Themenkomplex II B

Forschungskomplex II B.1
Quantenfeldtheorie des Festkörpers

II B.1.1 2D magnetische Systeme mit Anisotropie

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Wolfhard Janke

(Mitarbeiter: J. Keller, T. Sauer (Bern), A. Cuccoli (Florenz), V. Tognetti (Florenz), P. Verruchi (Florenz), R. Vaia (Florenz), zwei Doktoranden)

Zweidimensionale Spinsysteme haben in den letzten Jahren ein großes Interesse in der Physik kondensierter Materie hervorgerufen [1, 2, 3]. Einer der Hauptgründe dafür ist die Entdeckung vieler neuer Materialien, die wichtige technologische Anwendungen versprechen oder sogar jetzt schon haben und deren physikalische Eigenschaften direkt auf ihre Schichtstruktur und das damit verbundene zweidimensionale Verhalten zurückzuführen sind. Der prominenteste Vertreter unter diesen Materialen sind ohne Zweifel Hochtemperatursupraleiter.

Davon abgesehen ist das Studium von Modellen für zweidimensionale Magnete ein eigenes wichtiges Forschungsfeld mit vielen praktischen Anwendungen. Die beeindruckenden Fortschritte in experimentellen Techniken haben es möglich gemacht, magnetische Mehrschichtsysteme, ultradünne Filme und sogar magnetische Monolagen von sehr hoher Qualität zu präparieren. Aus der Grundlagensicht erscheinen magnetische Monolagen besonders atttraktiv, da sie als strikt zweidimensionale Systeme am besten zum Test der vorgeschlagenen Modelle und der Zuverlässigkeit analytischer und numerischer Methoden herangezogen werden können.

Das konkrete Ziel dieses Teilprojekts ist ein besseres Verständnis der quantenstatistischen Eigenschaften einer Klasse von zweidimensionalen Magneten, die durch das XXZ Modell mit Hamiltonfunktion

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + \lambda \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right] \tag{1}$$

beschrieben werden können, wobei $\hat{S}_i^\alpha$ die α-Komponente des Spinoperators $\hat{S}_i$ am Gitterplatz i eines quadratischen Gitters mit periodischen Randbedingungen bezeichnet. Die Kopplungskonstante J ist positiv für Ferromagnete (FM) und negativ für Antiferromagnete (AFM). In beiden Fällen bestimmt ihr Absolutwert die relevante Energieskala, während der dimensionslose Anisotropieparameter λ über einen großen Bereich variiert werden kann. In den Grenzfällen λ=0 und $\lambda \longrightarrow \infty$ mit $J\lambda$ = const. wird das XXZ model oft auch als “XX0” bzw. “00Z” Modell bezeichnet. Von besonderem Interesse ist der antiferromagnetische Fall, für den man zwei charakteristische Regionen unterscheiden kann:

I. $|\lambda| < 1$: “easy-*plane*” Magnet
II. $|\lambda| > 1$: “easy-*axis*” Magnet

In Abhängigkeit von den vorherrschenden Symmetrieeigenschaften erwartet man für Phasenübergänge in der Region I (“easy-plane”) ein Kosterlitz-Thouless Verhalten [4, 5], während in der Region II (“easy-axis”) ein Isingartiges Verhalten beobachtet werden sollte.

Methodisch sollen numerischen Verfahren wie Quanten Monte Carlo Simulationen [6, 7] mit effektiv klassischen Potentialmethoden [8, 9, 10, 11] kombiniert werden, die die Quantensysteme approximativ auf effektiv klassische Systeme abbilden und in der Regel sowohl analytisch als auch numerisch einfacher zu behandeln sind.

Dabei ist vor allem das Phasendiagramm von Interesse, d.h. der Typ der Universalitätsklasse. Um diesen zu bestimmen, sollen in den Monte Carlo Simulationen die spezifische Wärme, die Suszeptibilität, der Binder Parameter und andere thermodynamische Größen für verschiedene Gittergrößen gemessen werden. Durch Anwendung von “Finite-Size-Scaling” (FSS) Ansätzen können daraus dann durch geeignete Fits die Übergangstemperaturen und die kritischen Exponenten bestimmt werden [12, 13, 14, 15]. In den meisten Fällen ist ein direkter Vergleich mit experimentellen Ergebnissen möglich.

Literatur

[1] D.C. Mattis, *The Theory of Magnetism I* (Springer, Berlin, 1981); *The Theory of Magnetism II* (Springer, Berlin, 1985).

[2] *Magnetic Excitations and Fluctuations*, Hrsg. S.W. Lovesey, U. Balucani, F. Borsa und V. Tognetti (Springer, Berlin, 1984); *Magnetic Excitations and Fluctuations II*, Hrsg. U. Balucani, S.W. Lovesey, M.G. Rasetti und V. Tognetti (Springer, Berlin, 1987).

[3] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer, Berlin, 1994).

[4] J.M. Kosterlitz und D.J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973); J.M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974); für eine Übersicht siehe: P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987); H. Kleinert, *Gauge Fields in Condensed Matter* (World Scientific, Singapore, 1989), Vol. I.

