

## DY 50 Critical Phenomena and Phase Transitions

Zeit: Mittwoch 09:45–12:30

Raum: TU H3010

**Hauptvortrag**

DY 50.1 Mi 09:45 TU H3010

**Integrable  $sl(2/1)$  super spin chain and the spin quantum Hall effect** — ●HOLGER FRAHM<sup>1</sup>, FABIAN H. L. ESSLER<sup>2</sup>, and HUBERT SALEUR<sup>3,4</sup> — <sup>1</sup>Institut für Theoretische Physik, Universität Hannover — <sup>2</sup>Theoretical Physics, Oxford University — <sup>3</sup>Service de Physique Théorique, CEA Saclay — <sup>4</sup>Dept. of Physics and Astronomy, University of Southern California

The analysis of network models – either directly or by numerical studies of related quantum spin chains with super group symmetry – allows to gain insights into the delocalisation transition of non-interacting two-dimensional electrons with disorder. Critical exponents determined this way are an important step towards the identification of the conformal field theory (CFT) describing the universal physics at the transition. To collect more information on the universal properties of the “spin quantum Hall” transition which may occur in disordered superconductors with certain restrictions on the symmetry an integrable version of the corresponding super spin chain has been proposed [1]. Analyzing the ground state and some low-lying excitations of this integrable chain we determine the central charge of the underlying CFT and obtain evidence for an infinite degeneracy of the finite size gaps (possibly related to a continuous spectrum of the CFT). Finally, we compare our findings for the integrable chain with known properties of the (non-integrable) network model for the spin QHE.

[1] R. M. Gade, *J. Phys. A* **32** (1999) 7071

DY 50.2 Mi 10:15 TU H3010

**Phasendiagramm des zweidimensionalen, schwach anisotropen Heisenberg-Antiferromagneten** — ●M. HOLTSCHNEIDER, W. SELKE und R. LEIDL — Institut für Theoretische Physik, RWTH Aachen, 52056 Aachen, Germany

Das klassische Heisenberg-Modell auf einem Quadratgitter mit schwacher, Ising-artiger Anisotropie weist in einem äußeren Magnetfeld eine langreichweitig geordnete antiferromagnetische, eine algebraisch geordnete Spin-Flop- und eine paramagnetische Phase auf. Die Phasenlinien werden mithilfe einer Reihe von charakteristischen Größen, wie z.B. Untergittermagnetisierungen und Binder-Kumulative, in Monte-Carlo-Simulationen bestimmt. Gleichzeitig wird die Art der Phasenübergänge untersucht. Ergebnisse werden mit Resultaten zum entsprechenden  $S = \frac{1}{2}$  Quanten-Heisenberg-Modell verglichen.

DY 50.3 Mi 10:30 TU H3010

**Phasenraum-Topologie als Verbindung zwischen Dynamik und Thermodynamik von Phasenübergängen** — ●MICHAEL KASTNER — Physikalisches Institut, Theoretische Physik I, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth

Der Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Dynamik eines Vielteilchensystems und dessen statistischer oder thermodynamischer Beschreibung ist eine Fragestellung, die schon seit Boltzmanns Zeiten diskutiert wird, die aber immer noch neue und interessante Aspekte bietet. Eine kürzlich aufgestellte Hypothese etabliert, mittels topologischer Konzepte, eine faszinierende derartige Verbindung zwischen mikroskopischer und makroskopischer Beschreibungsebene: ein Phasenübergang kann nur dann auftreten, wenn innerhalb einer Familie gewisser Unterräume des Phasenraums eine Topologieänderung stattfindet. Gleichzeitig kann die Topologie aber auch in Beziehung gesetzt werden zum Verhalten des maximalen Lyapunov-Exponenten, und damit zur mikroskopischen Dynamik, des Systems. Durch diese Nähe zur mikroskopischen Dynamik sowie durch die Tatsache, dass nicht auf die sonst in der statistischen Physik üblichen Gibbsschen Ensembles Bezug genommen wird, ist der „topologische Zugang zu Phasenübergängen“ konzeptionell von großem Interesse. Weiterhin legt dieser Zugang, im Gegensatz zur Standarddefinition, eine (physikalisch wünschenswerte) „natürliche Verallgemeinerung“ der Definition eines Phasenübergangs auch für endliche Systeme nahe. Die Grundideen des topologischen Zugangs sowie einige der zahlreichen noch offenen Fragen dieses neuen Forschungsgebiets sollen im Rahmen dieses Vortrags vorgestellt und erläutert werden.

