

## 2.1 Teilprojekt C2

Dynamisches Verhalten und Glaseigenschaften von ungeordneten korrelierten Vielteilchensystemen.

### 2.1.1 Antragsteller

Dr. Thomas Vojta

05.03.1966

Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)

Institut für Physik

Technische Universität Chemnitz

09107 Chemnitz

Tel.: (0371) 531-3142

Fax: (0371) 531-3143

email: vojta@physik.tu-chemnitz.de

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Thomas Vojta

Prof. Dr. Michael Schreiber

Dr. Smaine Behkechi

Dr. Frank Epperlein

Dipl.-Phys. Svetlana Kilina

Sergej Uldanov

Die für das Projekt bewilligte Stelle (BAT IIa/2) war seit März 1998 mit Frank Epperlein besetzt. Herr Epperlein hat im Juli 1999 am Institut für Physik promoviert und war danach noch bis Oktober 1999 im SFB beschäftigt. Herr Epperlein hat sich vor allem mit der Simulation der Leitfähigkeit in ungeordneten Elektronensystemen beschäftigt. Nach dem Weggang von Herrn Epperlein hat Frau Kilina seine Arbeiten fortgeführt und daran gearbeitet, Spinfreiheitsgrade einzubeziehen. Sie hat die TU Chemnitz Ende 1999 aus familiären Gründen verlassen. An den Arbeiten zum Transport in ungeordneten Elektronensystemen war außerdem noch ein Austauschstudent, Sergej Uldanov, beteiligt. Seit Juli 2000 arbeitet Herr Dr. Behkechi am vorliegenden Teilprojekt mit. Er beschäftigt sich vor allem mit magnetischen Phänomenen in ungeordneten Vielteilchensystemen.

## 2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Das vorliegende Teilprojekt beschäftigt sich mit der numerischen Untersuchung 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. Die numerische Simulation von ungeordneten Vielteilchensystemen ist

sehr 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.

Im Berichtszeitraum stand die Untersuchung der Transporteigenschaften ungeordneter korrelierter Elektronen im Mittelpunkt. Daneben wurden auch thermodynamische Größen und ihr Ergodizitätsverhalten studiert. Weitere Arbeiten haben sich mit Quanten- und Nichtgleichgewichts-Phasenübergängen in solchen Systemen beschäftigt. Außerdem haben wir die in der ersten Förderperiode entwickelten Methoden zur Simulation von Quantensystemen auch auf korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen angewandt.

## 2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Die Arbeiten zu ungeordneten korrelierten Elektronen beruhen auf einer mikroskopischen Modellierung des Elektronensystems. Das zentrale Modell ist das Quanten-Coulomb-Glas [1, 2, 3]. Es beschreibt Elektronen auf einem regelmäßigen Gitter, die Unordnung wird durch ein zufälliges äußeres Potential modelliert. Die elektronische Wechselwirkung hat die Form eines Coulomb-Potentials, die Langreichweitigkeit ist dabei in der lokalisierten Phase von zentraler Bedeutung. Der vollständige Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H_{qm} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{i\sigma} \phi_i n_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} \frac{1}{r_{ij}} (n_{i\sigma} - K)(n_{j\sigma} - K) + U_H \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

wobei  $c_{i\sigma}^\dagger$  und  $c_{i\sigma}$  der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator eines Elektrons am Platz  $i$  mit Spin  $\sigma$  ist und  $\langle ij \rangle$  alle Paare nächster Nachbarn bezeichnet.  $n_{i\sigma}$  ist die Besetzungszahl des Spinzustandes  $\sigma$  am Gitterplatz  $i$ ,  $\phi_i$  das Zufallspotential an diesem Platz,  $r_{ij}$  der Abstand der Plätze  $i$  und  $j$  sowie  $K$  die Kompensationsladung, die für globale Ladungsneutralität sorgt. Im Limes starker Lokalisierung der Elektronen kann der kinetische Term im Quanten-Coulomb-Glas vernachlässigt werden. Damit werden aber auch die Spinfreiheitsgrade irrelevant. Das resultierende Modell ist das klassische Coulomb-Glas [5, 6, 7, 8],

$$H_{cl} = \sum_i \phi_i n_i + \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} (n_i - K)(n_j - K), \quad (2.2)$$

das bereits seit langem zur Untersuchung der isolierenden Phase benutzt wird. Dieses Modell besitzt eine große Ähnlichkeit zu klassischen Spinmodellen wie dem Isingmodell im Zufallsmagnetfeld, von dem es sich durch die Form der Wechselwirkung unterscheidet. Für vergleichende Untersuchungen haben wir deshalb auch derartige Modelle studiert.

Im Berichtszeitraum haben wir drei separate numerische Methoden benutzt, um das physikalische Verhalten des klassischen und des Quanten-Coulomb-Glases zu untersuchen: Damage-Spreading-Simulationen, Optimierungsmethoden zur Bestimmung der Niederenergie-Zustände sowie die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung. Neben den Arbeiten zum Verhalten ungeordneter korrelierter Elektronen, die den Hauptteil unserer Aktivitäten im Berichtszeitraum bildeten, haben wir auch begonnen, die entwickelten numerischen Methoden auf ähnlich gelagerte Probleme anzuwenden: korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen sowie das Zusammenspiel zwischen Unordnung und itinerantem Antiferromagnetismus.

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 ungeordneter Elektronensysteme besteht eine enge Zusammenarbeit mit den Teilprojekten C1 und C6. 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“

Die Damage-Spreading-Methode [9, 10, 11] ist eine besondere Variante der Monte-Carlo-Simulation. Anstelle eines einzelnen Systems beobachtet man 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 [12, 13]. Die zentrale Observable in derartigen Simulationen ist der Hamming-Abstand  $D$  (Schaden), der den Unterschied zwischen den Besetzungszahlen  $n_i^{(1)}$  und  $n_i^{(2)}$  zweier 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,  $D \rightarrow 0$  für  $t \rightarrow \infty$  oder er kann sich über das System ausbreiten,  $D \rightarrow const$  für  $t \rightarrow \infty$ . 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 möchte man aus ihrer Analyse Rückschlüsse auf das dynamische Verhalten des studierten Systems selbst treffen [14].

Wir hatten in der ersten Förderperiode eine parallele Implementation des Damage-Spreading für das klassische Coulomb-Glas und für Ising-Spinsysteme entwickelt [15] und damit die Eigenschaften von Damage-Spreading-Übergängen in verschiedenen Systemen untersucht. Gegen Ende der ersten Förderperiode und zu Beginn des Berichtszeitraumes stellte sich allerdings heraus, daß sich Damage-Spreading nur schlecht zur Charakterisierung der intrinsischen Dynamik des Vielteilchensystems eignet. Stattdessen wird es durch Details der jeweiligen Implementati-

on der Dynamik beeinflusst. Aus diesem Grunde wurden im Berichtszeitraum nur noch einige abschließende Rechnungen zur Beschreibung der Damage-Spreading-Übergänge selbst durchgeführt. Danach wurde diese Teilaufgabe abgeschlossen.