[5] W. Janke und K. Nather, Phys. Lett. A **157**, 11 (1991); Phys. Rev. B **48**, 7419 (1993); Phys. Rev. B **48**, 15807 (1993); Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **30**, 834 (1993); in: *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics V*, Hrsg. D.P. Landau, K.K. Mon und H.-B. Schüttler (Springer, Berlin, 1993); S. 140; W. Janke, Phys. Rev. B **55**, 3580 (1997); C. Holm, W. Janke, T. Matsui und K. Sakakibara, Physica A **246**, 633 (1997).

[6] H.G. Evertz, preprint cond-mat/9707221, in: *Numerical Methods for Lattice Quantum Many-Body Probems*, Hrsg. D.J. Scalapino (Perseus books, Frontiers in Physics, 2000); K. Harada, M. Troyer und N. Kawashima, preprint cond-mat/9712292; B.B. Beard und U.-J. Wiese, preprint cond-mat/9602164, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **53**, 838 (1997); B.B. Beard, R.J. Birgeneau, M. Greven und U.-J. Wiese, preprint cond-mat/9609110, Phys. Rev. Lett. **80**, 1742 (1998); B. Ammon, H.G. Evertz, N. Kawashima, M. Troyer und B. Frischmuth, preprint cond-mat/9711022.

[7] W. Janke und T. Sauer, Chem. Phys. Lett. **201**, 499 (1993); Phys. Rev. E **49**, 3475 (1994); in: Proceedings of the Fourth International Conference *Path Integrals from meV to MeV: Tutzing ’92*, Hrsg. H. Grabert, A. Inomata, L.S. Schulman und U. Weiss (World Scientific, Singapore, 1993), S. 17-25; Phys. Lett. A **197**, 335 (1995); in: Proceedings of the Fifth International Conference *Path Integrals from meV to MeV: Dubna ’96*, Hrsg. V.S. Yarunin und M.A. Smondyrev (JINR

Press, Dubna, 1996), S. 139; J. Chem. Phys. **107**, 5821 (1997); in: *Path Integrals from peV to TeV: 50 years after Feynman's paper*, Hrsg. R. Casalbuoni, R. Giachetti, V. Tognetti, R. Vaia und P. Verrucchi (World Scientific, Singapore, 1999); S. 554.

[8] R. Giachetti und V. Tognetti, Phys. Rev. Lett. **55**, 912 (1985); Phys. Rev. B **33**, 7647 (1986).

[9] R.P. Feynman und H. Kleinert, Phys. Rev. A **34**, 5080 (1986).

[10] A. Cuccoli, V. Tognetti, P. Verrucchi und R. Vaia, Phys. Rev. B **46**, 11601 (1992); Phys. Rev. B **51**, 12840 (1995); Phys. Rev. Lett. **77**, 3439 (1996); Phys. Rev. B **56**, 14456 (1997); A. Cuccoli, R. Giachetti, V. Tognetti, R. Vaia und P. Verrucchi, J. Phys.: Condensed Matter **7**, 7891 (1995); L. Capriotti, A. Cuccoli, V. Tognetti, R. Vaia und P. Verrucchi, Physica D **119**, 68 (1998).

[11] W. Janke und H. Kleinert, Phys. Lett. A **118**, 371 (1986); Chem. Phys. Lett. **137**, 162 (1987); Phys. Rev. Lett. **75**, 2787 (1995); W. Janke und B.K. Cheng, Phys. Lett. A **129**, 140 (1988). W. Janke, in: Proc. 3rd Int. Conf. on *Path Integrals from meV to MeV*, Bangkok, Thailand, January 9-13, 1989, Hrsg. V. Sa-yakanit et al. (World Scientific, Singapore, 1989); S. 355.

[12] K. Binder, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 5b, Hrsg. C. Domb und M.S. Green (Academic Press, London, 1976); S. 1; und in: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Hrsg. K. Binder (Springer, Berlin, 1979), S. 1.

[13] K. Binder und D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: An Introduction* (Springer, Berlin, 1988, 1992, 1997).

[14] W. Janke, *Monte Carlo Simulations of Spin Systems*, in: *Computational Physics: Selected Methods – Simple Exercises – Serious Applications*, Hrsg. K.H. Hoffmann und M. Schreiber (Springer, Heidelberg, 1996), S. 10.

[15] W. Janke, *Nonlocal Monte Carlo Algorithms for Statistical Physics Applications*, Mathematics and Computers in Simulations **47**, 329 (1998).

Promotionsprojekte

1. Quanten Monte Carlo Simulationen des "easy-plane" Magneten und Untersuchungen des Crossover zum "easy-axis" Verhalten.
2. Effektiv klassisches Potential für "easy-axis" Antiferromagnete im Vergleich mit Quanten Monte Carlo Simulationen.
3. Dissipative Quantensysteme.

Zusammenarbeit

Dieses Projekt soll in enger Zusammenarbeit mit Dr. Tilman Sauer (Universität Bern) und der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Valerio Tognetti (Universität Florenz) durchgeführt werden. Für die notwendigen gegenseitigen Besuche besteht seit April 2000 eine Förderung durch den DAAD im Rahmen des "Vigoni"-Italienprogramms. Für die Zusammenarbeit mit Dr. Sauer werden allerdings Gast- und Reisemittel benötigt. Sehr hilfreich sollten auch die langjährigen Kontakte zu Prof. Dr. Hagen Kleinert (FU Berlin) sein.

