamik betrachtet und auf die konkrete Problemstellung zugeschnittene konkrete Meßvorschriften unter Verwendung der Nichtgleichgewichtsrelationen von Jarzynski und Crooks erarbeitet. Diese wurden schließlich mit Hilfe von Monte-Carlo-Computersimulationen ausgiebig getestet und verifiziert, wobei alle Computercodes sowohl für Metropolis- als auch Kawasaki-Dynamik von uns selbst entwickelt worden sind.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (Institutspartnerschaft Nr. 3.4–Fokoop–DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung mit der Jagellonen Universität Krakow, DFG-Normalverfahren JA483/27-1)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 „Geburt“ des ersten großen Kondensationströpfchens
Birth of the first large condensation droplet
- 2 Dr. E. Bittner, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), A. Nußbaumer, M. Wiedenmann
- 3 Der genaue Mechanismus für die Entstehung des ersten großen Tröpfchens in Kondensationsphänomenen ist nach wie vor eines der wichtigsten Probleme in der statistischen Beschreibung kondensierter Materie, die von atomaren über kolloidalen zu makromolekularen Systemen reicht. Auch wenn erste theoretische Ansätze schon vor langer Zeit diskutiert wurden, gibt es immer noch viele offene Fragen, denen wir uns in diesem Projekt widmen. Mit Hilfe von Computersimulationen des Ising-Gitter-Gas-Modells konnten wir in zwei Dimensionen eine sehr gute Übereinstimmung mit theoretischen Vorhersagen erzielen und darüber hinaus Aussagen über die Stärke von „Finite-Size“-Korrekturen für endliche Systeme machen, die analytisch nicht bestimmbar sind. Interessante neue Ergebnisse konnten auch für die am Kondensationsübergang auftretende Barriere in der freien Energie gewonnen werden, die ein detaillierteres Verständnis der mikroskopischen Mechanismen versprechen. Ähnliche Untersuchungen des physikalisch relevanteren dreidimensionalen Systems haben sich als extrem aufwendig erwiesen, da die notwendige Trennung verschiedener Längenskalen die Simulation sehr großer Systeme erfordert, was selbst mit der heutigen Computertechnik noch eine Herausforderung bedeutet. Durch geschickten Einsatz moderner algorithmischer Verfahren und gezielte methodische Weiterentwicklungen sollte aber auch dieses Problem in den Griff zu bekommen sein.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“, DFG-Forscherguppe FOR877, DFG-Normalverfahren JA483/22-2 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDEFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 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 (University of Georgia, Athens, USA)
- 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 erweiterte Varianten der multikanonischen Monte-Carlo-Methode. Dies betrifft energieabhängige Update-Vorschläge für die Monomerpositionen, eine neuartige Formulierung, in der die Monomeranzahl „dynamisch“ variieren darf, und eine spezielle Erweiterung, die auf die Übergänge zwischen verschiedenen Kristallstrukturen zugeschnitten ist. Sehr wichtig gerade in den festen Phasen sind auch methodische Verbesserungen bei der Auswahl der Update-Vorschläge („bond-exchange“, „monomer cut-and-paste“), die auch bei anderen Simulationsverfahren große Verbesserungen versprechen. Auf diese Weise erhalten wir ganz eindeutige Hinweise auf eine 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, zumindest einige Kernaussagen 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 JA483/24-3 und DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Hierarchische Subphasenübergänge bei Nukleationsprozessen von Peptiden
Hierarchical subphase transitions in nucleation processes of peptides
- 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 in 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 Verfahren sind derartige Strukturbildungsprozesse (Proteinaggregation, Polymerkristallisation) von essentieller Bedeutung. In diesem Projekt untersuchen wir auf der Basis von mikrokanonischen Analysemethoden die Aggregation von Peptiden und die dabei auftretenden Vorgänge während der Nukleation, d. h. wenn die individuellen Heteropolymere sukzessive immer größere Cluster bilden. Aufgrund der Komplexität dieser Prozesse führen wir multikanonische Monte-Carlo-Computersimulationen vereinfachter Modelle durch, wobei mit dieser Simulationsmethode 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. Unsere Daten zeigen, dass ähnlich wie für Homopolymere auch die Heteropolymeraggregation ein zusammengesetzter Nukleationsprozeß ist, der aus hierarchisch angeordneten Subphasenübergängen besteht, die alle die Charakteristiken eines Phasenübergangs 1. Ordnung zeigen. Mit zunehmender Kettenanzahl nimmt die Stärke dieser Subübergänge mehr und mehr ab. Dies suggeriert, dass im thermodynamischen Limes unendlich vieler Ketten der Kondensationsprozess 1. Ordnung durch das Zusammenwirken unendlich vieler, aber unendlich schwacher Subphasenübergänge 1. Ordnung hervorgerufen wird.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/24-3)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Exakte Enumeration von Polymeren an Oberflächen