### 2.3.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

Die Bestimmung eines vollständigen Satzes niederenergetischer Zustände des klassischen Coulomb-Glases ist ein kombinatorisches Optimierungsproblem, verwandt z.B. mit dem Handlungsreisenden-Problem. Die Eigenzustände selbst sind von vornherein bekannt, weil der Hamiltonoperator in der Basis der Platzzustände diagonal ist. Das kombinatorische Problem besteht im Finden der *niederenergetischsten* unter der sehr großen Zahl aller Zustände. Ist ein derartiger Satz niederenergetischer Zustände erst einmal gefunden, können daraus sämtliche Tieftemperatur-Eigenschaften des Systems berechnet werden.

Im Berichtszeitraum haben wir die in Zusammenarbeit mit Dr. Möbius vom Institut für Werkstofforschung Dresden und mit den Teilprojekten C3 und C4 die in der ersten Förderperiode entwickelten Optimierungsalgorithmen weiter verbessert. Diese Algorithmen haben wir benutzt, um die niederenergetischen Anregungen des klassischen Coulomb-Glases für Systeme mit bis zu 1000 Teilchen zu bestimmen. Dies erlaubte eine detaillierte Untersuchung von Nichtergodizitätseffekten im klassischen Coulomb-Glas, um zu entscheiden, ob das glasartige Verhalten [18] im Coulomb-Glas-Modell ein Gleichgewichtsphänomen [19] ist, oder ähnlich zu strukturellen Gläsern ein rein kinetisches Phänomen [20].

### 2.3.3 Teilaufgabe „Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung“

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. Am Ende der ersten Förderperiode hatten wir deshalb eine effektive Methode, die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD), zur Bestimmung der niederenergetischen Eigenzustände eines ungeordneten Quanten-Vielteilchensystems entwickelt. Dieses Verfahren beruht auf einer Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einem geeignet gewählten Unterraum des Hilbertraumes, der aus Hartree-Fock-Eigenzuständen aufgebaut wird. Es ist verwandt mit der quantenchemischen Methode der Konfigurationswechselwirkung.

Im Berichtszeitraum haben wir die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung auf Elektronen im äußeren Magnetfeld verallgemeinert. Außerdem haben wir Spinfreiheitsgrade einbezogen und so die Voraussetzungen zum Studium magnetischer Phänomene geschaffen. Darüber hinaus haben wir die Implementation der Methode wesentlich verbessert.

Mit daraus resultierenden Programmen haben wir im Berichtszeitraum umfangreiche Simulationen des Quanten-Coulomb-Glases in ein, zwei und drei Raumdimensionen durchgeführt und dabei verschiedene Lokalisierungs- und Transporteigenschaften untersucht, insbesondere den Kubo-Leitwert, die Ladungssteifheit, die Rückkehrwahrscheinlichkeit von Einteilchen-Anregungen sowie Lokalisierungseigenschaften im Fock-Raum.

### 2.3.4 Teilaufgabe „Korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen“

Neben den Arbeiten zum Verhalten ungeordneter korrelierter Elektronen, die den Hauptteil unserer Aktivitäten im Berichtszeitraum bildeten, haben wir auch begonnen, die entwickelten numerischen Methoden auf ähnlich gelagerte Probleme anzuwenden. Eines dieser Probleme ist das Verhalten von korrelierten Elektronen in Quanten-Nanostrukturen. Wir haben dabei die Geometrie der Nanostruktur durch ein räumliches Modellpotential beschrieben, im Falle eines Quantenpunktes durch ein parabolisches Potential. Die Elektronen in der Struktur werden dagegen voll quantenmechanisch behandelt, hierbei kommt wieder die Methode der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung zum Einsatz.

Im Berichtszeitraum haben wir zunächst die Methode zur Beschreibung von Quanten-Nanostrukturen angepaßt. Als erstes Beispiel haben wir das Spektrum und die Ladungsdichteverteilung von Elektronen in einem parabolischen Quantenpunkt untersucht. Dieses System ist auch physikalisch sehr interessant. In Experimenten [21] an derartigen Quantenpunkten findet man sogenanntes „bunching“ der Additionsenergien, d.h. das Auftreten von Regionen negativen chemischen Potentials. In solchen Regionen gehen die Elektronen nicht einzeln in den Quantenpunkt, wenn man die Gatespannung ändert, sondern paarweise oder sogar in größeren Gruppen. Analoge Resultate wurden auch für klassische Punktladungen gefunden [22]. Ziel unserer Rechnungen war es, zu bestimmen, unter welchen Umständen „bunching“ auftritt und den Mechanismus dafür zu verstehen.

### 2.3.5 Teilaufgabe „Quanten-Magnetismus ungeordneter Elektronen“

Um den Einfluß von Unordnung auf die magnetischen Eigenschaften korrelierter Elektronen zu untersuchen, haben wir neben mikroskopischen Modellen wie dem Quanten-Coulomb-Glas auch effektive Feldtheorien für die magnetischen Freiheitsgrade simuliert. Wir wollen dabei insbesondere die Frage beantworten, inwieweit die Unordnung eine antiferromagnetische Phase zerstört. Bhatt und Lee [23] haben gezeigt, daß genügend starke Unordnung im Falle *lokalisierter* Spins den Antiferromagneten immer zerstört und stattdessen zur Bildung einer Random-Singlet-Phase führt. Bhatt und Fisher [24] haben später argumentiert, daß die gleiche Überlegung auch auf itinerante Antiferromagnete zutrifft. Analytische Theorien auf der Basis der perturbativen [25] Renormierungsgruppe zeigen zwar, daß der konventionelle Phasenübergang zerstört wird, liefern aber keine Aussage über das Schicksal des Antiferromagnetismus.

Im Berichtszeitraum haben wir daher begonnen, das Problem von Unordnung in itineranten Antiferromagneten numerisch zu untersuchen. Die Beantwortung der obigen Fragen erfordert das Studium sehr großer Längenskalen. Aus diesem Grunde ist eine vollständig mikroskopische Simulation des antiferromagnetischen Quantenphasenüberganges ungeordneter itineranter Elektronen nicht möglich. Zur Zeit entwickeln und testen wir deshalb eine Quanten-Monte-Carlo-Simulationsmethode für eine effektive Feldtheorie der antiferromagnetischen Fluktuationen in einem itineranten Elektronensystem.