Im Rahmen des Graduiertenkollegs sollten Diskussionen und eventuell auch eine direkte Kollaboration mit Prof. Dr. D. Ihle und Mitarbeitern sehr förderlich sein, die seit vielen Jahren an ähnlichen Fragestellungen vorwiegend mit analytischen Methoden arbeiten. Gerade die komplementären Zugänge (hauptsächlich analytisch bzw. numerisch) sollten sich für beide Seiten als wissenschaftlich sehr fruchtbar erweisen.

Einzuladende Gastwissenschaftler

Tilman Sauer (Bern, Schweiz)	2×2 Wochen pro Jahr
Hans-Gerd Evertz (Graz, Österreich)	2×1 Woche
Valerio Tognetti (Florenz, Italien)	2×1 Woche
Ruggero Vaia (Florenz, Italien)	2×2 Wochen
Alessandro Cuccoli (Florenz, Italien)	2×4 Wochen

Workshops

Teile dieses Projekts sollten in den für 2003 geplanten Workshop “LEILAT03” - 13. Workshop on Lattice Field Theory – Present Results and Future Perspectives, Leipzig, Juni 2003, einfließen, den der Antragsteller vermutlich wieder in Zusammenarbeit mit Priv.-Doz. Dr. Arwed Schiller organisieren wird.

II B.1.2 Einfluß nichtmagnetischer Störstellen auf die Natur des Phasenübergangs im 3D Pottsmodell

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Wolfhard Janke

(Mitarbeiter: C. Chatelain, M. Hellmund, B. Berche (Nancy), P.-E. Berche (Rouen), zwei Doktoranden)

Der Einfluß von Störstellen auf Phasenübergänge ist in den letzten zwanzig Jahren sehr intensiv studiert worden [1]. Üblicherweise unterscheidet man dabei zwischen “annealed” Unordnung, bei der die Störstellen im thermischen Gleichgewicht mit dem restlichen System sind, und “quenched” Unordnung, bei der die Störstellen als eingefrorene Variable betrachtet werden. Für Systeme im Bereich der kondensierten Materie ist diese Situation oft realistischer.

Defekte oder Störstellen in realen Materialen werden meist durch zufällige Kopplungen in Spinsystemen oder durch verdünnte Magnete modelliert. Die dadurch erzeugte Unordnung führt i.a. zu einer Erniedrigung der kritischen Temperatur. Kennt man die kritischen Exponenten des reinen Systems, so erlaubt das Harris Kriterium [2] eine qualitative Vorhersage des Verhaltens des ungeordneten Systems in der Nähe eines Phasenübergangs 2. Ordnung. Ist $\alpha < 0$, so wird das kritische Verhalten nicht modifiziert. Ist dagegen $\alpha > 0$, so ist Unordnung eine relevante Störung, und es wird ein modifiziertes kritisches Verhalten erwartet. Der Fall $\alpha = 0$ ist marginal, und das Harris Kriterium kann keine Aussage machen. Eingefrorene Störstellen können auch auf Phasenübergänge 1. Ordnung einen starken Einfluß haben [3, 4]. Das zentrale Resultat einer Arbeit von Imry und Wortis zeigt, daß die Unordnung in diesem Fall einen Phasenübergang 2. Ordnung induzieren kann.

Diese Fragestellung ist kürzlich im zweidimensionalen q-Zustand Pottsmodell durch verschiedene Gruppen mit Hilfe von Monte Carlo Computersimulationen [5, 6, 7] und Transfermatrixtechniken [8, 9] untersucht worden. Aus exakten analytischen Rechnungen ist bekannt, daß dieses Modell im reinen Fall für $q > 4$ einen Phasenübergang 1. Ordnung besitzt. Im ungeordneten Fall findet man für jeden bisher untersuchten Wert von $q > 4$ starke numerische Hinweise auf eine Aufweichung in einen Phasenübergang 2. Ordnung, und zwar selbst für eine sehr geringe Konzentration der gestörten Wechselwirkungen.

Das analoge dreidimensionale Problem ist offensichtlich aus experimentellen Sicht noch interessanter. In diesem Teilprojekt soll deshalb der Fall nichtmagnetischer Störstellen vom "bond disorder" Typ im $q = 4$ Pottsmodell in drei Dimensionen studiert werden. Für das reine System ist der Phasenübergang für $q \geq 3$ von 1. Ordnung [10]. Die Wahl von $q = 4$ stellt sicher, daß der Übergang 1. Ordnung im reinen System hinreichend stark ist, um sensitiv auf Unordnungseffekte zu sein. In drei Dimensionen erwarten wir, daß der Übergang im Bereich geringer Störstellenkonzentration von 1. Ordnung bleibt und mit steigender Störstellenkonzentration in einem trikritischen Punkt in einen Übergang 2. Ordnung übergeht, bis schließlich der Perkolationsübergang erreicht wird [4]. Nach diesem Perkolationsübergang kann für endliche Temperaturen keine geordnete Phase mehr existieren. Diese Fragestellungen sollen mit Hilfe von Monte Carlo Computersimulationen [11, 12, 13] untersucht werden.

