## 2.1 Teilprojekt C2

Dynamisches Verhalten und Glaseigenschaften von ungeordneten korrelierten Vielteilchensystemen.

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber und Dr. Thomas Vojta
Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)
Institut für Physik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel. (0371) 531-3142, Fax (0371) 531-3143
email: schreiber@physik.tu-chemnitz.de, vojta@physik.tu-chemnitz.de

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Phys. Frank Epperlein
Dipl.-Phys. Svetlana Kilina
Dipl.-Phys. Torsten Wappler

Die für das Projekt bewilligte Stelle (BAT IIa/2) wurde zum 1. Januar 1996 mit Herrn Wappler besetzt. Herr Wappler beschäftigte sich vor allem mit den Damage-Spreading-Simulationen. Er wechselte aber 1997 vor Beendigung seiner Promotion in die Industrie. Die Suche nach einem adäquaten Nachfolger für Herrn Wappler gestaltete sich schwierig. Von August bis Dezember 1997 war die Stelle mit Frau Kilina besetzt, die sich mit der Simulation von Quantensystemen beschäftigt. In diesem Jahr ist sie als wissenschaftliche Hilfskraft mit Abschluß angestellt. Seit 1. März 1998 hat Herr Epperlein die Stelle inne. Er beschäftigt sich im Rahmen seiner Promotion ebenfalls mit der Simulation von Quanten-Vielteilchensystemen.

## 2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Thema des vorliegenden Teilprojektes ist die numerische Untersuchung des dynamischen Verhaltens von ungeordneten Systemen vieler wechselwirkender klassischer oder quantenmechanischer Teilchen. Aufgrund des gleichzeitigen Auftretens von Unordnung und wechselwirkungsbedingten Korrelationen zeigen diese Systeme ein sehr komplexes Verhalten [1]. Im Mittelpunkt des Teilprojektes stehen die folgenden physikalischen Fragen: Inwieweit führt der Wettstreit zwischen Unordnung und langreichweitiger Wechselwirkung in derartigen Systemen zu glasartigem Verhalten? Wie wirken sich Unordnung und Wechselwirkung auf Relaxations- und Transporteigenschaften aus?

Die numerische Simulation von ungeordneten Vielteilchensystemen ist extrem aufwendig, weil einerseits die Größe des zugrunde liegenden Hilbertraumes exponentiell mit der Systemgröße wächst und andererseits die Existenz von Unordnung dazu zwingt, alle physikalischen Observablen über viele Realisierungen der Unordnung zu mitteln, um genügend geringe statistische Schwankungen zu erreichen. Aus diesen Gründen erfordert bereits die Simulation vergleichsweise kleiner Systeme den Einsatz von Höchstleistungsrechnern.

Das vorliegende Teilprojekt verfolgt im wesentlichen drei Ziele. Einerseits sollen numerische Algorithmen entwickelt werden, die eine Simulation von ungeordneten Vielteilchensystemen überhaupt erst ermöglichen. Diese Algorithmen müssen dann effektiv parallelisiert werden, um die Rechenleistung bereitstellen zu können, mit der realistische Systemgrößen simuliert werden können. Das Endziel besteht natürlich in der Beantwortung der oben aufgezählten physikalischen Fragen.

## 2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Zur Modellierung der physikalischen Situation wurden vor allem zwei Modelle benutzt: im Fall klassischer ungeordneter wechselwirkender Teilchen das klassische Coulomb-Glas-Modell [2, 3, 4, 5]. Es beschreibt lokalisierte Elektronen auf einem regelmäßigen Gitter. Die Elektronen wechselwirken über ein Coulomb-Potential, die Unordnung wird durch ein zufälliges äußeres Potential beschrieben. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H_{cl} = \sum_i \phi_i n_i + \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} (n_i - K)(n_j - K) \ ,$$

wobei $n_i$ die Besetzungszahl des Gitterplatzes $i$ ist, $\phi_i$ das Zufallspotential an diesem Platz, $r_{ij}$ der Abstand der Plätze $i$ und $j$ sowie $K$ die Kompensationsladung, die für globale Ladungsneutralität sorgt. Für Test- und Vergleichsrechnungen haben wir auch das Ising-Modell mit zufälligem Magnetfeld benutzt, das sich vom klassischen Coulomb-Glas vor allem dadurch unterscheidet, daß die Wechselwirkung kurzreichweitig und anziehend anstelle langreichweitig und abstoßend ist. Im Falle quantenmechanischer Teilchen wird das klassische Coulomb-Glas-Modell zum Quanten-Coulomb-Glas [6, 7] verallgemeinert:

$$H_{qm} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + H_{cl} \ ,$$

wobei $c_i^\dagger$ und $c_i$ der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator am Platz $i$ ist und $\langle ij \rangle$ alle Paare nächster Nachbarn bezeichnet.

Im Verlaufe des Projektes haben wir im wesentlichen drei verschiedene Zugänge benutzt, um das physikalische Verhalten des klassischen und des Quanten-Coulomb-Glases zu untersuchen. Wir haben einerseits Monte-Carlo-Simulationen des dynamischen Verhaltens mit Hilfe der Damage-Spreading-Methode [8, 9, 10] durchgeführt. Diese Methode erlaubt die Simulation vergleichsweise großer Systeme, ist aber in ihrer Aussagekraft beschränkt. Andererseits haben wir vollständige Spektren niederenergetischer Zustände bestimmt und daraus verschiedene physikalische Größen berechnet. Diese Methode ist numerisch aufwendiger, besonders im quantenmechanischen Fall, gestattet aber im Prinzip eine komplette Beschreibung der Tieftemperatureigenschaften. Die folgenden numerischen Probleme traten auf: Monte-Carlo-Simulationen in hochdimensionalen Räumen mit komplizierter Energielandschaft, Optimierungsverfahren in ebensolchen Räumen, Diagonalisierung großer Matrizen, und zwar sowohl schwach besetzter als auch voll besetzter.