## Literaturverzeichnis

- [1] A. L. Efros, Sol. State Commun. **96**, 183 (1995).
- [2] J. Talamantes, M. Pollak, and L. Elam, Europhys. Lett. **35**, 511 (1996).
- [3] F. Epperlein, M. Schreiber und Th. Vojta: *Quantum Coulomb glass within the Hartree-Fock approximation*, Phys. Rev. B 56, 5890 (1997).
- [4] 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).
- [5] A. L. Efros and B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, L49 (1975).
- [6] A. L. Efros, J. Phys. C **9**, 2021 (1976).
- [7] M. Pollak und M. Ortuño, in A. L. Efros und M. Pollak (Hrsg.): *Electron-Electron Interaction in Disordered Solids*, North-Holland, Amsterdam (1985), S. 287
- [8] 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), S. 409
- [9] A. Kauffman, J. Theor. Biol. **22**, 437 (1969).
- [10] B. Derrida and Y. Pomeau, Europhys. Lett. **1**, 45 (1986); B. Derrida and G. Weisbuch, Europhys. Lett. **4**, 657 (1987).
- [11] H.E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertesz, and H.J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **59**, 2326 (1987).
- [12] A. Coniglio, L. de Arcangelis, H.J. Herrmann, and N. Jan, Europhys. Lett. **8**, 315 (1989).
- [13] S.C. Glotzer, P.H. Poole, and N. Jan, J. Stat. Phys. **68**, 895 (1992).
- [14] H. Hinrichsen, J. S. Weitz, and E. Domany, J. Stat. Phys. **88**, 617 (1997)
- [15] T. Wappler, T. Vojta und M. Schreiber, Phys. Rev. B **55**, 6272 (1997).
- [16] M. Mochena und M. Pollak, Phys. Rev. Lett. **67**, 109 (1991).
- [17] M. Schreiber und K. Tenelsen, Europhys. Lett. **21**, 697 (1993).
- [18] siehe z.B. M. Pollak, Phil. Mag. B **65**, 657 (1992) für mögliche „Glas-Szenarien“ im Coulomb-Glas.

- [19] E. R. Grannan und C. C. Yu, Phys. Rev. Lett. **71**, 3335 (1993).
- [20] J. H. Davies, P. A. Lee und T. M. Rice, Phys. Rev. B **29**, 4260 (1984).
- [21] N.B. Zhitenev, R.C. Ashoori, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, Phys. Rev. Lett. **9**, 2308 (1997).
- [22] A.A. Koulakov and B.I. Shklovskii, Phys. Rev. B **57**, 2352 (1998).
- [23] R.N. Bhatt und P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. **48**, 344 (1982).
- [24] R.N. Bhatt und D.S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 3072 (1992).
- [25] R. Narayanan, T. Vojta, D. Belitz und T.R. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **82**, 5132 (1999).
- [26] N. Rajewsky and M. Schreckenberg, Physica A **245**, 139 (1997).
- [27] A. Möbius, A. Nekliudov, A. Diaz-Sanchez, K.H. Hoffmann, A. Fachat und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **79**, 4297 (1997).
- [28] G. Montambaux in *Quantum Fluctuations*, Les Houches, Session LXIII, hrsg. von E. Giacobino, S. Reynaud, and J. Zinn-Justin, Elsevier, Amsterdam (1995).
- [29] D. Popovich, A. B. Fowler und S. Washburn, Phys. Rev. Lett. **79**, 1543 (1997); D. Simonian, S. V. Kravchenko und M. P. Sarachik, *ibid.* **79**, 2304 (1997).
- [30] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, phys. stat. sol. (b) **205**, 53 (1998).

## 2.4 Ergebnisse

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

In der ersten Förderperiode hatten wir eine parallele Implementierung des Damage-Spreading-Algorithmus entwickelt und damit ausführliche Testrechnungen in Spinsystemen mit und ohne Unordnung durchgeführt. Im Mittelpunkt standen zunächst die Eigenschaften der dabei auftretenden dynamischen Damage-Spreading-Übergänge. Außerdem hatten wir begonnen, Damage-Spreading im klassischen Coulomb-Glas zu simulieren.

Gegen Ende der ersten Förderperiode und zu Beginn des Berichtszeitraumes haben wir uns verstärkt der Frage gewidmet, inwieweit man Damage-Spreading zur Charakterisierung der intrinsischen Dynamik eines kooperativen Systems benutzen kann. Dazu haben wir umfangreiche Simulationen mit verschiedenen Implementierungen des Damage-Spreading-Algorithmus durchgeführt. Dabei zeigte sich, daß das Verhalten des Schadens sehr empfindlich von Details des gewählten Algorithmus abhängt und nicht nur von den lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen zwei Zuständen. In [VS98, VS99] haben wir beispielsweise gezeigt, daß die Ausbreitung des Schadens von der Reihenfolge der Gitterplätze innerhalb des Monte-Carlo-Schrittes abhängt (ein ähnliches Verhalten findet sich auch in gewissen zellulären Automaten [26]). Ein typisches Ergebnis ist dabei im Bild 2.1 dargestellt. Analoge Abhängigkeiten existieren auch bezüglich der genauen Verwendung

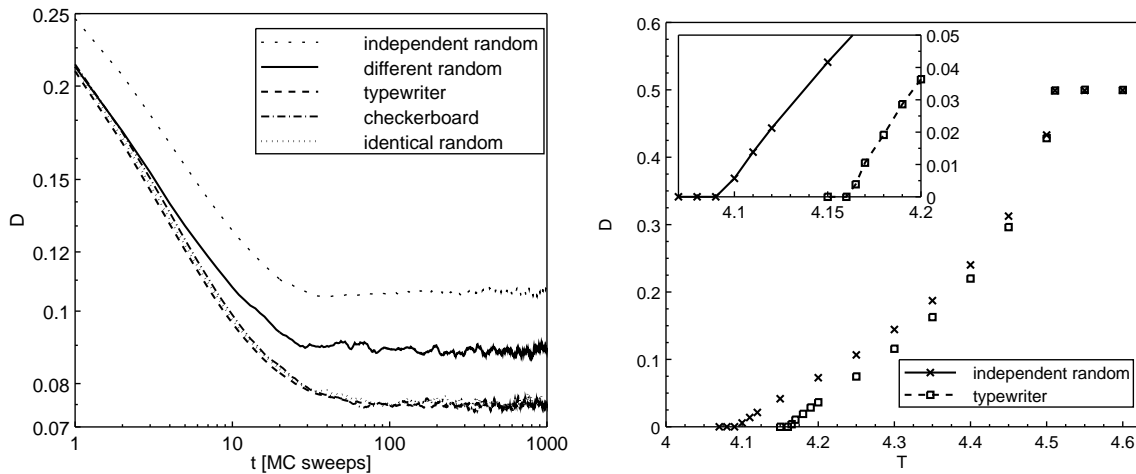


Abbildung 2.1: Abhängigkeit des Damage-Spreading im Ising-Modell von der Reihenfolge in der die Gitterplätze während der Simulation durchlaufen werden. Linkes Diagramm: Zeitverlauf des Hammingabstandes  $D$ , rechtes Diagramm: Stationärer Hammingabstand als Funktion der Temperatur (aus [VS98]).

der Zufallszahlen in der Simulation [14].

Generell gilt, daß solche Abhängigkeiten von Details des dynamischen Algorithmus in allen Nichtgleichgewichtsprozessen vorkommen können. Im Falle des Damage-Spreading war diese Erkenntnis trotzdem etwas unerwartet, da jede der Kopien im thermischen Gleichgewicht ist. Insgesamt ist Damage-Spreading damit ein interessantes Nichtgleichgewichts-Phänomen. Es hat sich aber als wenig geeignet zur Charakterisierung der Dynamik eines *einzelnen* Systems herausgestellt. Deshalb haben wir die Teilaufgabe „Damage-Spreading“ nach 1999 nicht weiter fortgeführt.