Das Gesamtprojekt gliedert sich dabei in vier Teilprojekte:

A. Die Bestimmung des Phasendiagramms des dreidimensionalen ungeordneten 4-Zustand Pottsmodells in der Konzentration-Temperatur-Ebene, was Simulationen bei verschiedenen Temperaturen erfordert.
B. Das Studium der Universalitätsklasse im Bereich der Phasenübergänge 2. Ordnung.
C. Das Studium des trikritischen Punktes.

Als eine begleitende Studie soll auch der Fall von

D. "bond disorder" im dreidimensionalen Isingmodell ($q = 2$)

studiert werden, da bisher in drei Dimensionen nur sogenante "site disorder" betrachtet worden ist [14]. Da das reine Isingmodell in drei Dimensionen einen Phasenübergang 2. Ordnung mit einem kritischen Exponenten $\alpha > 0$ besitzt, erwartet man nach dem Harris-Kriterium einen starken Einfluß der Unordnung auf das kritische Verhalten. Die interessante Frage ist hier, ob verschiedene Unordnungstypen in dieselbe modifizierte Universalitätsklasse führen. Diese Ergebnisse können mit mehreren kürzlichen feldtheoretischen Berechnungen im Rahmen des Replika-Formalismus verglichen werden [15].

Literatur

[1] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996), Kap. 8.
[2] A.B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
[3] Y. Imry und M. Wortis, Phys. Rev. B **19**, 3580 (1979); M. Aizenman und J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989); K. Hui und A.N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).

[4] J. Cardy, "Quenched Randomness at First-Order Transitions", Physica A **63**, 215 (1999) [cond-mat/9806355].
[5] S. Chen, A.M. Ferrenberg und D.P. Landau, Phys. Rev. E **52**, 1377 (1995).
[6] C. Chatelain und B. Berche, Phys. Rev. Lett. **80**, 1670 (1998).
[7] M. Picco, Preprint cond-mat/9802092 (1998).
[8] M. Picco, Phys. Rev. Lett. **79**, 2998 (1997).
[9] J. Cardy und J.J. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997); J.J. Jacobsen und J. Cardy, Nucl. Phys. B **515**, 701 (1998).
[10] W. Janke und R. Villanova, Nucl. Phys. B **489**, 679 (1997); M.S. Carroll, W. Janke und S. Kappler, J. Stat. Phys. **90**, 1277 (1998).
[11] W. Janke, *Recent Developments in Monte Carlo Simulations of First-Order Phase Transitions*, eingeladener Vortrag, in: *Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII*, Hrsg. D.P. Landau, K.K. Mon und H.-B. Schüttler (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1994), S. 29.
[12] W. Janke, *Multicanonical Monte Carlo Simulations*, Physica A **254**, 164 (1998).
[13] W. Janke, *Monte Carlo Methods for Sampling of Rare Event States*, eigeladene Vorlesung, in: *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*, Proceedings of the International School of Physics "Computer Simulation of Rare Events and the Dynamics of Classical and Quantum Condensed-Phase Systems" und Euroconference zu "Technical advances in Particle-based Computational Material Sciences", Lerici, Italy, July 7 – 18, 1997, Hrsg. B. Berne, G. Ciccotti und D. Coker (World Scientific, Singapore, 1998), S. 195.
[14] S. Wiseman und E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1998); Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998); H.G. Ballesteros, L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi und J.J. Ruiz-Lorenzo, Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
[15] R. Folk, Yu. Holovatch und T. Yavors'kii, Phys. Rev. B **61**, 15114 (2000); D.V. Pakhnin und A.I. Sokolov, Phys. Rev. B **61**, 15130 (2000); J.M. Carmona, A. Pelissetto und E. Vicari, Phys. Rev. B **61**, 15136 (2000).

Promotionsprojekte

1. Monte Carlo Untersuchungen des dreidimensionalen q-Zustand Pottsmodells mit Bondunordnung.
2. Untersuchung des trikritschen Punktes im dreidimensionalen 4-Zustand Pottsmodells mit Bondunordnung.

Zusammenarbeit

Dieses Projekt soll in enger Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Bertrand Berche (Universität Nancy) und Dr. Pierre-Emmanuel Berche (Universität Rouen) durchgeführt werden. Für die notwendigen gegenseitigen Besuche besteht für die Jahre 2000 und 2001 eine Förderung durch den DAAD im Rahmen des "Procope"-Frankreichprogramms, deren Verlängerung für das Jahr 2002 beantragt worden ist.

Weitere wichtige Kontakte bestehen zu Prof. Dr. Eytan Domany (Weizmann Institut, Rehovot, Israel) und Prof. Dr. Amnon Aharony (Tel Aviv University, Israel), die beide über ein für die Jahre 2001-2003 bewilligtes Projekt im Rahmen der German-Israel-Foundation (GIF) finanziert werden können.