Zu den Monte-Carlo- und Optimierungsverfahren besteht eine enge Zusammenarbeit mit den Teilprojekten C3 und C4 sowie mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden, mit dem wir auch über die physikalischen Eigenschaften klassischer ungeordneter Vielteilchensysteme kollaboriert haben. Zu den Eigenschaften quantenmechanischer Vielteilchensysteme besteht eine enge Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt C1. Außerdem haben wir von den Erfahrungen der Teilprojekte A3 und A4 bei der Lösung großer Gleichungssysteme und der Diagonalisierung großer Matrizen profitiert.

### 2.3.1 Teilaufgabe „Damage-Spreading-Simulationen“

Zur direkten numerischen Simulation des dynamischen Verhaltens von klassischen ungeordneten Vielteilchensystemen wurde die Damage-Spreading-Methode [8, 9, 10] benutzt, eine besondere Variante der Monte-Carlo-Methode. Anstelle eines einzelnen Systems beobachtet man zwei (oder mehrere) Systeme gleichzeitig, die sich unter dem Einfluß des gleichen thermischen Rauschens entwickeln, aber von verschiedenen Anfangsbedingungen gestartet sind. Aus den Unterschieden der Zustände der beiden Systeme kann man Schlüsse auf die dynamischen Eigenschaften ziehen [11, 12]. Die zentrale Observable in derartigen Simulationen ist der Hamming-Abstand $D$ (Schaden), der den Unterschied zwischen den Besetzungszahlen $n_i^{(1)}$ und $n_i^{(2)}$ beider Systeme mißt: $D = \frac{1}{N} \sum_i |n_i^{(1)} - n_i^{(2)}|$ . ($N$ bezeichnet die Zahl der Gitterplätze des Systems.) In Abhängigkeit vom Zeitverlauf von $D$ ergeben sich zwei grundlegende Szenarien. Der Schaden kann ausheilen, $D \to 0$ für $t \to \infty$ („reguläres Verhalten“) oder er kann sich über das System ausbreiten, $D \to const$ für $t \to \infty$ („chaotisches Verhalten“). In Abhängigkeit von den äußeren Parametern kommt es nun zu dynamischen Phasenübergängen zwischen regulärem und chaotischem Verhalten. Diese Phasenübergänge sind einerseits selbst interessante Nichtgleichgewichtsphänomene, andererseits können aus ihrer Analyse Rückschlüsse auf das dynamische Verhalten des studierten Systems selbst getroffen werden. In der Literatur ist die Damage-Spreading-Methode unter anderem erfolgreich dazu verwendet wurden, dynamische Eigenschaften von reinen [13] und ungeordneten [14] Spinsystemen zu untersuchen.

Wir haben einerseits grundlegende Untersuchungen zur Anwendbarkeit dieser Methode auf Vielteilchensysteme mit Zufallspotential durchgeführt. Andererseits haben wir eine parallele Implementation des Damage-Spreading-Verfahrens für das klassische Coulomb-Glas entwickelt und erste Nutzrechnungen mit diesem Verfahren für den zweidimensionalen Fall durchgeführt.

### 2.3.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

Die Kenntnis eines vollständigen Satzes niederenergetischer Zustände eines physikalischen Systems erlaubt im Prinzip die Bestimmung aller seiner Tieftemperatureigenschaften. Im Falle von Systemen klassischer Teilchen (wie dem klassischen Coulomb-Glas) sind die Eigenzustände selbst von vornherein bekannt, weil der Hamiltonoperator in der Basis der Platzzustände diagonal ist. Das Problem besteht im Finden der *nieder*energetischsten unter der sehr großen Zahl aller Zustände. Übliche Methoden zur Lösung dieses kombinatorischen Optimierungsproblems waren bisher Renormierungsmethoden [15] und Monte-Carlo-Verfahren [16].

In Zusammenarbeit mit den Teilprojekten C3 und C4 und mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden wurden effiziente Algorithmen (thermal cycling) entwickelt, um kombinatorische Optimierungsprobleme zu lösen. Unsere Algorithmen verbinden die Vorteile von simuliertem Tempern mit denen von schnellen lokalen Suchverfahren. Im Rahmen des vorliegenden Teilprojektes wurden die resultierenden Methoden benutzt, um die niederenergetischen Anregungen des klassischen Coulomb-Glases für vergleichsweise große Systeme (von bis zu 512 Teilchen) zu bestimmen. Als eine erste physikalische Anwendung haben wir die spezifische Wärme des klassischen Coulomb-Glases und insbesondere ihre nichtergodischen Eigenschaften detailliert untersucht, um Hinweise auf glasartiges Verhalten [17] zu finden, und um die Frage zu beantworten, ob dieses glasartige Verhalten ein Gleichgewichtsphänomen [18] oder ein dynamisches Phänomen [19] ist.

### 2.3.3 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände von Quantensystemen“

Die Bestimmung der niederenergetischen Zustände ist in einem Quanten-Vielteilchensystem eine viel schwierigere Aufgabe als in einem klassischen Vielteilchensystem, da die Eigenzustände selbst unbekannt sind. Sie müssen vielmehr erst durch eine Diagonalisierung des Hamilton-Operators bestimmt werden. Da die Größe des zugrunde liegenden Hilbertraumes exponentiell mit der Zahl der Teilchen wächst, und die Matrizen nicht notwendig sehr schwach besetzt sind, können die üblichen Diagonalisierungsverfahren nur für extrem kleine Systeme eingesetzt werden. (Für nur 64 Gitterplätze – das sinnvolle Minimum bei der Simulation eines dreidimensionalen Systems – ist die Dimension des Hilbertraumes bereits $2^{64} \approx 2 * 10^{19}$.)

Wir haben deshalb neben Nutzrechnungen auf der Basis exakter Diagonalisierungen eine alternative Methode zur Lösung des Eigenwertproblems entwickelt, die in einem geeignet bestimmten Unterraum des Hilbertraumes arbeitet und die niederenergetischen Eigenzustände in hoher Genauigkeit liefert. Die Grundidee der Methode, nämlich eine Diagonalisierung in einem geeignet gewählten Unterraum des Hilbertraumes, ist ähnlich derer in Referenzen [6] und [7]; im Gegensatz zu diesen Verfahren arbeitet unsere Methode aber nicht nur im Grenzfall sehr starker Lokalisierung sondern im gesamten Parameterbereich. Als erste Anwendungen haben wir bisher die Zustandsdichte und die Lokalisierungseigenschaften von Einteilchen-Anregungen des Quanten-Coulomb-Glases untersucht.