Exact enumerations of polymers at surfaces
- 2 K. Austin, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), M. Möddel
- 3 Gegenstand dieser Bachelorarbeit sind Untersuchungen des Adsorptionsverhaltens von Polymeren an Oberflächen im Rahmen eines vereinfachten Gittermodells, in dem Polymere durch selbstvermeidende Zufallswege (SAWs) beschrieben werden. Der Ursprung der SAWs ist an einer ebenen, undurchlässigen Oberfläche verankert („grafted“), die auf die Monomere des Makromoleküls eine lokale, anziehende Wechselwirkung der Stärke ε_s ausübt. In Teilen der Arbeit wird darüber hinaus auch noch eine anziehende Wechselwirkung benachbarter Monomere untereinander der Stärke ε_m betrachtet (sogenannte Theta-Polymere). Für dieses Modell haben wir exakte Auszählungen aller möglichen Polymerkonformationen mit Hilfe eines von uns selbst entwickelten Computerprogramms durchgeführt und anhand dieser Daten dann den Adsorptionsübergang analysiert. Dabei wird sowohl der zwei- als auch dreidimensionale Fall für Polymere mit bis zu 27 bzw. 18 Monomeren diskutiert, was für exakte Auszählungen in etwa an der Obergrenze des zur Zeit mit vertretbarem Aufwand technisch Machbaren liegt. In beiden Fällen bestimmen wir für SAWs die Adsorptionstemperatur sowie den sogenannten „Crossover“-Exponenten und führen auch Skalierungsanalysen in Form von „Masterplots“ durch. Soweit vergleichbar stimmen die Ergebnisse gut mit Literaturwerten überein. Schließlich betrachten wir in einem Ausblick auch noch den Fall wechselwirkender Theta-Polymere mit $\varepsilon_m \neq 0$, wobei wir insbesondere in zwei Dimensionen ein sehr interessantes, aber noch nicht vollständig verstandenes Verhalten finden, das sicher noch zu weiteren Untersuchungen Anlass geben wird.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“, DFG-Normalverfahren JA483/24-3 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Adsorption von freien und verankerten Polymeren an Oberflächen
Adsorption of free and grafted polymers to surfaces
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), M. Möddel
- 3 Die Untersuchung allgemeiner struktureller Eigenschaften bei der Bindung von Polymeren an Oberflächen ist Gegenstand dieses Projekts. 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 „coarse-grained“ Kontinuumsmodelle für die Wechselwirkung von flexiblen Polymeren mit festen, planaren Oberflächen. Besondere Bedeutung kommt in unseren Untersuchungen, für die umfangreiche erweiterte Monte-Carlo-Simulationen (multikanonisches Ensemble, „Parallel Tempering“) durchgeführt werden müssen, den thermisch und durch die Änderung der Wechselwirkungsparameter verursachten strukturellen Übergängen zu. Dabei werden die Daten in zwei verschiedenen statistischen Gesamtheiten (kanonisch und mikrokanonisch) 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. Dabei hat es sich als sehr wichtig herausgestellt, ob die adsorbierenden Polymere als frei oder mit einem Ende an der Oberfläche verankert („grafted“) angenommen werden. Für beide Fälle ist es uns gelungen, für die Adsorption und Strukturbildung von flexiblen Polymeren das vollständige Phasendiagramm zu konstruieren und die Details der einzelnen Übergänge auszuarbeiten.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“, DFG-Normalverfahren JA483/24-3 und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 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, Schweden), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 In dieser Kollaboration über Institutsgrenzen hinweg wird mit Hilfe von Experimenten und Monte-Carlo-Computersimulationen eines mikroskopischen, hybriden Modells mit atomarer Auflösung der Einfluss eines Halbleitersubstrats auf die Faltungseigenschaften von Proteinen untersucht, die mit Hilfe biochemischer Methoden gezielt synthetisiert worden sind. 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 durch Atomkraftmikroskopie bestätigt werden konnten. Diese Ergebnisse erlauben wesentliche Schlussfolgerungen für den Zusammenhang zwischen Zusammensetzung und Struktur des am Halbleitersubstrat gebundenen Peptids, insbesondere einzelne Aminosäuren betreffend.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/24-3 und DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Thermodynamik der Polymeradsorption an eine flexible, fluktuierende Membran