Im Rahmen des Graduiertenkollegs sollten Diskussionen und eventuell auch eine direkte Kollaboration mit Prof. Dr. U. Behn und Mitarbeitern sehr förderlich sein, die sich seit einiger Zeit mit ähnlichen Fragestellungen im Zusammenhang mit Zufallsfeldern beschäftigen. Da Herr Behn stärker mit analytischen Methoden arbeitet, sollte sich dieser Kontakt für beide Seiten als sehr anregend erweisen. Auf der methodischen Seite wird eine enge Kooperation zu Monte Carlo Verfahren mit dem Teilprojekt II A.3.2 von Priv.-Doz. Dr. A. Schiller angestrebt.

Einzuladende Gastwissenschaftler

John Cardy (Oxford, Großbritannien)	1×6 Wochen
Juan J. Ruiz-Lorenzo (Madrid, Spanien)	2×1 Woche
Ramon Villanova (Barcelona, Spanien)	2×1 Woche
Lev Shchur (Moskau, Rußland)	2×1 Woche
Bertrand Berche (Nancy, Frankreich)	1×8 Wochen
Christophe Chatelain (Nancy, Frankreich)	2×4 Wochen
Pierre-Emmanuel Berche (Rouen, Frankreich)	2×4 Wochen

Die im Rahmen des Graduiertenkollegs geplanten Besuche von Christophe Chatelain und Pierre-Emmanuel Berche sind nach Auslaufen der DAAD-"Procope" Förderung für die Jahre 2003 und 2004 vorgesehen. Der geplante längere Gastaufenthalt von Bertrand Berche ist für eine Reihe von Spezialvorlesungen gedacht, was in dieser zeitlichen Länge und Form nicht durch das "Procope"-Projekt finanziert werden kann.

Workshops

Teile dieses Projekts sollten in den für 2003 geplanten Workshop "LEILAT03" - 13. Workshop on Lattice Field Theory – Present Results and Future Perspectives, Leipzig, Juni 2003 (Organisatoren: W. Janke und A. Schiller), einfließen.

II B.1.3 "Multi-Overlap" Computersimulationen von Spingläser

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Wolfhard Janke

(Mitarbeiter: B.A. Berg (Tallahassee, USA), A. Billoire (Saclay), zwei Doktoranden)

Trotz erheblicher Anstrengungen in den letzten Jahren sind viele Probleme der Physik ungeordneter Systeme noch weitgehend unverstanden. Die enorme Komplexität und Vielfalt der Phänomene macht analytische Behandlungen außerordentlich schwierig und schlägt sich in numerischen Simulationen in extrem großen Rechenzeiten nieder. Dies ist insbesondere für Spingläser der Fall, bei denen Frustrationseffekte besondere Schwierigkeiten hervorrufen [1]. In diesem Teilprojekt soll der Prototyp aller Spinglasmodelle, nämlich das Edwards-Anderson Ising-Spinglas [2] mit bimodaler Verteilung der "quenched" Kopplungskonstanten ($J_{ij} = \pm 1$), mit Hilfe von Monte Carlo Simulationen besser verstanden werden. Für die Mittelwertbildung über die eingefrorene Unordnung müssen dabei sehr viele Systeme mit zufällig gewürfelten Realisierungen J_{ij} (Größenordnung 500 - 10 000 Realisierungen) simuliert werden, wobei jede einzelne Simulation für sich allein schon sehr anspruchsvoll ist.

Das allgemein akzeptierte Bild der Tieftemperaturphase von Spingläsern ist eine zerklüftete (freie) Energielandschaft mit vielen Tälern und Bergen, die in standard Monte Carlo Simulationen zu einer starken Verlangsamung der (Pseudo-) Dynamik führen. Ein Schritt in die richtige Richtung scheinen hier multikanonische und Tempering Algorithmen zu sein [3], deren Eigenschaften Gegenstand aktueller Forschung sind. Die für konzeptionelle Fragen (z.B. Mean-Field- oder Dropletbeschreibung [4, 5]) wichtige Verteilung des Spinglasordnungsparameters ("overlap") [4], $q = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} s_i^{(1)} s_i^{(2)}$, kann aber auch damit nicht zuverlässig bestimmt werden. Hier bezeichnet N die Anzahl der Spinvariablen, und der obere Index unterscheidet zwei unabhängige Replika für dieselbe Verteilung der J_{ij}. Der von uns entwickelte "multi-overlap" Algorithmus [6] ist für diese Fragestellung maßgeschneidert und soll deshalb in diesem Teilprojekt verwendet werden.

Unsere bisherigen Analysen [7] sollen durch zusätzliche Simulationen auf größeren Gittern, durch Hinzunahme weiterer Realisierungen und durch zusätzliche Parameterwerte statistisch aussagekräftiger gemacht werden. Geplant sind folgende Arbeitsschritte:

1. Studium weiterer Temperaturen und insbesondere auch von Magnetfeldern.
2. Analyse der ε-Physik (Replikakopplungen).
3. Analyse der Flanken der q-Wahrscheinlichkeitverteilungen.
4. Analyse der Barrieren in der Freien Energie am Übergangspunkt.
5. Detaillierte Finite-Size-Scaling Analyse (bis Gitter der Größe 16^3 und mit wesentlich besserer Statistik als bisher), die insbesondere in Richtung Tieftemperaturphase über bisherige Ergebnisse [8] hinausgehen sollte (z.B. das Verhalten der Binder-Kumulanten). Hierzu hat es in letzter Zeit sehr kontroverse Ergebnisse gegeben, die dringend geklärt werden sollten.
6. Verallgemeinerung der "multi-overlap" Methode auf Molekularfeldmodelle [9].
7. Verallgemeinerung der "multi-overlap" Methode auf Pottsgläser [10].