## Literaturverzeichnis

[1] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985); D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

[2] A. L. Efros and B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, L49 (1975).

[3] A. L. Efros, J. Phys. C **9**, 2021 (1976).

[4] M. Pollak und M. Ortuño, in A. L. Efros und M. Pollak (Hrsg.): *Electron-Electron Interaction in Disordered Solids*, North-Holland, Amsterdam (1985), p287

[5] A. L. Efros und B. I. Shklovskii, in A. L. Efros und M. Pollak (Hrsg.): *Electron-Electron Interaction in Disordered Solids*, North-Holland, Amsterdam (1985), p409

[6] A. L. Efros, Sol. State Commun. **96**, 183 (1995).

[7] J. Talamantes, M. Pollak, and L. Elam, Europhys. Lett. **35**, 511 (1996).

[8] A. Kauffman, J. Theor. Biol. **22**, 437 (1969).

[9] B. Derrida and Y. Pomeau, Europhys. Lett. **1**, 45 (1986); B. Derrida and G. Weisbuch, Europhys. Lett. **4**, 657 (1987).

[10] H.E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertesz, and H.J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **59**, 2326 (1987).

[11] A. Coniglio, L. de Arcangelis, H.J. Herrmann, and N. Jan, Europhys. Lett. **8**, 315 (1989).

[12] S.C. Glotzer, P.H. Poole, and N. Jan, J. Stat. Phys. **68**, 895 (1992).

[13] G. Le Caër, Physica A **159**, 329 (1989); P. Grassberger, J. Phys. A **28**, L67 (1995); Physica A **214**, 547 (1995).

[14] see, e.g. B. Derrida, Phys. Rep. **184**, 207 (1989); I.A. Campbell, Europhys. Lett. **21**, 959 (1993); F.A. Tamarit and E.M. Fleury Curado, J. Phys. A **27**, 671 (1994).

[15] M. Mochena und M. Pollak, Phys. Rev. Lett. **67**, 109 (1991).

[16] M. Schreiber und K. Tenelsen, Europhys. Lett. **21**, 697 (1993).

[17] siehe z.B. M. Pollak, Phil. Mag. B**65**, 657 (1992) für mögliche „Glas-Szenarien“ im Coulomb-Glas.

[18] E. R. Grannan und C. C. Yu, Phys. Rev. Lett. **71**, 3335 (1993).

[19] J. H. Davies, P. A. Lee und T. M. Rice, Phys. Rev. B **29**, 4260 (1984).

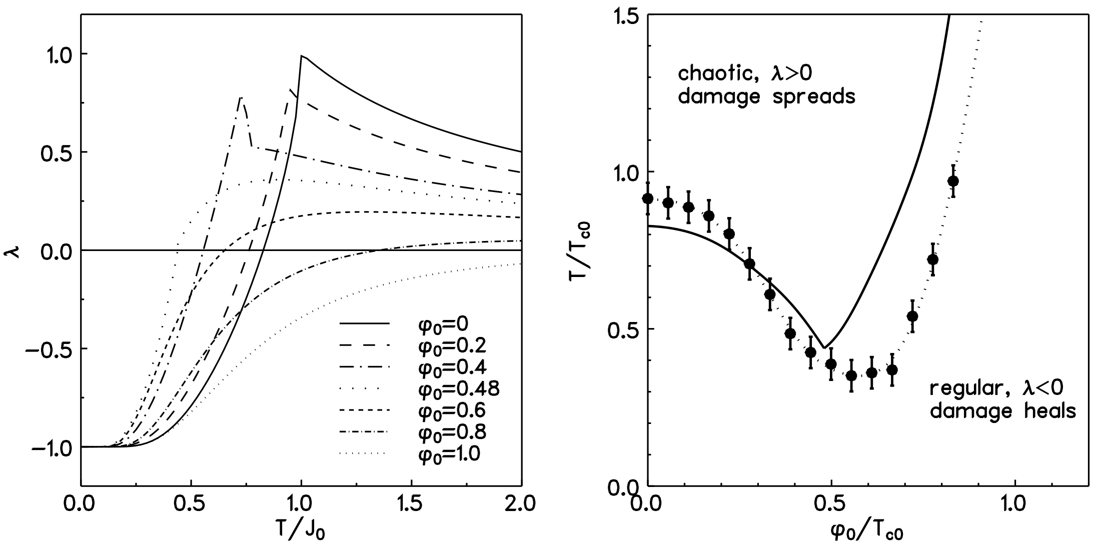



Abbildung 2.1: (a) Lyapunov-Exponenten $\lambda$ als Function der Temperatur $T$ für das Glauber-Ising-Modell mit Zufallsfeld der Stärke $\phi_0$ (aus [V97c]), (b) resultierendes Mean-Field-Phasendiagramm im Vergleich mit aktuellen numerischen Simualtionen (•).

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Teilaufgabe „Damage-Spreading-Simulationen"

Wir haben damit begonnen, die theoretischen Grundlagen für die Anwendung der Damage-Spreading-Methode auf wechselwirkende Vielteilchensysteme mit Zufallspotential zu schaffen. Dazu wurde ein allgemeiner Zugang auf Basis einer Mastergleichung entwickelt. Als Testfall wurden zunächst kinetische Ising-Modelle mit einfachen dynamischen Algorithmen (Glauber- und Wärmebaddynamik) untersucht [V97a, V97b]. Für diese Systeme kann die Mastergleichung in Mean-Field-Näherung gelöst werden. Die so erhaltenen Resultate befinden sich in befriedigender Übereinstimmung mit den Ergebnissen von numerischen Simulationen.