## 2.4.2 Teilaufgabe „Niederenergetische Zustände klassischer Systeme“

In der ersten Förderperiode hatten wir in Zusammenarbeit mit Dr. Möbius vom IfW Dresden und den Teilprojekten C3 und C4 effiziente Algorithmen zur kombinatorischen Optimierung entwickelt [27]. Sie bestehen aus wiederholtem Aufheizen und Abkühlen des Systems (*thermal cycling*), verbunden mit lokaler Suche in der Nähe der Energieminima.

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, diese Algorithmen nochmals deutlich zu verbessern. Die Grundidee des neuen Verfahrens, das in [MFMS99] dargestellt ist, besteht darin, aus mehreren bereits gefundenen lokalen Energieminima eine neue Konfiguration mit eventuell niedrigerer Energie zu kombinieren (*iterative partial transcription – IPT*). Im Coulomb-Glas ist dies äquivalent zum Umbesetzen ganzer Cluster von stark gebundenen Gitterplätzen. In [MFMS99] wurde das neue Verfahren zunächst am Beispiel des Handelsreisenden-Problems getestet. Dabei konnte gegenüber den in der ersten Förderperiode verwendeten Methoden eine Beschleunigung um mehr als eine Größenordnung erzielt werden. Typische Resultate sind in Abbildung 2.2a dargestellt. Eine weitere drastische Verbesserung läßt sich durch



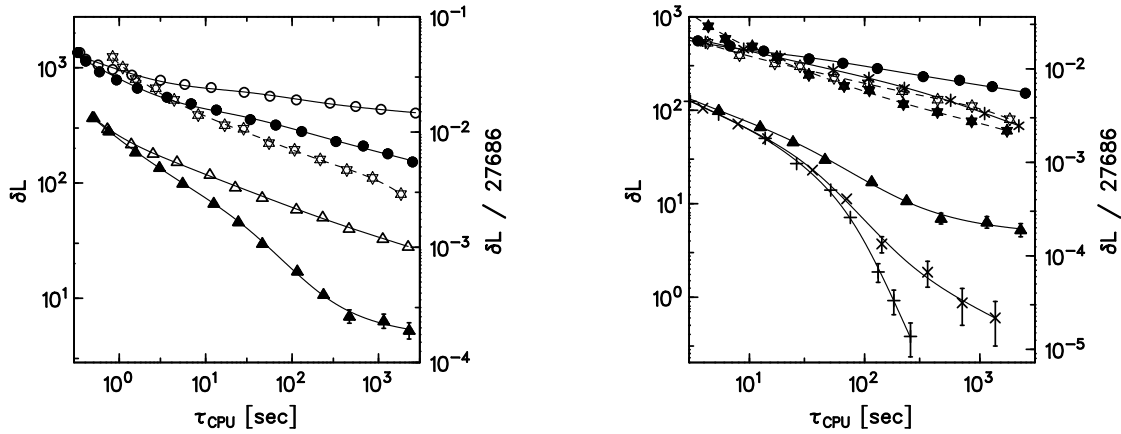


Abbildung 2.2: Linkes Diagramm: Abweichung der Streckenlänge im Handlungsreisenden-Problem vom Optimum als Funktion der Rechenzeit für verschiedene Algorithmen. Die vollen Symbole sind jeweils mit, die leeren ohne IPT bestimmt worden. Rechtes Diagramm: Einfluß der parallelen Suche und Transkription. Die untersten drei Kurven demonstrieren den Gewinn für Archivgrößen von 1, 3 und 10 Zuständen. (aus [MFMS99]).

Parallelisierung des Aufheizens und der Transkription der lokalen Minima erreichen, ausgehend von einem Archiv von lokalen Minima (siehe Abbildung 2.2b). Unser neuer Algorithmus mit paralleler iterativer Transkription ist für kleinere Probleme (weniger als 1000 Städte) etwa genauso schnell wie die besten verfügbaren alternativen Verfahren, für größere Probleme dagegen sogar deutlich schneller, was vor allem auf die große Robustheit unseres Algorithmus zurückzuführen ist.

Neben der Verbesserung des Algorithmus haben wir uns ausführlich mit der spezifischen Wärme des klassischen Coulomb-Glases beschäftigt, und dabei die vorläufigen Ergebnisse aus der ersten Förderperiode deutlich erweitert und vertieft. Besondere Aufmerksamkeit haben wir dabei nichtergodischen Effekten in der spezifischen Wärme gewidmet. In [DMONS00] haben wir dazu zunächst einen vollständigen Satz von niederenergetischen Zuständen bestimmt. Die Dynamik des Systems kann durch einen Graphen dargestellt werden, der durch die relevanten Übergänge zwischen diesen Zuständen gebildet wird. Die Ergodizität bzw. Nichtergodizität hängt dann von der Konnektivität dieses Graphen ab. Zur Quantifizierung der Nichtergodizität definierten wir den Parameter  $q(T, \tau_m) = c(T, \tau_m)/c(T, \infty)$ , der das Verhältnis der spezifischen Wärme bei Messzeit  $\tau_m$  zum Langzeitlimites der spezifischen Wärme beinhaltet. Typische Resultate für  $q$  sind in Abbildung 2.3 gezeigt.

Die spezifische Wärme des klassischen Coulomb-Glases relaxiert extrem langsam. Schon für ein System mit nur 216 Gitterplätzen umfaßt das Spektrum der Relaxationszeiten mehr als 10 Größenordnungen. Für ein System mit 1000 Plätzen steigt dies bis auf 15 Größenordnungen an. Insgesamt können diese Resultate als Beweis

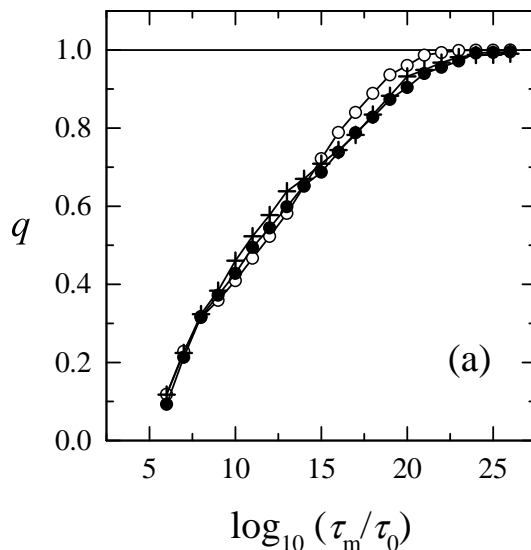


Abbildung 2.3: Nichtergodizitätsparameter  $q$  als Funktion der Meßzeit  $\tau_m$  für Systeme mit 216, 512 und 1000 Plätzen. (aus [DMONS00]).

für glasartiges Verhalten durch Einfrieren der Dynamik auf den experimentellen Zeitskalen gewertet werden. Die Frage, ob es eine scharfe Übergangstemperatur gibt, die dieses Verhalten von gewöhnlichem ergodischen trennt, konnte bisher nicht endgültig beantwortet werden.