Literatur

[1] K. Binder und A.P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986); M. Mezard, G. Parisi und M. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987); K.H. Fischer und J. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge University Press, Cambridge, 1991); D.S. Stein, *Spin Glasses and Biology* (World Scientific, Singapore, 1992); A.P. Young (Hrsg.), *Spin Glasses and Random Fields* (World Scientific, Singapore, 1998).

[2] S.F. Edwards und P.W. Anderson, J. Phys. F **5**, 965 (1975).

[3] B.A. Berg, *Brief Review of Multicanonical Simulations*, in: *Multiscale Phenomena and Their Simulation*, Proceedings of the International Conference, Bielefeld, Sept. 30 – Oct. 4, 1996, eds. F. Karsch, B. Monien und H. Satz (World Scientific, Singapore, 1997), pp. 137-146; W. Janke, *Multicanonical Monte Carlo Simulations*, Physica A **254**, 164 (1998).

[4] G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **43**, 1754 (1979).

[5] D.S. Fisher und D.A. Huse, Phys. Rev. B **38**, 386 (1988).

[6] B.A. Berg und W. Janke, *Multi-Overlap Simulations of the 3d Edwards-Anderson Ising Spin Glass*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4771 (1998).

[7] W. Janke, B.A. Berg und A. Billoire, *Energy Barriers of Spin Glasses from Multi-Overlap Simulations*, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 544 (1998); *Multi-Overlap Simulations of Free-Energy Barriers in the 3D Edwards-Anderson Ising Spin Glass*, Comp. Phys. Comm. **121-122**, 176 (1999); *Exploring Overlap Barriers in Spin Glasses with Monte Carlo Simulations*, Preprint (Juli 2000), erscheint in: Proceedings des NATO-Workshops *Multiscale Computation in Chemistry and Biology*, Eilat, Israel, 5.-11. April, 2000, Hrsg. J. Bernholc, K. Binder und A. Brandt; B.A. Berg, A. Billoire und W. Janke, *Spin Glass Overlap Barriers in Three and Four Dimensions*, Phys. Rev. B **61**, 12143 (2000).

[8] N. Kawashima and A.P. Young, Phys. Rev. B **53**, R484 (1996).

[9] O. Dillmann, W. Janke und K. Binder, *Finite-Size Scaling in the p-State Mean-Field Potts Glass: A Monte Carlo Investigation*, J. Stat. Phys. **92**, 57 (1998).

[10] B. Lobe, W. Janke und K. Binder, *High-Temperature Series Analysis of the q-state Potts Glass Model on D-Dimensional Hypercubic Lattices*, Eur. Phys. J. B **7**, 283 (1999).

Promotionsprojekte

1. "Multi-Overlap" Computersimulationen des Edwards-Anderson Ising Spinglasmodells.
2. Verallgemeinerung der "Multi-Overlap" Simulationsmethode auf Molekularfeldmodelle.
3. Numerische Untersuchungen von Potts Spingläser mit Hilfe des "Multi-Overlap" Monte Carlo Algorithmus.

Zusammenarbeit

Dieses Teilprojekt ist als eine enge Kollaboration mit Prof. Dr. Bernd A. Berg (Tallahassee, USA) und Dr. Alain Billoire (Saclay, Frankreich) angelegt. Die Koordination der sehr umfangreichen Simulationen und der ebenfalls recht aufwendigen Datenanalysen muß daher während gegenseitiger Besuche besprochen werden. Als sehr hilfreich sollten sich für dieses Teilprojekt auch die regelmäßigen Diskussionen mit Prof. Dr. Kurt Binder (Universität Mainz) und den weiteren Mitgliedern unserer GIF-Kollaboration (Adler, Aharony, Domany, Grassberger, Nattermann, Stauffer) erweisen.

Innerhalb des Graduiertenkollegs ist eine Zusammenarbeit zu methodischen Fragen mit dem Teilprojekt II A.3.2 von Priv.-Doz. Dr. A. Schiller geplant.

Einzuladende Gastwissenschaftler

Bernd A. Berg (Tallahassee, USA)	3×4 Wochen
Alain Billoire (Paris, Frankreich)	3×2 Wochen
Enzo Marinari (Rom, Italien)	2×1 Woche

Workshops

Teile dieses Projekts sollten in den für 2003 geplanten Workshop "LEILAT03" - 13. Workshop on Lattice Field Theory – Present Results and Future Perspectives, Leipzig, Juni 2003 (Organisatoren: W. Janke und A. Schiller), einfließen.