In einem nächsten Schritt haben wir dann den Einfluß von Unordnung auf Damage-Spreading in diesen einfachen Ising-Modellen studiert [V97c]. Es zeigt sich bereits hier, daß die Unordnung über zumindest zwei verschiedene Mechanismen Einfluß auf das Damage-Spreading ausübt, die entgegengesetzte Auswirkungen haben. Einerseits verursacht ein Zufallspotential eine bevorzugte Besetzung bestimmter Plätze, und zwar der gleichen in beiden Systemen, was den Hamming-Abstand verringert. Andererseits veringert ein Zufallspotential eine eventuell vorhandene langreichweitige Ordnung. Dies führt zur Vergrößerung des Hamming-Abstandes. Insgesamt ist das resultierende physikalische Verhalten sehr komplex. In Abb. 2.1 zeigen wir einige Ergebnisse am Beispiel des Glauber-Ising-Modells mit Zufallsfeld. Der Lyapunov-Exponent der Schadensausbreitung ist für kleine Temperaturen negativ und steigt mit der Temperatur an. In Abhängigkeit von der Stärke des Zufallsfeldes besitzt er entweder einen Nulldurchgang (der den Phasenübergang zu einer chaotischen Phase markiert) oder er bleibt negativ für alle Temperaturen. Aus der Abhängigkeit der Übergangstemperatur von der Zufallsfeldstärke gewinnt man das Phasediagramm.

Für eine Ausdehnung des Mastergleichungszugangs auf ungeordnete wechselwirkende Elektronensysteme sind vor allem realistischere dynamische Algorithmen nötig, die das thermisch aktivierte Hüpfen der Elektronen zwischen Nachbarplätzen beschreiben. Im Moment untersuchen wir deshalb Damage-Spreading in Ising-Modellen mit Spin-Austausch-Dynamik. Diese Dynamik ist das Spin-Äquivalent des thermisch aktivierten Hüpfens von Elektronen. Erste Ergebnisse [V98a] zeigen, daß diese Dynamik die Schadensausbreitung stark begünstigt.

Parallel zu diesen Arbeiten zu den theoretischen Grundlagen haben wir eine parallele Implementation des Damage-Spreading-Verfahrens für wechselwirkende Elektronen in einem Zufallspotential entwickelt. Da sich beim Damage-Spreading-Verfahren mehrere identische Systeme parallel entwickeln, ist dieses Verfahren vergleichsweise gut für eine Parallelisierung geeignet, wenn man sich darauf beschränkt, jedes einzelne System auf einem Prozessor zu simulieren. Auf einer Maschine mit $N$ Prozessoren können so gleichzeitig $N(N-1)/2$ Paare von Systemen simuliert werden, und für genügend große $N$ (etwa ab $N \geq 16$ für unser Problem) erhält man bereits in einem einzelnen Lauf ausreichend niedrige statistische Schwankungen des Hamming-Abstandes. Ein weiterer Prozessor übernimmt in unserer Implementation die Equilibrierung des Systems für die jeweils nächste zu simulierende Temperatur. Allerdings muß man bereits bei dieser vergleichsweise einfachen Parallelisierung dem Kommunikationsbedarf große Aufmerksamkeit schenken, weil im Prinzip nach jedem Zeitschritt der Zustand jedes Systems an alle anderen Systeme übertragen werden muß, um den Hamming-Abstand zu berechnen. Der Kommunikationsaufwand läßt sich aber gut dadurch verringern, daß man nur die Änderungen der Konfigurationen innerhalb eines Zeitschrittes überträgt. Auf dieser Basis haben wir eine parallele Implementation des Damage-Spreading-Verfahrens entwickelt, die eine nahezu optimale Lastverteilung erreicht und verhältnismäßig wenig kommuniziert. Das resultierende Programm, das wegen der geringen Kommunikation auch gut für einen Einsatz auf einem Workstation Cluster geeignet scheint, haben wir sowohl für Testrechnungen auf unserer Vierprozessor-Maschine als auch für Produktionsläufe auf dem Universitätsparallelrechner benutzt. Eine im Antrag diskutierte weitergehende Parallelisierung, bei der auch die Zeitentwicklung eines Systems auf mehrere Prozessoren verteilt wird, erwies sich jedoch als nicht vorteilhaft. Einerseits steigt der Kommunikationsaufwand wegen der langen Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung extrem stark an, andererseits können nur noch wenige Systeme parallel simuliert werden, so daß dann zur Erzielung genügend geringer statistischer Schwankungen entweder eine längere Rechenzeit oder eine wesentlich größere Zahl von Prozessoren nötig wird. Insgesamt ist deshalb eine solche stärkere Parallelisierung für unser Problem (zumindest im Falle des Parallelrechners der Universität) weniger effizient.

Die Resultate dieser Rechnungen sind im Detail in [WVS97, D96wvs, D97wsv] dargestellt. Das wichtigste Ergebnis ist dabei, daß das klassische Coulomb-Glas einen dynamischen Phasenübergang von einer eingefrorenen zu einer chaotischen Phase besitzt. Allerdings verschiebt die Unordnung die Übergangstemperatur um