### 2.4.3 Teilaufgabe „Transporteigenschaften ungeordneter Quantensysteme“

Unsere zentrale Methode zur Untersuchung ungeordneter Quanten-Vielteilchensysteme im Berichtszeitraum war die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD), deren Grundzüge wir in der ersten Förderperiode entwickelt hatten [VES98]. Dieses Verfahren beruht auf einer Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einem Unterraum des Hilbertraumes, der aus den niederenergetischen Hartree-Fock-Eigenzuständen aufgebaut wird. Details dieser Methode sind in [VES99] dargestellt. Abbildung 2.4 zeigt beispielsweise die Grundzustandsenergie als Funktion der Dimension des verwendeten Unterraumes und im Vergleich mit dem exakten Resultat. Die Konvergenz der Grundzustandsenergie ist dabei näherungsweise exponentiell. Analoge Aussagen gelten auch für andere Observable.

Nachdem wir in den Arbeiten [VES98, VE98] den Leitwert ungeordneter korrelierter spinloser Fermionen in zwei und drei Raumdimensionen berechnet hatten, dehnten wir diese Untersuchungen im Berichtszeitraum auch auf eindimensionale Systeme aus [SEV99]. Abbildung 2.5 zeigt den typischen Leitwert einer eindimensionalen Kette von 25 Gitterplätzen als Funktion der Wechselwirkungsstärke. Dabei kann man, in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke, zwei qualitativ verschiedene Regimes unterscheiden: Im lokalisierten Bereich (niedriger Leitwert) erhöht sich der Leitwert zunächst mit Einschalten der Wechselwirkung. Erst bei sehr starker Wechselwirkung fällt der Leitwert schließlich ab. Dies ist ein Vorbote einsetzen-

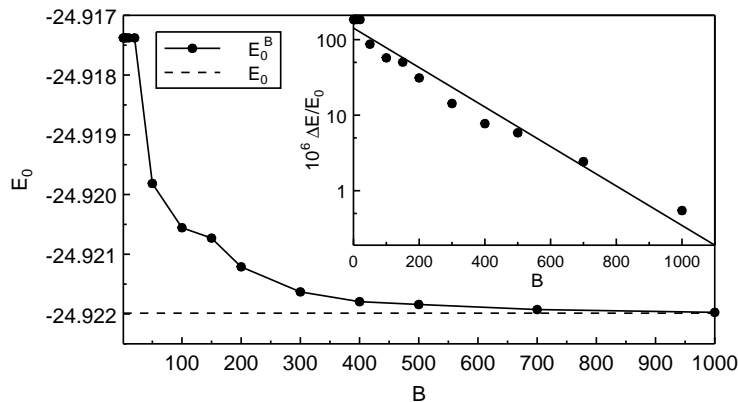


Abbildung 2.4: Grundzustandsenergie  $E_0$  als Funktion der Dimension  $B$  des eingeschränkten Hilbertraumes in der HFD-Methode (der volle Hilbertraum hat eine Dimension von 12870) für ein System von 8 Elektronen auf 16 Gitterplätzen. Die gestrichelte Linie ist das exakte Resultat. (aus [VES99]).

der Wigner-Glas- oder Wigner-Kristall-Bildung. Dagegen führt im Falle schwacher Unordnung (hoher Leitwert) jede Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu einer Verringerung des Leitwertes.

Es ist bekannt [28], daß in einem ungeordneten System ein enger Zusammenhang zwischen dem Leitwert und der Ladungssteifheit (zweite Ableitung der Grundzustandsenergie nach dem magnetischen Fluß) existiert. Eine numerisch einfachere, aber verwandte Größe ist die Phasensensitivität des Grundzustandes, definiert als Differenz der Grundzustandsenergien bei periodischen und antiperiodischen Randbedingungen. Zur Berechnung dieser Größen erweiterten wir den HFD-Algorithmus in [EVS99] auf Elektronen in einem äußeren Magnetfeld. Wir fanden, daß sich die wechselwirkungsbedingte Erhöhung des Transports im stark lokalisierten Regime auch in der Phasensensitivität widerspiegelt, allerdings ist der Effekt vergleichsweise schwächer. Eine direkte Berechnung der Ladungssteifheit scheiterte bisher an der erforderlichen Genauigkeit zur Berechnung der zweiten Ableitung der Grundzustandsenergie.

Im letzten Jahr haben wir vor allem daran gearbeitet, unsere Untersuchungen von spinlosen Fermionen auf Elektronen mit Spin zu erweitern. Dies ist insbesondere auch deshalb wichtig, weil die Spinfreiheitsgrade eine zentrale Rolle bei den vermuteten Metall-Isolator-Übergängen in zweidimensionalen Elektronengasen spielen [29]. In ersten Rechnungen [VEKS00] haben wir allerdings gefunden, daß das qualitative Verhalten des Leitwertes für Elektronen mit Spin dem von spinlosen Fermionen gleicht. Die wechselwirkungsinduzierte Erhöhung des Leitwertes im lokalisierten Bereich ist für Elektronen mit Spin aber wesentlich stärker.

Um einen möglichst umfassenden Einblick in die Transporteigenschaften ungeordneter korrelierter Elektronen zu erhalten, haben wir auch die Lokalisierungseigenschaften von Einteilchenanregungen untersucht. In der Arbeit [30] hatten wir die Rückkehrwahrscheinlichkeit als ein Lokalisierungsmaß vorgeschlagen. Diese Größe enthält jedoch neben der Information über Lokalisierung auch Information über den Zerfall von Quasiteilchen. Um die reine Lokalisierungsinformation zu erhal-

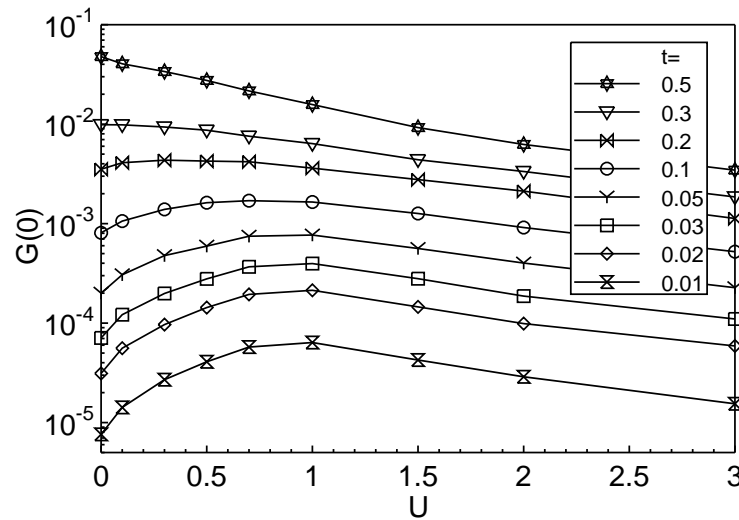


Abbildung 2.5: Leitwert  $G$  einer eindimensionalen Quanten-Coulomb-Glas-Kette als Funktion der Wechselwirkungsstärke  $U$  für verschiedene Hopping-Matrixelemente  $t$  (aus [SEV99]).