II B.1.4 Hochtemperaturreihenentwicklungen für Random-Bond-Modelle und Spingläser

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Wolfhard Janke

(Mitarbeiter: M. Hellmund, J. Adler (Haifa), A. Aharony (Tel Aviv), zwei Doktoranden)

Zufällige Störstellen und Unordnung können das kritische Verhalten von Systemen mit vielen Freiheitsgraden modifizieren oder zu völlig neuen Phänomenen führen. Die analytische Behandlung solcher Systeme erweist sich als außerordentlich schwierig. Neben Computersimulationen sind systematische Reihenentwicklungen bis zu hohen Ordnungen eine Alternative, um Aussagen über Übergangstemperaturen und kritische Exponenten zu gewinnen [1, 2]. Damit kann im Gegensatz zu anderen Methoden eine globale Übersicht über mehrdimensionale Parameterräume gewonnen werden, was für die Einordnung von Spezialfällen sehr hilfreich ist. Die große Komplexität dieser Entwicklungen soll mit Hilfe von computergestützten graphentheoretischen und algebraischen Algorithmen bewältigt werden, die dafür hochgradig effizient implementiert werden müssen. Durch eine von uns entwickelte, neuartige Methode der Auswertung der Beiträge einzelner Graphen ist es möglich geworden, für Pottsmodelle mit Zufallskopplungen die in der Literatur bekannten Reihen für Random-Bond-Modelle [3, 2] und Spingläser [4] wesentlich zu verlängern und auf andere Modelle zu erweitern.

Das Ziel des Vorhabens ist die Beschreibung von Phasenübergängen, d.h. die Bestimmung von Übergangspunkten, der Art der Übergänge, der kritischen Exponenten usw. für zwei Typen von ungeordneten Systemen:

A. Random-Bond (RB) Potts-Ferromagnete
B. Potts-Spingläser

in einem multidimensionalen Parameterraum. Dieses Ziel soll erreicht werden durch eine deutliche Verlängerung der bestehenden Hochtemperaturreihenentwicklungen für die Freie Energie und Suszeptibilität dieser Systeme, was zusammen mit einer Kombination verschiedener Reihenanalysemethoden wesentlich genauere Aussagen über das Phasendiagramm und die Eigenschaften der Phasenübergänge (bei Spingläsern insbesondere auch über die untere und obere kritische Dimension) gestatten sollte.

Zur Erzeugung der Hochtemperaturreihenentwicklungen soll die Sterngraphenentwicklung [5] benutzt werden. Daneben sollen alternative Verfahren auf ihre Anwendbarkeit auf ungeordnete Systeme überprüft werden. Vielversprechend erscheinen hier die sogenannte “linked-cluster”-Entwicklung [6] und die iterative Lösung von Schwinger-Dyson Gleichungen auf dem Gitter [7]. Vergleichende Untersuchungen fehlen in der Literatur gänzlich.

Die besondere Flexibilität der vorgeschlagenen Methode ermöglicht sowohl für Random-Bond q-Zustand-Potts-Ferromagnete als auch Potts-Spingläser die *globale* Untersuchung der Phasendiagramme in Abhängigkeit von den Parametern Anzahl der

Spinfreiheitsgrade q, Raumdimension D, Unordnungsstärke und -verteilung. Die damit angestrebte Untersuchung systematischer Trends ist mit anderen Methoden nicht möglich. In diesem (mindestens) dreidimensionalen Parameterraum wird man nicht jeden Punkt mit größtmöglicher Genauigkeit studieren können.

Für die Bestimmung des kritischen Verhaltens aus Hochtemperaturreihen sind verschiedene Analysemethoden bekannt und in der Literatur gut dokumentiert [1], die verglichen und weiterentwickelt werden sollen. Neben der Ratio-Methode muß ein Verfahren zur Padé-Approximation [8] implementiert werden, welches es erlaubt, den großen Parameterraum effizient zu durchsuchen. Hierfür sollen u.a. verbesserte Visualisierungstechniken entwickelt werden. Es muß untersucht werden, ob eine Transformation der Reihe mit Verschiebung der Singularitäten in der komplexen Temperaturebene zu einer Konvergenzverbesserung genutzt werden kann. Die bekannten Verfahren zur Analyse konfluenter Korrekturen müssen auf ihre Anwendbarkeit getestet und weiterentwickelt werden. Ferner müssen Verfahren zur Analyse von trikritischen Punkten analysiert und weiterentwickelt werden. All diese Fragestellungen sollen parallel zu den eigentlichen Analysen der beiden Modellklassen bearbeitet werden.

Literatur

[1] A.J. Guttmann, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 13, Hrsg.: C. Domb und J.L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1989); S. 1.

[2] J. Adler, C. Holm und W. Janke, *High-Temperature Series Analysis of the Classical Heisenberg and XY Model*, Physica A **201**, 581 (1993); B. Lobe, W. Janke und K. Binder, *High-Temperature Series Analysis of the q-state Potts Glass Model on D-Dimensional Hypercubic Lattices*, Eur. Phys. J. B **7**, 283 (1999); B. Lobe und W. Janke, *High-Temperature Star Graph Series Expansions of the q-state Potts Glass Model on D-Dimensional Hypercubic Lattices*, Mainz/Leipzig preprint, in Vorbereitung; A. Roder, J. Adler und W. Janke, *High-Temperature Series Analysis of 2D Random-Bond Ising Ferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4697 (1998); A. Roder, J. Adler und W. Janke, *High-Temperature Series Analysis of Free Energy and Susceptibility of the 2D Random-Bond Ising Model*, Physica A **265**, 28 (1999).