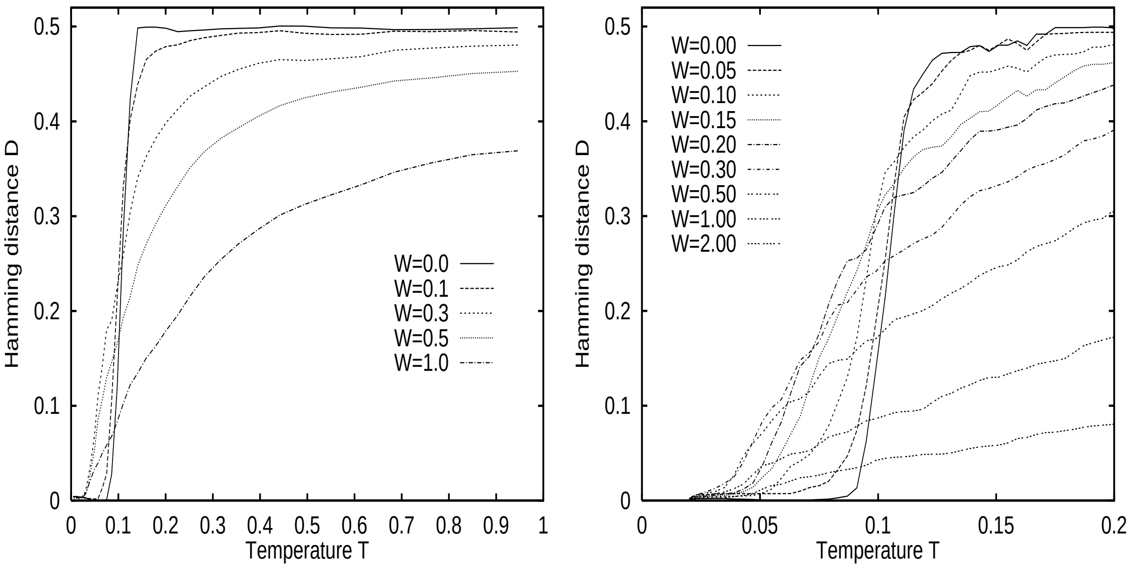



Abbildung 2.2: (a) Abhängigkeit des mittleren Hamming-Abstandes $D$ des klassischen Coulomb-Glases von Temperatur $T$ und Stärke $W$ des Zufallspotentials, (b) Region des dynamischen Phasenüberganges (aus [WVS97]).

mehr als einen Faktor zwei nach unten (siehe Abb. 2.2). Die exakte Bestimmung der Übergangstemperatur sowie der Eigenschaften des dynamischen Phasenüberganges wird im Moment noch durch starke Finite-Size-Effekte behindert, die durch die lange Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung hervorgerufen werden. Leider hat Herr Wappler, der diese Teilaufgabe bearbeitet hat, seine Promotion im Februar 1997 abgebrochen, um in die Industrie zu wechseln. Seit Dr. Vojta von seinem Auslandsaufenthalt an der University of Oregon zurückgekehrt ist (Ende 1997), haben wir einerseits die Arbeit an dem parallelen Damage-Spreading-Algorithmus wieder aufgenommen und andererseits die Suche nach einem Nachfolger für Herrn Wappler intensiviert.

### 2.4.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

In Zusammenarbeit mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden und den Teilprojekten C3 und C4 haben wir einen stark verbesserten kombinatorischen Optimierungsalgorithmus entwickelt, das „thermal cycling“, der auf einer Kombination von wiederholtem simuliertem Tempern [D96mhs], schnellen lokalen Suchmethoden zur Vervollständigung des Spektrums und Renormierungsideen [D97ms] beruht. Um die Methode zu testen, haben wir sie zunächst auf das populäre Handelsreisenden-Problem angewendet, bei dem der kürzeste Rundkurs durch eine Menge vorgegebener Städte gefunden werden muß. Dabei zeigt sich, daß unsere Methode sehr flexibel eingesetzt werden kann. Beschränkt man sich auf relative einfache Regeln zum Verändern des Zustandes während der lokalen Suche, dann ist der Programmieraufwand nicht größer als für das übliche simulierte Tempern. Trotzdem ist unsere Methode für eine vorgegebene Genauigkeit um

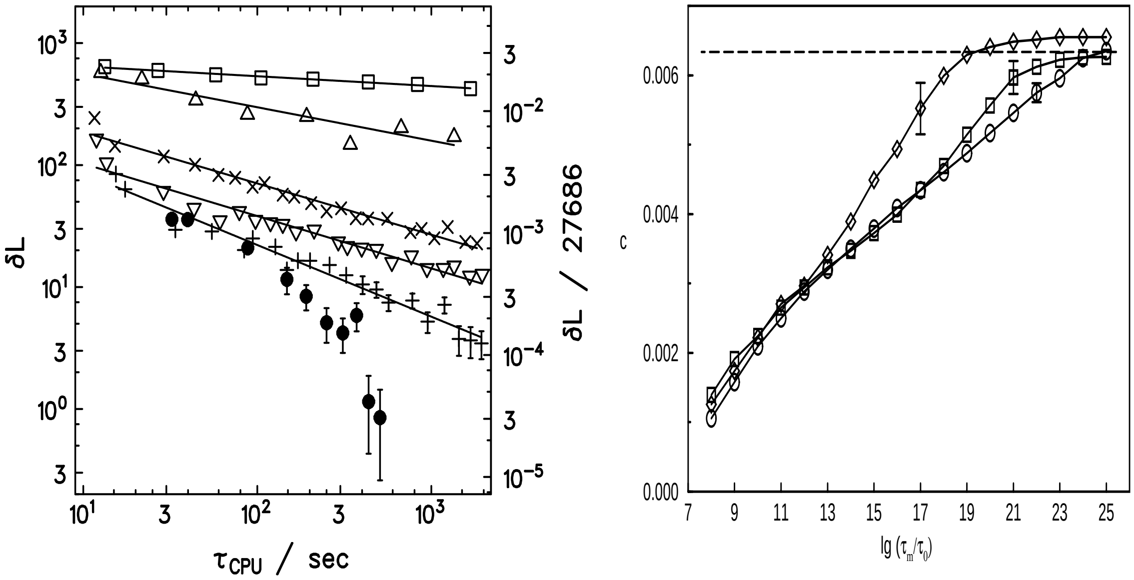



Abbildung 2.3: (a) Abweichung der gefundenen Länge der Rundreise vom optimalen Ergebnis (L=27686) als Funktion der Rechenzeit. Die beiden oberen Kurven zeigen Resultate wiederholten Abkühlens bis in einen metastabilen Zustand (□) bzw. simulierten Temperns (△). Die restlichen Kurven zeigen Ergebnisse von Varianten unseres Algorithmus mit von oben nach unten zunehmender Komplexität der lokalen Suche (aus [MND97]); (b) Abhängigkeit der spezifischen Wärme $c$ des klassischen Coulomb-Glases von der Meßzeit $\tau_m$ für Systeme mit 64 (◇), 216 (□) und 512 (○) Plätzen (aus [DMO98]).

mehrere Größenordnungen schneller. In seiner komplexesten Form (die allerdings beachtlichen Programmieraufwand erfordert) ist unser Algorithmus für kleinere Probleme (weniger als 1000 Städte) etwa genauso schnell wie moderne genetische Optimierungsalgorithmen, für größere Probleme aber deutlich schneller. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind in der Publikation [MND97] zusammengefaßt (siehe Abb. 2.3a). Der beschriebene Algorithmus läßt sich gut parallelisieren indem man, ausgehend von einem niederenergetischen Zustand, mehrere Aufheiz- und Abkühlprozesse parallel durchführt. Dies erhöht die (normalerweise vor allem im Endstadium der Simulation sehr kleine) Wahrscheinlichkeit Zustände niedrigerer Energie zu finden und kann so die Rechenzeit stark verkürzen. Eine erste Abschätzung besagt, daß sich dieses Verfahren gut für Prozessorzahlen bis ca. 8 bis 16 eignet. Es ist damit auch prädestiniert für den Einsatz auf Workstation-Clustern.