Thermodynamics of polymer adsorption to a flexible, fluctuating membrane
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Karalus
- 3 Die Wechselwirkung von Makromolekülen mit Zellmembranen spielt eine wichtige Rolle in allen biologischen Prozessen. So regeln z. B. Membranproteine den Austausch von Signalen, kleinen Molekülen und Ionen zwischen dem extra- und intrazellulären Bereich. Es ist deshalb wichtig, die Erfahrungen der Arbeitsgruppe mit Computersimulationen der Adsorption von Polymeren an harten, ebenen Materialflächen auf weiche, fluktuierende Membranen zu übertragen. Zum einen wird dabei eine *ebene* Oberfläche durch eine *gekrümmte* ersetzt. Für die Eigenschaften der Adsorption ist es aber vermutlich wichtiger, dass die gekrümmte Fläche in dieser neuen Studie zusätzlich auch *fluktuert*, also insbesondere auf die adsorbierenden Polymere „reagieren“ kann, d. h. eine sogenannte „back-reaction“ zeigt. Das kombinierte Polymer- und „tethered“ Membranmodell enthält 12-6 Lennard-Jones-Wechselwirkungen zwischen den Monomeren und zur Membran sowie eine „FENE“-artige elastische Energie für die Polymer- und Membranbonds, wobei ein Ende des Polymers im Zentrum der Membran verankert („grafted“) ist. Mittels „Parallel Tempering“-Monte-Carlo-Simulationen haben wir das vollständige (Pseudo-) Phasendiagramm als Funktion der Temperatur und der Wechselwirkungsstärke zwischen den Monomeren des Polymers und der Membran bestimmt. Wir finden 8 (Pseudo-)Phasen, für die jeweils die typischen Polymerkonformationen identifiziert werden konnten. Besonders interessant und nicht unbedingt vorhersehbar sind zwei Phasen, die durch „embedded compact“ und „embedded elongated“ Polymerkonformationen charakterisiert werden können, die beide in eine deutlich lokal gekrümmte Membrenumgebung eingebettet sind. Diese beiden Phasen zeigen die „back-reaction“ der Membran auf das Polymer am deutlichsten, da hier ein nichtlinearer Rückkopplungseffekt erzeugt wird, der auf das Polymer strukturierend wirkt. Für die gestreckten „embedded elongated“ Polymerkonformationen ist dies besonders auffällig.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/24-3)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Simulationen von Polymeren auf Graphikkarten
Simulations of polymer on graphics cards
- 2 PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), J. Groß, Prof. Dr. W. Janke
(janke@itp.uni-leipzig.de)
- 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 verändert werden können. Da sich diese „Multicore“-Technologien in Form von Graphikkartenprozessoren („GPU Computing“) zukünftig vermutlich weiter durchsetzen werden, ist es sinnvoll, die volle Kapazität dieser Architekturen für unsere Anwendungen zugänglich zu machen. Wir untersuchen in diesem Projekt primär den Effizienzgewinn bei sogenannten „Parallel Tempering“-Monte-Carlo-Methoden für einfache Polymermodelle, an deren thermodynamischen Eigenschaften wir interessiert sind. In ersten Vergleichstests mit NVIDIAs relativ leicht anwendbarer Programmiersprache CUDA haben wir für die auf GT200 basierenden Tesla C1060 und GTX285 GPUs (mit jeweils 240 Kernen) und einer GPU der nächsten Generation, einer Fermi GTX480 Graphikkarte (mit 480 Kernen), bereits erhebliche Leistungssteigerungen im Vergleich zu Simulationen auf konventionellen PC-CPU's (ein Kern eines Quadcore Xeon E5620 Prozessors) nachweisen können (Faktoren in der Größenordnung 70 – 130), so dass sich dieser Ansatz für derartige Anwendungen als praktikabel und effizient erweist.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/24-3)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Quantenkritische Phänomene in uniformen und gemischten Heisenberg-Spinketten
Quantum critical phenomena in uniform and mixed Heisenberg spin chains
- 2 R. Bischof, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de)