ten, normieren wir deshalb die Rückkehrwahrscheinlichkeit mit dem Quasiteilchengewicht [EKSUV01, VS01]. Abbildung 2.6 zeigt diese beiden Größen als Funktion der Wechselwirkungsstärke. Dabei ist zu sehen, daß das Quasiteilchengewicht zunächst mit zunehmender Wechselwirkung abnimmt. Es erreicht etwa dort ein Minimum, wo im lokalisierten Bereich die stärkste Erhöhung des Transports erfolgt. Für noch stärkere Wechselwirkung steigt das Quasiteilchengewicht wieder an. Im Limes  $U \rightarrow \infty$  sollte es, abgesehen von symmetrieebedingten Entartungen, wieder den Wert 1 erreichen. Ein analoges Verhalten zeigt auch die Partizipationszahl des Vielteilchen-Grundzustands im Fock-Raum, die wir in [EKSUV01] ebenfalls untersucht haben.

Abbildung 2.6 zeigt auch, daß die normierte Rückkehrwahrscheinlichkeit generell mit zunehmender Wechselwirkungsstärke zunimmt, die Einteilchenanregungen

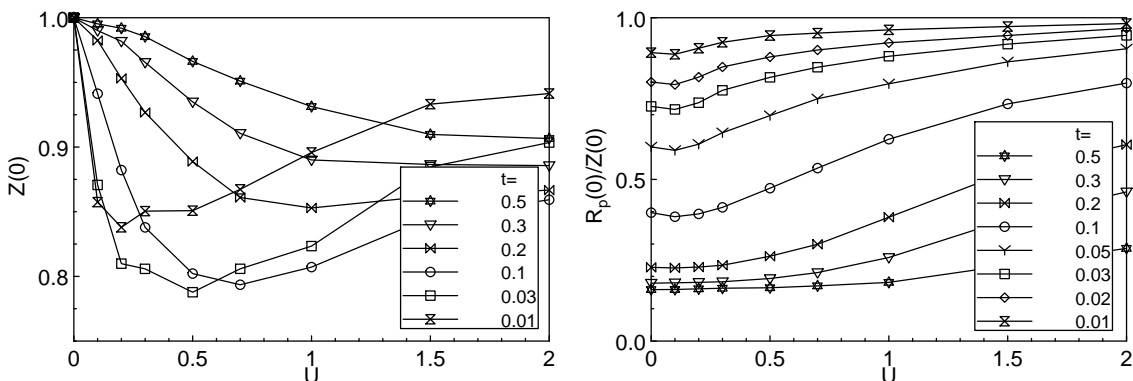


Abbildung 2.6: Quasiteilchengewicht  $Z$  und normierte Rückkehrwahrscheinlichkeit  $R_p/Z$  als Funktion der Wechselwirkungsstärke  $U$  für verschiedene Hoppingmatrixelemente  $t$  (aus [EKSUV01]).

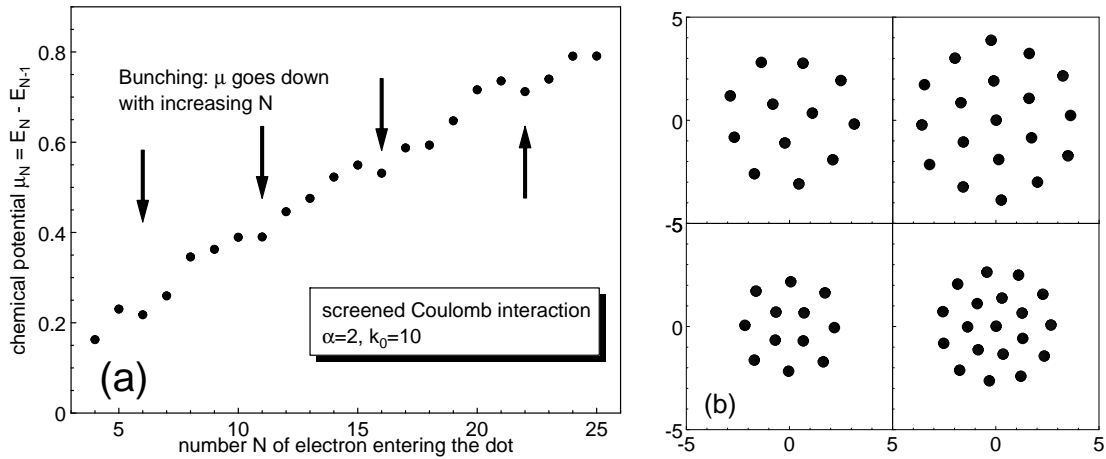


Abbildung 2.7: (a) Additionsspektrum und (b) räumliche Ladungsverteilung (oben ohne und unten mit Abschirmung) für klassische Punktladungen in einem parabolischen Potential. (aus [SSV01]).

werden also stärker lokalisiert. Für kleine Hopping-Matrixelemente und Wechselwirkungsstärke gibt es eine geringe Delokalisierung, die aber wesentlich schwächer ausfällt als die korrespondierende Erhöhung des Leitwertes (siehe Abb. 2.5). Die Ursache dafür ist die Coulomb-Lücke in der Einteilchenzustandsdichte, während die für den Leitwert verantwortlichen Teilchen-Loch-Anregungen eine derartige Lücke nicht besitzen.

#### 2.4.4 Teilaufgabe „Korrelierte Elektronen in Quanten-Nanostrukturen“

Im Berichtszeitraum haben wir zunächst die Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung (HFD) auf das Problem korrelierter Elektronen in einem parabolischen Quanten-Punkt übertragen. Da die Elektronendichte in diesen Systemen relativ gering ist, spielt die lange Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung unter Umständen eine wichtige Rolle. Wir arbeiten deshalb mit Impuls-Basiszuständen, da sich damit die Coulomb-Matrixelemente leicht berechnen lassen.