Als eine erste Anwendung dieses Optimierungsverfahrens auf wechselwirkende ungeordnete Vielteilchensysteme haben wir die spezifische Wärme des klassischen Coulomb-Glases untersucht. Dabei wird zunächst ein vollständiger Satz niederenergetischer Zustände ermittelt. Die spezifische Wärme kann dann leicht aus den statistischen Schwankungen der Energie ermittelt werden. Um nichtergodische Effekte im Coulomb-Glas festzustellen, haben wir insbesondere die Abhängigkeit der spezifischen Wärme von der Dauer eines Experiments studiert. Dazu faßt man alle diejenigen Zustände zu Clustern zusammen, die innerhalb der Meßzeit $\tau_m$ equilibrieren, und bestimmt die spezifische Wärme dieser Cluster. Mit Hilfe dieses Ver-

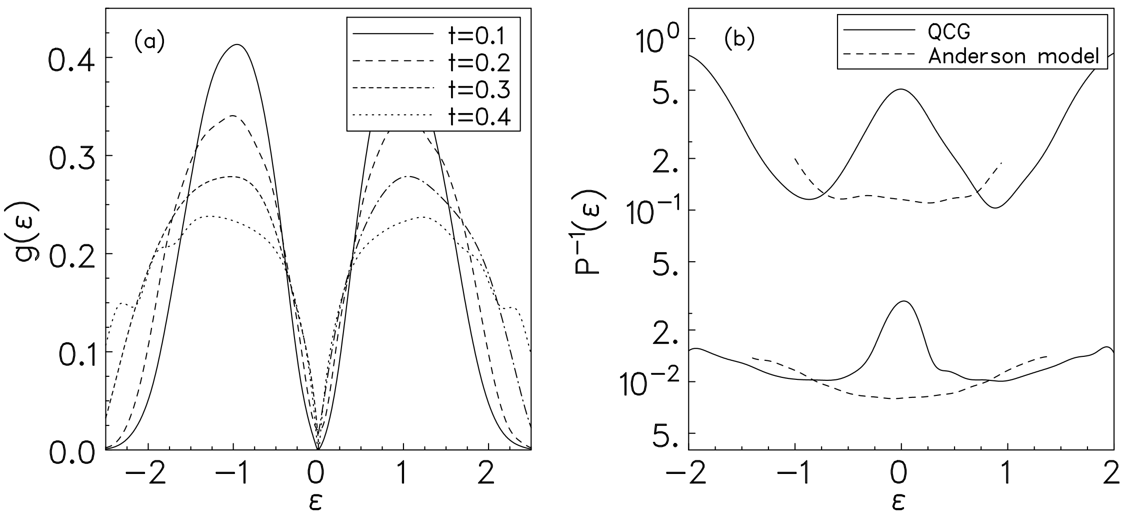
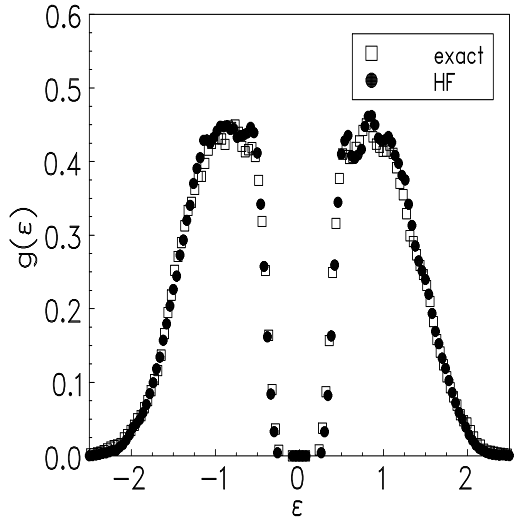



Abbildung 2.4: (a)Einteilchen-Zustandsdichte $g$ des Quanten-Coulomb-Glases als Funktion der Energie $\epsilon$ für verschiedene Werte $t$ der kinetischen Energie, (b) inverse Partizipationszahlen $P^{-1}$ des Quanten-Coulomb-Glases und des Anderson-Modells der Lokalisierung (aus [ESV97]).

fahrens finden wir ausgeprägte Nichtergodizitäten im klassischen Coulomb-Glas (siehe Abb. 2.3b). In Abhängigkeit von der Meßzeit variert die spezifische Wärme um mehr als einen Faktor drei, und die Relaxationszeiten überspannen einen Bereich von mehr als 16 Größenordnungen (für ein System von nur 512 Gitterplätzen). Dies ist analog zu den Zeitbereichen die bei direkter Analyse der Relaxationspfade gefunden werden [STV96, A96v, Z96msev]. Diese Nichtergodizitäten weisen auf einen dynamischen Ursprung des glasartigen Verhaltens hin. Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse findet sich in den Publikationen [H97dmops, DMO98].