[3] J. Cardy, Physica A **263**, 215 (1999).

[4] C.F. Baillie, W. Janke, D.A. Johnston und P. Plecháč, *Spin Glasses on Thin Graphs*, Nucl. Phys. B **450** [FS], 730 (1995); B.A. Berg und W. Janke, *Multi-Overlap Simulations of the 3d Edwards-Anderson Ising Spin Glass*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4771 (1998); W. Janke, B.A. Berg und A. Billoire, *Energy Barriers of Spin Glasses from Multi-Overlap Simulations*, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 544 (1998); *Multi-Overlap Simulations of Free-Energy Barriers in the 3D Edwards-Anderson Ising Spin Glass*, Comp. Phys. Comm. **121-122**, 176 (1999); *Exploring Overlap Barriers in Spin Glasses with Monte Carlo Simulations*, Preprint (Juli 2000), erscheint in: Proceedings des NATO-Workshops *Multiscale Computation in Chemistry and Biology*, Eilat, Israel, 5.-11. April, 2000, Hrsg. J. Bernholc, K. Binder und A. Brandt; B.A. Berg, A. Billoire und W. Janke, *Spin Glass Overlap Barriers in Three and Four Dimensions*, Phys. Rev. B **61**, 12143 (2000); O. Dillmann, W. Janke und K. Binder, *Finite-Size Scaling in the p-State Mean-Field Potts Glass: A Monte Carlo Investigation*, J. Stat. Phys. **92**, 57 (1998).

[5] S. McKenzie, J. Phys. A **13**, 1007 (1980); und in: *Phase Transitions*, Cargèse Lectures 1980, Hrsg.: M. Lévy, J.-C. Le Guillou und J. Zinn-Justin (Plenum Press, New York, 1982); S. 247; R.R.P. Singh und S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **57**, 245 (1986); Phys. Rev. B **36**, 546 (1987); Phys. Rev. B **36**, 559 (1987); J. Appl. Phys. **61**, 4095 (1987); A.B. Harris und Y. Meir, Phys. Rev. A **36**, 1840,

(1987). K. Binder und J. D. Reger, Adv. Phys. **41**, 547 (1992); G. Schreider und J.D. Reger, J. Phys. A **27**, 1079 (1994); B. Lobe, *Dissertation* (Universität Mainz, 1997), unveröffentlicht.
[6] H. Meyer-Ortmanns und T. Reisz, Int. J. Mod. Phys. A **14**, 947 (1999).
[7] P. Butera und M. Comi, Nucl. Phys. (Proc. Suppl) **4**, 628 (1988).
[8] L. Klein, J. Adler, A. Aharony, A.B. Harris und Y. Meir, Phys. Rev. B **43**, 11249 (1991).

Promotionsprojekte

1. Hochtemperaturreihenentwicklungen und deren Analyse für “Random-Bond” q-Zustand Pottsmodelle in beliebigen Dimensionen.
2. Hochtemperaturreihenentwicklungen und deren Analyse für Pottsspingläser in beliebigen Dimensionen.

Zusammenarbeit

Für dieses Projekt werden sich die bereits sehr gut etablierten Kontakte zu Prof. Dr. Joan Adler (Technion, Haifa, Israel) und Prof. Dr. Amnon Aharony (Tel Aviv University, Israel) als sehr nützlich erweisen und vermutlich auch in direkte Kollaborationen einmünden, die im Rahmen eines gerade für die Jahre 2001-2003 bewilligten Vorhabens der German-Israel-Foundation (GIF) gefördert werden können. Wichtige Hinweise sind auch von Prof. Dr. Kurt Binder (Universität Mainz) zu erwarten, der zusammen mit dem Antragsteller an den Vorarbeiten beteiligt war.

Weitere nützliche Kontakte bestehen zu Prof. Dr. Bertrand Berche (Universität Nancy), Dr. Pierre-Emmanuel Berche (Universität Rouen) und C. Chatelain (z. Zt. noch Universität Nancy) im Rahmen eines DAAD-“Procope”-Projekts in den Jahren 2000 und 2001, in dem die “Random-Bond” Pottsmodelle mit Monte Carlo Computersimulationsmethoden numerisch untersucht werden sollen (s.a. (II B.1.2)).

Im Rahmen des Graduiertenkollegs sollten Diskussionen und eventuell auch eine direkte Kollaboration mit Prof. Dr. U. Behn und Mitarbeitern sehr förderlich sein, die sich seit einiger Zeit mit ähnlichen Fragestellungen im Zusammenhang mit Zufallsfeldern beschäftigen.

Einzuladende Gastwissenschaftler

Thomas Reisz (Bielefeld)	2×2 Wochen
Andrea Pelissetto (Rom, Italien)	2×1 Woche
Pablo Butera (Mailand, Italien)	2×1 Woche
Robert Shrock (New York, USA)	1×4 Wochen
Antony Guttmann (Melbourne, Australien)	1×8 Wochen

Workshops

Teile dieses Projekts sollten in den für 2003 geplanten Workshop “LEILAT03” - 13. Workshop on Lattice Field Theory – Present Results and Future Perspectives, Leipzig, Juni 2003 (Organisatoren: W. Janke und A. Schiller), einfließen.