Mit dem resultierenden Programm haben wir die Ladungsdichteverteilung und das Additionsspektrum eines parabolischen Quanten-Punktes mit bis zu 20 Elektronen berechnet und mit entsprechenden Resultaten für klassische Punktladungen verglichen. Im klassischen Fall (siehe Abb. 2.7) tritt dabei bunching, d.h. ein negatives chemisches Potential, immer dann auf, wenn sich die räumliche Ladungsstruktur bei Addition eines weiteren Elektrons global ändert. Die voll quantenmechanischen Ergebnisse hängen wesentlich von der relativen Stärke der Coulomb-Wechselwirkung ab (die im Experiment indirekt, durch Änderung der Krümmung des parabolischen Potentials eingestellt werden kann). Bei geringer Stärke der Wechselwirkung ist die Situation sehr ähnlich der in der Atomphysik. Man erhält eine Schalenstruktur, die von den nicht-wechselwirkenden Eigenzuständen dominiert ist. Die Wechselwirkung vergrößert die Ausdehnung der Ladungswolke etwas, führt aber nicht zu globaler Umorganisation (siehe Abb. 2.8) In einer solchen Si-

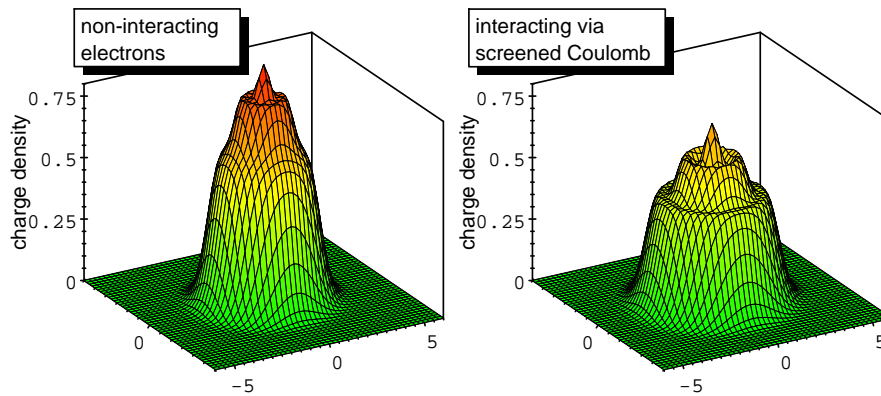


Abbildung 2.8: Räumliche Ladungsverteilung für 15 Elektronen im wechselwirkungsfreien bzw. schwach wechselwirkenden Fall (aus [M00vss]).

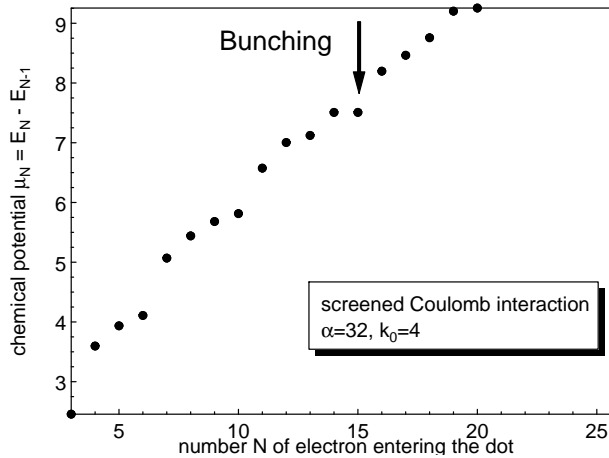


Abbildung 2.9: Additionsspektrum eines Quantenpunktes im Falle sehr starker Coulomb-Wechselwirkung (aus [SSV01]).

tuation haben wir auch kein Bunching gefunden.

Wird die Wechselwirkung dagegen genügend stark, verhält sich das quantenmechanische System so ähnlich wie klassische Punktladungen. Das Hinzufügen eines weiteren Elektrons führt unter Umständen zu einer globalen räumlichen Reorganisation der Elektronen. In diesen Fällen findet man folglich auch Regionen negativen chemischen Potentials, wie in Abb. 2.9 zu sehen ist. Allerdings passiert dies in unseren Rechnungen erst bei wesentlich höheren relativen Wechselwirkungsstärken als in den Experimenten [21]. Die wahrscheinlichste Ursache für diese Diskrepanz ist, daß in unseren Rechnungen die Anzahl der Elektronen im Quanten-Punkt (bis 20) immer noch wesentlich kleiner ist als im Experiment, wo sich mehrere hundert Elektronen darin befinden.

## Literaturverzeichnis

### Referierte Originalarbeiten

- [DMONS00] A. Diaz-Sanchez, A. Möbius, M. Ortuno, A. Nekliudov, M. Schreiber, *Nonergodic effects in the Coulomb glass: Specific heat*, Phys. Rev. B **62**, 8030 (2000)
- [EKSUV01] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Fock space localization and conductance of disordered interacting electrons*, angenommen bei Physica B
- [EVS99] F. Epperlein, T. Vojta, und M. Schreiber: *Crossover from interaction induced localization to delocalization in disordered electron systems*, Ann. Phys. (Leipzig) **8** (1999), SI-61-4
- [M99] A. Möbius, A. Diaz-Sanchez, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K.H. Hoffmann, P. Merz, A. Nekliudov, *Two physically motivated algorithms for combinatorial optimization: thermal cycling and iterative partial transcription*, Comp. Phys. Commun. 121-122, 34-36 (1999)
- [MFMS99] A. Möbius, B. Freisleben, P. Merz, M. Schreiber, *Combinatorial optimization by iterative partial transcription*, Phys. Rev. E **59**, 4667 (1999)
- [RSV99] R.A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Two interacting particles in a random potential: Numerical calculations of the interaction matrix elements*, phys. stat. sol. (b) **211**, 681-9 (1999)
- [RSV01] R.A. Römer, M. Schreiber und T. Vojta: *Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems*, Physica E **9**, 397-404 (2001)
- [SEV99] M. Schreiber, F. Epperlein und T. Vojta: *Transport in disordered interacting systems: Numerical results for one-dimensional spinless electrons*, Physica A **266**, 443-9 (1999)
- [SSV01] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions*, angenommen bei Int. J. Mod. Phys. B
- [VE98] T. Vojta und F. Epperlein, *Electronic transport in disordered interacting systems*, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 493 (1998)
- [VEKS00] T. Vojta, F. Epperlein, S. Kilina und M. Schreiber: *From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass*, phys. stat. sol. (b) **218**, 31-34 (2000)
- [VES98] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4212 (1998).
- [VES99] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber: *Hartree-Fock based diagonalization: an efficient method for simulating disordered interacting electrons*, Comp. Phys. Commun. 121-122, 489-92 (1999)

- [VS98] T. Vojta und M. Schreiber, *Differences between sequential and random order of updates in damage spreading simulations*, Phys. Rev. E **58**, 7998–8001 (1998).
- [VS01] T. Vojta und M. Schreiber, *Quantum Coulomb glass*, angenommen bei Phil. Mag. B

### Übersichtarbeiten

- [V00a] T. Vojta: *Quantum phase transitions in electronic systems*, Ann. Phys. (Leipzig) **9**, 403–40 (2000)
- [V00b] T. Vojta: *Quantum phase transitions*, in Proc. WE-Heraeus Summer School on Statistical Physics, Chemnitz (2000), wird erscheinen im Springer-Verlag, cond-mat/0010285
- [V01] T. Vojta: *Quantenphasenübergänge – Von Ordnung zu Unordnung durch Quantenfluktuationen*, Physik in unserer Zeit **32**, 38–43 (2001)

### Qualifikationsarbeiten

- [E99] F. Epperlein, *Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Viel-elektronensystemen*, Dissertation, TU Chemnitz (1999)
- [V99] T. Vojta, *Quantum and classical phase transitions in electronic systems*, Habilitationsschrift, TU Chemnitz (1999)