### 2.4.3 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände von Quantensystemen“

Wir haben verschiedene numerische Verfahren entwickelt, um das niederenergetische Spektrum und die zugehörigen Eigenzustände von Quanten-Vielteilchensystemen zumindest näherungsweise zu bestimmen, und diese Methoden am Beispiel des Quanten-Coulomb-Glases getestet. Um einen groben Überblick über das physikalische Verhalten des Systems zu bekommen, haben wir zunächst eine Hartree-Fock-Methode benutzt. Dabei wird der Wechselwirkungsanteil des Hamilton-Operators mittels einer Hartree-Fock-Näherung entkoppelt und das verbleibende ungeordnete Einteilchenproblem in einer Selbstkonsistenzschleife numerisch exakt diagonalisiert. Dabei haben wir gefunden, daß die Coulomb-Lücke in der Einteilchen-Zustandsdichte, die durch die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung hervorgerufen wird, in der gesamten isolierenden Phase existiert. Dies führt wiederum dazu, daß die Einteilchen-Anregungen im Quanten-Coulomb-Glas wesentlich stärker lokalisiert sind als im Falle nichtwechselwirkender Elektronen (siehe Abb. 2.4). Die



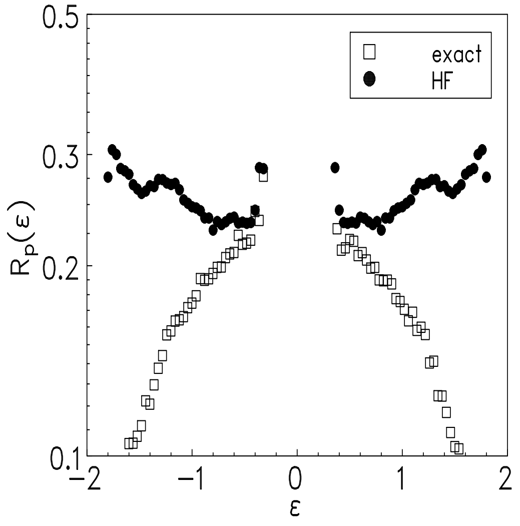




Abbildung 2.5: Vergleich zwischen Hartree-Fock-Näherung und exakter Diagonalisierung: (a) Einteilchen-Zustandsdichte $g(\epsilon)$, (b) Rückkehrwahrscheinlichkeit $R_p(\epsilon)$ (aus [ESV98]).

Ergebnisse dieser Arbeiten sind in den Publikationen [D97esv, ESV97, Q96ves, S96sev, W96ves] ausführlich dargestellt.

Um über die Hartree-Fock-Näherung hinauszugehen, und insbesondere um ihren Gültigkeitsbereich zu bestimmen, haben wir danach einen systematischen Vergleich mit den Resultaten von exakten Diagonalisierungen kleiner Systeme durchgeführt. Da bei der exakten Diagonalisierung, wie oben erläutert, bereits bei sehr kleinen Systemen große Matrizen auftreten, konnten wir hier die Erfahrungen der Teilprojekte A3, A4 und C1 bei der parallelen Diagonalisierung großer Matrizen und die dort entwickelten Programme nutzbringend einsetzen. Wir haben damit gefunden, daß die Hartree-Fock-Näherung das Verhalten der Einteilchen-Zustandsdichte im gesamten Parameterraum gut beschreibt, während die Lokalisierungseigenschaften nur nahe der Fermi-Energie korrekt wiedergegeben werden (siehe Abb. 2.5). Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind in den Publikationen [D98esv, D98kvs, ESV98, H97esv, H97v, W98esv] ausführlich dargestellt.

Aufgrund der exponentiellen Zunahme der Dimension des Hilbertraunes mit der Zahl der Teilchen können aber Nutzrechnungen mit realistischen Teilchenzahlen nicht mittels exakter Diagonalisierung des Hamiltonoperators durchgeführt werden. Wir haben deshalb eine effektive Methode zur Bestimmung der niederenergetischen Eigenzustände entwickelt, die an die spezielle Struktur des Vielteilchen-Hamiltonoperators des Quanten-Coulomb-Glases angepaßt ist, sich aber leicht auf andere Vielteilchensysteme verallgemeinern läßt. Die Grundidee besteht darin, den Hamiltonoperator nur in einem geeignet bestimmten Unterraum des Hilbertraumes zu diagonalisieren. Dieser Unterraum besteht aus den niederenergetischsten Zuständen der Hartree-Fock-Näherung des Hamiltonoperators. Erste Testrechnungen und Vergleiche mit exakter Diagonalisierung zeigen, daß bei einem System von 8 Teilchen auf 16 Gitterplätzen bereits ein Unterraum von nur 50 (von 12870)

Zuständen ausreicht, um den Grundzustand mit mehr als 99% Genauigkeit zu finden [A98v, D98esv].

Neben diesen Arbeiten zu den Eigenschaften eines Vielelektronensystems haben wir in Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt C1 auch die Zustände eines Systems aus zwei wechselwirkenden Elektronen untersucht [RS97, VRS98, W98rsv]. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind im Bericht des Teilprojektes C1 unter Teilaufgabe 3.3 dargestellt.

## Eigene Publikationen in Berichtszeitraum

### Referierte Publikationen

[DMO98] A. Diaz-Sanchez, A. Möbius, M. Ortuno, A. Perez-Garrido und M. Schreiber: *Coulomb-glass simulations: Creation of a set of low-energy many-particle states, non-ergodic effects in the specific heat*, phys. stat. sol. (b) 205, 17 (1998).

[ESV97] F. Epperlein, M. Schreiber und Th. Vojta: *Quantum Coulomb glass within the Hartree-Fock approximation*, Phys. Rev. B 56, 5890 (1997).

[ESV98] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Quantum Coulomb glass: Hartree-Fock approximation versus exact diagonalization*, phys. stat. sol. (b) 205, 233 (1998).

[MND97] A. Möbius, A. Neklioudov, A. Diaz-Sanchez, K.H. Hoffmann, A. Fachat und M. Schreiber: *Optimization by thermal cycling*, Phys. Rev. Lett. 79, 4297 (1997).

[RS97] R. A. Römer und M. Schreiber: *No enhancement of localization length for two interacting particles in a random potential*, Phys. Rev. Lett. **78**, 4890 (1997).

[STV96] M. Schreiber, K. Tenelsen und T. Vojta: *Density of states, relaxation dynamics, and hopping conductivity of disordered many-electron systems with long-range correlations*, J. Lumin. 66/67, 521 (1996).

[V97a] T. Vojta: *Damage spreading and dynamic stability of kinetic Ising models*, J. Phys. A 30, L7 (1997).

[V97b] T. Vojta: *Chaotic behavior and damage spreading in the Glauber Ising model – a master equation approach*, Phys. Rev. E 55, 5157 (1997).

[V97c] T. Vojta: *Damage spreading in random field systems*, J. Phys. A 30, L643 (1997).