- 3 Das Quanten-Heisenbergmodell (sowie verschiedene Verallgemeinerungen davon) ist eines der grundlegendsten Modelle des Quantenmagnetismus und steht in Verbindung mit Hochtemperatur-Supraleitern. Darüber hinaus bietet es eine Vielzahl an kritischen Phänomenen, abhängig von der Spingröße und verschiedenen Kontrollparametern. Im Speziellen werden kritische Punkte von zwei gemischten Spinketten mit zwei verschiedenen Spingrößen, paarweise angeordnet, untersucht. Mittels eines selbstimplementierten Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus sowie der Lanczos-Methode zur exakten Diagonalisierung berechnen wir zahlreiche Observable. Darunter auch neuartige Verallgemeinerungen von stringartigen Unordnungs- und Ordnungsparametern auf gemischte Spinketten (z. B. eine Verallgemeinerung des Unordnungsparameters des Quanten-Ashkin-Teller-Modells), welche Aufschluss über weitere vorhandene Skalendimensionen geben. Unter Verwendung von „Multi-Histogramm“-Umgewichtungsmethoden, die wir auch auf sogenannte verbesserte Schätzer verallgemeinern konnten, wurde durch eine „Finite-Size Scaling“-Analyse das Phasendiagramm im XY-ähnlichen Bereich bestimmt. Bei der anschließenden Bestimmung der kritischen Exponenten extrahierten wir eine kritische Linie mit kontinuierlich veränderlichen Exponenten, was den Schluss nahelegt, dass die untersuchten Phänomene der Gaußschen Universalitätsklasse angehören. Am $SU(2)$ -symmetrischen isotropen Heisenbergpunkt treten in homogenen Spinketten bekanntermaßen logarithmische Korrekturen auf. Unsere Untersuchungen zeigen eindeutige Anzeichen für das Vorhandensein entsprechender logarithmischer Korrekturen auch in gemischten Spinketten. Die quantitative Untersuchung der Skaleneigenschaften gestaltet sich dadurch schwierig.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Quanten-Kompass-Modell mit Schraubenrandbedingungen
Quantum compass model with screw-periodic boundary conditions
- 2 Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), Dr. A. Läuchli (Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme (MPI PKS), Dresden), Dr. S. Wenzel (École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz)
- 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 einige spekulative Behauptungen mit Hilfe von Computersimulationen durch einen sehr sorgfältigen Vergleich des klassischen und quantenmechanischen Modells. Dabei stellte sich heraus, dass dieses Modell ungewöhnlich starke Randeffekte zeigt, die die Datenanalyse erheblich beeinflussen und zu fehlerhaften Schlussfolgerungen führen können. Wir haben deshalb die üblichen periodischen Randbedingungen durch sogenannte Schraubenrandbedingungen ersetzt. Im klassischen Fall finden wir, dass damit mindestens so gute Skalierungseigenschaften erreicht werden können wie mit den dort häufig verwendeten „annealed“ Randbedingungen, die allerdings nicht auf den quantenmechanischen Fall übertragen werden können. Da unsere Schraubenrandbedingungen jedoch genau dies zulassen, erzielen wir für das quantenmechanische Modell signifikante Genauigkeitsverbesserungen. Dies erlaubt eine klärende Diskussion der Gründe für das anormale Skalierungsverhalten bei periodischen Randbedingungen. Für das klassische Modell konnten zusätzliche Verbesserungen durch die Entwicklung eines Clusteralgorithmus erzielt werden, der allerdings nicht auf den quantenmechanischen Fall übertragen werden kann.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Anwendung der Geometrothermodynamik auf schwarze Löcher
Application of geometrothermodynamics to black holes
- 2 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 Die Anwendung von informationsgeometrischen Verfahren in der statistischen Physik, bei denen eine Metrik im Zustandsraum konstruiert wird, hat sich als nützlicher alternativer Zugang zur Charakterisierung von Phasenübergängen erwiesen. Die Ergebnisse, die entweder mit der Ruppeiner- oder Weinhold-Metrik erzielt wurden, haben sich in allen bisherigen Anwendungen auf strukturell einfache Systeme als konsistent erwiesen. Anomalien haben sich allerdings bei der Anwendung auf die Thermodynamik schwarzer Löcher ergeben. In diesem Projekt zeigen wir, dass die Krümmung einer bestimmten, unter Legendretransformationen invarianten Metrik (die sogenannte Quevedo-Metrik) für ein schwarzes Loch vom Kehagias-Sfetsos (KS) Typ die erwartete Singularität am Phasenübergangspunkt tatsächlich aufweist. Wir vergleichen Ergebnisse für die Ruppeiner-, Weinhold- und Quevedo-Metriken und untersuchen im letzteren Fall zusätzlich, ob die Schlussfolgerungen konsistent sind, wenn man entweder die Entropie oder die Masse als primäres thermodynamischen Potential wählt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Kritische Amplitudenverhältnisse im Baxter-Wu-Modell