DY 50.4 Mi 10:45 TU H3010

**Evolution of equilibrium droplets** — ●ANDREAS NUSSBAUMER, ELMAR BITTNER, and WOLFHARD JANKE — Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig, Augustusplatz 10/11, 04109 Leipzig

At the critical temperature  $T_c$  the spin-1/2 Ising model exhibits a phase transition and for temperatures below  $T_c$  there exists a spontaneous magnetisation  $\pm m_0(T)$ . It is well known, that the distribution of the magnetisation  $P(m, T)$  has a double peak-structure divided by a flat valley and that the peaks correspond to the so called “droplet” regime and the valley to the “strip” regime.

Following the analytic work of Leung and Zia [1] we used Monte Carlo (MC) simulations to identify the transition point between the droplet- and the strip regime in two and three dimensions. In both cases the Monte Carlo data was matched with data from the “Surface Evolver”, a software to calculate minimal surfaces providing evidence for the exact transition mechanism.

Furthermore, using similar MC algorithms we observed the evaporation/condensation transition. When properly rescaled, our data confirm the analytical results found in [2], showing the absence of droplets of intermediate size.

[1] K. Leung and R. Zia, Geometrically induced transitions between equilibrium crystal shapes, *J. Phys. A* **23**, 54 4593 (1990).[2] M. Biskup, L. Chayes and R. Kotecky, On the formation/dissolution of equilibrium droplets, *Europhys. Lett.* **60**, 21-27 (1990).

DY 50.5 Mi 11:00 TU H3010

**Vortex Line Percolation in the Three-Dimensional Complex Ginzburg-Landau Model** — ●ELMAR BITTNER, AXEL KRINNER, and WOLFHARD JANKE — Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig, Augustusplatz 10/11, 04109 Leipzig, Germany

Percolation has been used to study phase transitions in various different theories, an example of this is the  $O(2)$  field theory where the percolating objects are vortex lines forming closed networks. In discussing the phase transition of the three-dimensional complex Ginzburg-Landau model, we study a geometrically defined vortex loop network as well as the magnetic properties of the system in the vicinity of the critical point. Using high-precision Monte Carlo techniques we consider an alternative formulation of the geometrical excitations in relation to the global  $O(2)$ -symmetry breaking, and check if both of them exhibit the same critical behaviour leading to the same critical exponents and therefore to a consistent description of the phase transition. Different percolation observables are taken into account and compared with each other.

DY 50.6 Mi 11:15 TU H3010

**Surface melting and partial surface melting in metal clusters** — ●RALPH WERNER and GÜNTER SCHNEIDER — Institut fuer Theorie der Kondensierten Materie, Universitaet Karlsruhe, 76128 Karlsruhe

We investigate the melting transition of small Al clusters by means of the specific heat and bond length fluctuations determined via canonical Monte-Carlo simulations using many-body Gupta potentials [1]. The determination of the fluctuations of individual bonds reveals that additional atoms in clusters with closed shell structures destabilize the surface, which in turn melts at least partially at very low temperatures. The size dependence of the different signatures of the melting is discussed in detail.

[1] R. Werner, submitted to *Eur. Phys. J. B* (2004).

DY 50.7 Mi 11:30 TU H3010

**Profile and Width of Rough Interfaces** — ●MELANIE MÜLLER<sup>1</sup> and GERNOT MÜNSTER<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Max-Planck-Institut für Kolloide und Grenzflächen, 14421 Potsdam — <sup>2</sup>Institut für Theoretische Physik, Universität Münster, Wilhelm-Klemm-Str. 9, 48149 Münster

In the context of Landau theory and its field theoretical refinements, interfaces between coexisting phases are described by intrinsic profiles. These intrinsic interface profiles, however, are neither directly accessible by experiment nor by computer simulation as they are broadened by long-wavelength capillary waves. We apply a blocking procedure, using the block size as a variable cutoff, to separate the small scale intrinsic structure from the large scale capillary wave fluctuations in the Monte Carlo simulated 3D-Ising model. While the capillary wave picture is confirmed on large length scales and its limit of validity is estimated, an intrinsic regime is, contrary to expectations, not observed.