[VES98] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Quantum Coulomb glass: Anderson localization in an interacting system*, phys. stat. sol. (b) 205, 53 (1998).

[WVS97] T. Wappler, T. Vojta und M. Schreiber: *Monte-Carlo simulations of the dynamical behavior of the Coulomb glass*, Phys. Rev. B 55, 6272 (1997).

### Eingereichte Manuskripte

[V98a] T. Vojta: *In an Ising model with spin-exchange dynamics damage always spreads*, cond-mat/9803053, eingereicht bei J. Phys. A.

[VRS98] T. Vojta, R. A. Römer und M. Schreiber: *Two interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, cond-mat/9702241, eingereicht bei Phys. Rev. B.

### Konferenzbeiträge

[A96v] T. Vojta: *Numerical investigations of the Coulomb glass*, Seminarkolleg der A. von Humboldt-Stiftung *Localization in classical and quantum systems*, Chemnitz (1996).

[A98v] T. Vojta: *Numerical simulation of the quantum Coulomb glass*, Seminarkolleg der A. von Humboldt-Stiftung *Localization and Electronic States in Low-dimensional Condensed Matter Systems*, Papstdorf (1998).

[A98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *A new method for simulating disordered interacting electrons*, Seminarkolleg der A. von Humboldt-Stiftung *Localization and Electronic States in Low-dimensional Condensed Matter Systems*, Gohrisch (1998).

[D96mhs] A. Möbius, K. H. Hoffmann und M. Schreiber: *Simulated annealing mit Archiv*, 60. Physikertagung der DPG, Regensburg (1996).

[D96wvs] T. Wappler, T. Vojta und M. Schreiber: *Monte-Carlo-Simulation des dynamischen Verhaltens im Coulomb-Glas*, 60. Physikertagung der DPG, Regensburg (1996).

[D97esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Quanten-Coulomb-Glas im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung – Zustandsdichte und Lokalisierungseigenschaften*, 61. Physikertagung der DPG, Münster (1997).

[D97ms] A. Möbius und M. Schreiber, *Renormierungsverfahren für kombinatorische Optimierung*, 61. Physikertagung der DPG, Münster (1997).

[D97wsv] T. Wappler, M. Schreiber und T. Vojta: *Damage spreading in ungeordneten Systemen mit langreichweitiger Wechselwirkung*, 61. Physikertagung der DPG, Münster (1997).

[D98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Metall-Isolator-Übergang von ungeordneten wechselwirkenden Elektronen: numerische Simulationen*, 62. Physikertagung der DPG, Regensburg (1998).

[D98kvs] S. Kilina, T. Vojta und M. Schreiber: *Quantum Coulomb glass: the role of spin*, 62. Physikertagung der DPG, Regensburg (1998).

[D98rsv] R. A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Zwei wechselwirkende Teilchen in einem eindimensionalen Zufallspotential: Delokalisierung durch Wechselwirkung?*, 62. Physikertagung der DPG, Regensburg (1998).

[G97s] M. Schreiber: *Das Coulomb-Glas: Elektronen in ungeordneten Systemen mit langreichweitiger Wechselwirkung*, Herbstschule des Graduiertenkollegs „Dünne Schichten und nichtkristalline Materialien“, Hohenstein-Ernstthal (1997).

[H97dmops] A. Diaz-Sanchez, A. Möbius, M. Ortuno, A. Perez-Garrido und M. Schreiber: *Coulomb-glass simulations: Creation of a set of low-energy many-particle states, non-ergodic effects in the specific heat*, 7th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Rackeve (1997).

[H97esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Anderson localization and Coulomb interactions*, 7th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Rackeve (1997).

[H97rsv] R. A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *No enhancement of the localization length for two onsite interacting particles in a random potential*, 7th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Rackeve (1997).

[H97v] T. Vojta: *Quantum Coulomb glass*, 7th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Rackeve (1997).

[Q96ves] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Enhancement of Anderson localization due to long-range interactions*, Conference on Quantum Coherence in Strongly Correlated Fermion Systems, Pisa (1996).

[S96sev] M. Schreiber, F. Epperlein und T. Vojta: *Density of states and localization properties of disordered quantum systems with long-range interactions*, International Conference on the Physics of Semiconductors, Berlin (1996).

[W96ves] T. Vojta, F. Epperlein, M. Schreiber: *Density of states for disordered long-range correlated quantum systems*, 9th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (1996).

[W98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Interactions vs. disorder: localization in disordered correlated electron systems*, 10th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (1998).

[W98rsv] R. A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Two interacting particles in a random potential: Delocalization due to interaction?*, 10th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (1998).

[Z96msev] A. Möbius, M. Schreiber, F. Epperlein und T. Vojta: *Korrelation im Coulombglas – Einsichten aus Computerexperimenten*, 5. Zweijahrestreffen *Amorphe Halbleiter*, Eitorf (1996).

## 2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Verlauf der ersten Förderungsperiode des Sonderforschungsbereiches haben wir verschiedene Algorithmen zur numerischen Simulation von klassischen ungeordneten Vielteilchensystemen entwickelt und teilweise bereits arbeitsfähige parallele Implementierungen geschaffen, die für Produktionsläufe benutzt werden konnten.

Dadurch konnten wir inbesondere in der Frage der Glaseigenschaften von ungeordneten wechselwirkenden Elektronensystemen bereits wichtige Erkenntnisse erzielen. Für die Damage-Spreading-Methode sind in Zukunft vor allem Feinabstimmungen des Algorithmus nötig. Außerdem sollen umfangreiche Nutzrechnungen durchgeführt werden. Eine zentrale Aufgabe für die Simulationen klassischer Teilchen wird die Entwicklung einer leistungsfähigen parallelen Implementation unseres Optimierungsalgorithmus sein, um auf dessen Basis Nutzrechnungen für genügend große Systeme durchführen zu können.

Bei der Simulation von Quantensystemen steht die Algorithmenentwicklung noch am Anfang. In Zukunft muß unser Verfahren zur Bestimmung der niederenergetischen Zustände noch ausführlich getestet werden, danach ist die Entwicklung einer parallelen Version geplant, die dann für Produktionsläufe eingesetzt werden soll.