Critical amplitude ratios of the Baxter-Wu model
- 2 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 $R = \Gamma_+ / \Gamma_-$ 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 $q = 4$ unbefriedigend. Als Grund hierfür wurden relativ starke logarithmische Korrekturen zum führenden Skalenverhalten vermutet, die in den numerischen Analysen und Fits nicht hinreichend gut berücksichtigt werden können. Um diese Behauptung zu überprüfen, haben wir umfangreiche Monte-Carlo-Computersimulationen des 2D Baxter-Wu-Modells (ein Modell mit Dreispinwechselwirkung auf einem Dreiecksgitter) durchgeführt, das ebenfalls in der $q = 4$ Potts-Universalitätsklasse liegt, von dem aber exakt bekannt ist, dass *keine* logarithmischen Korrekturen auftreten. Als zentrales Ergebnis finden wir für das Baxter-Wu-Modell in der Tat eine exzellente Übereinstimmung unseres numerischen Resultats für das Amplitudenverhältnis R mit den theoretischen Vorhersagen und damit klare Hinweise darauf, dass die Diskrepanz zwischen Theorie und Computerexperiment beim $q = 4$ Potts-Modell auf logarithmische Korrekturen zurückzuführen ist.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07 mit Nancy)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Kreuzkorrelationen und statistische Fehlerabschätzung in Monte-Carlo-Simulationen
Cross correlations and statistical error estimation in 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 wohlbekannten 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. Darüber hinaus ermöglicht eine Kovarianzanalyse die Formulierung optimaler Schätzer mit oft erheblich reduzierter Varianz im Vergleich zu konventionellen Schätzfunktionen. Dadurch lassen sich weitgehend modellunabhängig Verbesserungsfaktoren der Größenordnung 10 in der benötigten Computerzeit erzielen.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/23-1/2)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Selbstadaptive Simulationen kritischer Phänomene
Self-adaptive simulations of critical phenomena
- 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-Histogramm“-Umgewichtungsmethode die Analyse durchführen, oder man verwendet unseren neuen „Parallel Tempering Cluster“-Algorithmus. Dieser basiert auf der „Parallel Tempering“-Methode, welche neben der automatisierten, adaptiven 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 Variante verwendet, in der die einzelnen Replika mit dem Swendsen-Wang Cluster-Algorithmus simuliert werden. Der wesentliche Vorteil unseres neuen Verfahrens besteht darin, dass nun alle Daten bei den simulierten Temperaturen sehr kleine Autokorrelationszeiten aufweisen 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 JA483/23-1/2)

Forschungsbericht 2010

- 0 Computerorientierte Quantenfeldtheorie
Computational quantum field theory
- 1 Neuartige Methoden für Monte-Carlo-Computersimulationen
Novel methods for Monte Carlo computer simulations
- 2 M. Aust, K. Austin, PD Dr. M. Bachmann (Forschungszentrum Jülich), R. Bischof, Dr. E. Bittner, Dr. V. Blavatska (Lviv, Ukraine), E. Ehrenpreis, N. Fricke, M. Gerlach, Prof. Dr. W. Janke (janke@itp.uni-leipzig.de), S. Karalus, M. Marenz, M. Möddel, M. Müller, H. Nagel, PD Dr. T. Neuhaus (Forschungszentrum Jülich), A. Nußbaumer, Dr. habil. A.M.J. Schakel (Recife, Brasilien), Dr. S. Schnabel (Univ. of Georgia, USA), S. Schöbl, Dr. T. Vogel (Forschungszentrum Jülich), Dr. B. Waclaw (Univ. of Edinburgh, UK), A. Wagner, Dr. M. Weigel (Universität Mainz), Dr. S. Wenzel (EPF Lausanne, Schweiz), M. Wiedenmann, B. Winkler, J. Zierenberg
- 3 In den letzten Jahren sind immer wieder neuartige 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 Wurmalgorithmen, „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. Besondere Bedeutung kommt auch verschiedenen Kombinationen der obigen Verfahren zu, was häufig zu erheblichen Effizienzsteigerungen führt.
- 4 Weiterführung: ja
- 5 Finanzierung: Haushaltfinanzierte Forschung und Drittmittel (DFG-Normalverfahren JA483/23-1/2, JA483/24-3, JA483/27-1, DFG-Forschergruppe FOR877, DFG-Graduiertenschule „BuildMoNa“, Institutspartnerschaft Nr. 3.4-Fokoop-DEU/1117877 der Alexander von Humboldt-Stiftung und DFH-UFA (Deutsch-Französische Hochschule) Graduiertenschule CDFA-02-07)