DY 50.8 Mi 11:45 TU H3010

**Calculation of partition functions by measuring distributions of number of components** — ●ALEXANDER K. HARTMANN — Institut für Theoretische Physik, Friedrich-Hund-Platz 1, 37077 Göttingen

A new algorithm is presented, which allows to calculate numerically the partition function  $Z$  for systems, which can be described by arbitrary interaction graphs and lattices, e.g. Ising models or Potts models (for arbitrary values  $q > 0$ ), including random or diluted models. The new approach is suitable for large systems. The basic idea is to measure the distribution of the number of connected components in the corresponding Fortuin-Kasteleyn representation and to compare with the case of zero degrees of freedom, where the exact result  $Z = 1$  is known. As application,  $d = 2$  and  $d = 3$ -dimensional ferromagnetic Potts models are studied, and the critical values  $q_c$ , where the transition changes from second to first order, are determined. Large systems of sizes  $N = 1000^2$  respectively  $N = 100^3$  are treated. The critical value  $q_c(d = 2) = 4$  is confirmed and  $q_c(d = 3) = 2.35(5)$  is found.

DY 50.9 Mi 12:00 TU H3010

**Monte Carlo Simulationen mit optimalen statistischen Ensembles** — ●SIMON TREBST — ETH Zürich

Monte Carlo Methoden, welche es ermöglichen, die Zustandsdichte, Entropie und freie Energie eines klassischen oder quantenmechanischen Systems zu berechnen, simulieren ein statistisches Ensemble, das zu einem breiten Histogramm etwa in der Energie führt. Kürzlich haben wir zeigen können, dass derartige Simulationen erheblich beschleunigt werden können, indem man das simulierte statistische Ensemble optimiert [1]. Im Vergleich zu multikanonischen, flachen Histogramm-Methoden konnte ein Verbesserung um zwei Größenordnungen gezeigt werden.

In diesem Vortrag berichten wir von neuen Anwendungen optimierter statistischer Ensembles. Wir zeigen, wie dichte Lennard-Jones Flüssigkeiten effizient simuliert werden können. Des Weiteren lässt sich der Ansatz auf den viel benutzten "parallel tempering"-Algorithmus erweitern, indem man das simulierte Temperaturset optimiert. Wir zeigen Anwendungen für das 3D Edwards-Anderson Spinglass. Schliesslich berichten wir von Anwendungen auf stark korrelierte, quantenmechanische Systeme.

[1] S. Trebst, D. A. Huse, und M. Troyer, Phys. Rev. E 70, 046701 (2004).

DY 50.10 Mi 12:15 TU H3010

**Critical Exponents of 3D Ising Model: Theory and Large-Scale Monte Carlo Simulations** — ●JĒVGENĪJS KAUPUŽS — Univ. Latvia, LV-1459 Riga, Latvia

It is widely believed that the critical exponents of 3D lattice spin models are accurately predicted by the perturbative renormalization group (RG) theory [1]. An alternative analytical method has been developed in [2], where the perturbative RG theory has been criticised and the set of possible exact values of the critical exponents for  $O(n)$  models has been proposed.

Recently [3] some Monte Carlo simulations of 3D Ising model on unusually large lattices (with linear lattice size up to  $L = 410$ ) very close to the critical point have been performed to verify the critical exponents.

We have improved the accuracy of our previous simulations and have extended them to  $L = 512$ . The magnetization at reduced temperatures  $t \sim 0.00006$  have been considered. It shows that the critical exponent  $\beta$  deviates above the RG value 0.326 towards our [2] asymptotic value  $3/8$  when approaching the critical point. Generally, our results provide some arguments in favour of the theory developed in [2] and show that previous simulations by Hasenbusch and others relatively far away from criticality give effective rather than asymptotic values of the critical exponents.

[1] J. Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1996

[2] J. Kaupužs, Ann. Phys. (Leipzig) **10**, 299 (2001)

[3] J. Kaupužs, Proceedings of SPIE **5471**, 480 (2004)