### Proceedings

- [SV00] M. Schreiber und T. Vojta: *Condensed matter physics on the computer*, in Proc. Int. Summer School on Teaching Computational Physics, Trest (2000)
- [VS99] T. Vojta und M. Schreiber, *Damage spreading in random field systems, extended abstract*, Comp. Phys. Commun. 121–122, 750 (1999)

### Konferenzbeiträge (sortiert chronologisch)

- [T98sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?*, 2nd TMR Meeting Phase-Coherent Dynamics in Hybrid Nanostructures, Ioannina, Griechenland (1998)
- [P98sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Do interactions enhance or reduce transport in a disordered electron system?*, Int. Conf. Percolation and disordered systems, Schlo Rauschholzhausen, Giessen (1998)
- [S98mndhs] A. Möbius, A. Nekliudov, A. Diaz-Sanchez, K.H. Hoffmann und M. Schreiber, *Optimization by thermal cycling*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)
- [S98vrs] T. Vojta, R.A. Römer und M. Schreiber, *Two interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)



- [S98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta, *Computer simulation of disordered interacting electrons*, 20th Int. Conf. Statistical Physics (Statphys 20), Paris (1998)
- [I98esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta, *Coulomb interactions and localization in disordered electron systems*, 24th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS24), Jerusalem (1998)
- [C98ves] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, *Computer Simulations of Disordered Interacting Electrons*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)
- [C98vs] T. Vojta und M. Schreiber, *Damage Spreading in Random Field Systems*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)
- [C98m] A. Möbius, A. Diaz-Sanches, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K. H. Hoffmann, P. Merz und A. Nekliudov, *Two Physically Motivated Algorithms for Combinatorial Optimization: Thermal Cycling and Iterative Partial Transcription*, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (1998)
- [H98ves] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, *Electronic transport in disordered interacting systems*, 210. WE-Heraeus Seminar Percolation, Interaction, Localization: Simulations of Transport in Disordered Systems, Berlin (1998)
- [C99s] M. Schreiber, *Interacting Electrons in a Random Potential*, International Workshop Dynamics of Complex Systems, Dresden (1999)
- [D99lssv] P. Lazić, M. Schreiber, E. Straver und T. Vojta: *Damage spreading and the existence of many pure states in the random field Ising model*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)
- [D99esv] F. Epperlein, M. Schreiber und T. Vojta: *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)
- [D99svt] S. Kilina, T. Vojta und M. Schreiber: *Transport properties of disordered interacting spinful electrons*, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (1999)
- [L99evs] F. Epperlein, T. Vojta, und Michael Schreiber: *Crossover from interaction induced localization to delocalization in disordered electron systems*, Int. Conference on Localization, Hamburg (1999)
- [H99veks] T. Vojta, F. Epperlein, S. Kilina und M. Schreiber: *From localization to delocalization in the quantum Coulomb glass*, 8th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia (1999)
- [H99ms] A. Möbius und M. Schreiber, *Specific heat of the Coulomb glass*, 8th International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia (1999)
- [M00vss] T. Vojta, J. Siewert und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of interacting electrons in a parabolic confinement*, 11th International Winter-school on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (2000)
- [E00svs] J. Siewert, T. Vojta und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of a parabolic quantum dot: dependence on the interaction range*, 18th General Conference of the Condensed Matter Division of the EPS, Montreux (2000)

- [D00vss] T. Vojta, J. Siewert und M. Schreiber: *Spectrum and charge distribution of interacting electrons in a parabolic confinement*, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (2000)
- [D00eksuv] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Conductance and Fock space localization of disordered interacting electrons*, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (2000)
- [W00eksuv] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov und T. Vojta: *Fock space localization and conductance of disordered interacting electrons*, Symposium on Wave Propagation and Electronic Structure in Disordered Systems, Heraklion (2000)
- [S00ssv] J. Siewert, M. Schreiber und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots*, 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka (2000)
- [E00ssv] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta: *Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions*, International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter, Osaka (2000)
- [T00sv] M. Schreiber und T. Vojta, *Solid State Physics on the Computer - Overview and Example: Hopping Conductivity*, Summerschool Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien (2000)
- [C00ssv] M. Schreiber, J. Siewert und T. Vojta, *Interacting electrons in quantum dots and quantum dot structures: the quantum mechanics of artificial atoms and molecules*, 36. Symposium für Theoretische Chemie, Litschau, sterreich (2000)
- [E00msh] A. Möbius, M. Schreiber und K. H. Hoffmann, *Optimization by thermal cycling*, Int. Workshop Energy Landscapes, Chemnitz (2000)
- [E00svm] M. Schreiber, T. Vojta und A. Möbius, *Correlated Electrons in the Quantum Coulomb Glass*, Int. Workshop Energy Landscapes, Chemnitz (2000)
- [D01svs] M. Schreiber, T. Vojta und J. Siewert, *Interacting electrons in parabolic quantum dots and quantum dot structures*, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (2001)
- [D01bvs] S. Bekhechi, T. Vojta und M. Schreiber, *Monte-Carlo simulations of the quantum phase transition in disordered itinerant antiferromagnets*, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (2001)

## 2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Berichtszeitraum haben wir einerseits umfangreiche Simulationsrechnungen durchgeführt und damit Fortschritte bei der Beantwortung unserer physikalischen Fragen

erzielt. Andererseits haben wir auch unsere Algorithmen verbessert und erweitert, um damit in Zukunft neue Probleme behandeln zu können.

Im Bereich der kombinatorischen Optimierung und ihrer Anwendung auf das klassische Coulomb-Glas steht in Zukunft neben einer verbesserten parallelen Implementierung des Optimierungsalgorithmus vor allem die Erweiterung der Simulationen auf verschiedene Observable im Mittelpunkt, bei denen im Experiment nichtergodisches Verhalten beobachtet wurde (z.B. Photoleitfähigkeit).

Bei der Simulation der quantenmechanischen Vielteilchensysteme, und zwar sowohl beim Quanten-Coulomb-Glas als auch bei den Quanten-Nanostrukturen ist das zentrale Problem zur Zeit die immer noch zu geringe maximal mögliche Zahl von Teilchen. Neben Verbesserungen am Algorithmus wollen wir unsere Simulationen aber auch auf kompliziertere Nanostrukturen als Quanten-Punkte ausdehnen. Da die Hauptschwierigkeit bei diesen Simulationen nicht vom (Confinement-) Potential, sondern von der Wechselwirkung stammt, sollte eine kompliziertere Geometrie die Rechnungen nicht übermäßig verteuern.

Außerdem sollen in Zukunft natürlich auch extensive Simulationsrechnungen zum Quanten-Magnetismus ungeordneter itineranter Elektronen durchgeführt werden. Die Entwicklung und der Test der dafür vorgesehenen Algorithmen sollen noch in diesem Jahr abgeschlossen werden.

Eine ausführlichere Darstellung der geplanten Arbeiten findet sich im Finanzierungsantrag 2002–2004.