

# Der Komplexität auf den Grund gehen

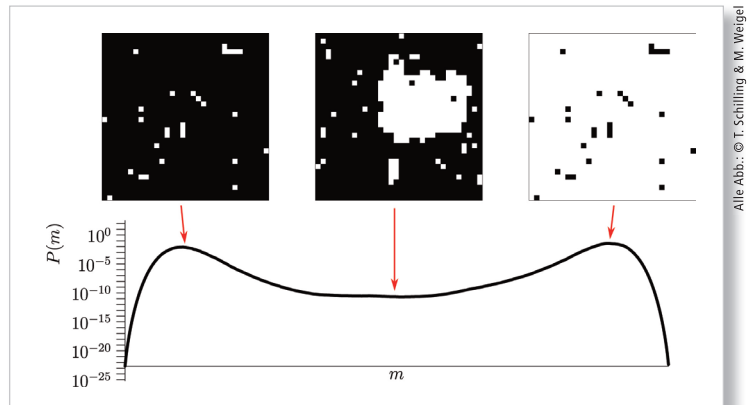
Von Martin Weigel und Tanja Schilling

Die dynamische Entwicklung verfügbarer Rechenleistungen, vor allem jedoch die Konzeption und Weiterentwicklung neuer Simulationsmethoden, versetzt uns erstmals in die Lage, eine Vielzahl von faszinierenden Systemen mit komplexen Energielandschaften mit Computersimulationen untersuchen zu können. Ein besseres Verständnis der Entstehung von Komplexität in Systemen aus einfachen Elementen rückt dann in greifbare Nähe.

Phasenübergänge, wie die Verdunstung von Wasser oder der Verlust der ferromagnetischen Eigenschaften eines Kühlschranks oberhalb einer bestimmten Übergangstemperatur, sind Phänomene, die in der Alltagswelt ebenso wie in technischen Systemen oder in kosmischen Dimensionen häufig auftreten. Entsprechend sind sie von überragender Bedeutung auch für die Wissenschaft. Für den Fall einfacher Substanzen, wie für das Schmelzen und Verdunsten einfacher Flüssigkeiten oder für den Magnetismus (anti-)ferromagnetischer Materialien, sind die zugrundeliegenden Prinzipien der statistischen Physik inzwischen gut verstanden. Die Gleichgewichtseigenschaften solcher Systeme lassen sich daher sowohl mit Hilfe analytischer Rechnungen als auch durch Simulation auf Computersystemen im Detail studieren. Schwieriger wird es, wenn man den genauen Ablauf des Übergangs verstehen will, insbesondere für einen sogenannten Phasenübergang erster Ordnung, wie er etwa bei der Kondensation von Wasser auftritt. Der Übergang findet dann erst deutlich unterhalb der eigentlichen Übergangstemperatur spontan statt. Davor ist das System metastabil, da es zur Realisierung des Übergangs eine kinetische Barriere überwinden muss. Noch dramatischere Effekte ergeben sich bei Systemen mit Unordnung, wo die Dynamik durch eine Vielzahl metastabiler Zustände verlangsamt wird. Die Untersuchung solcher Übergangsphänomene stellt daher weiterhin eine große Herausforderung für die Modellierung am Computer – wie im Übrigen auch für analytische Rechnungen – dar.

## Seltene Ereignisse

Man betrachte etwa einen Ferromagneten, vereinfacht dargestellt durch eine regelmäßige Anordnung von magnetischen Momenten, die jeweils eine von nur zwei Einstellmöglichkeiten realisieren, also „nach oben“ oder „nach unten“ zeigen (Isingmodell). Unterhalb der ferromagnetischen Übergangstemperatur sind bis auf wenige Ausnahmen alle Momente parallel zueinander ausgerichtet. Das Material zeigt daher

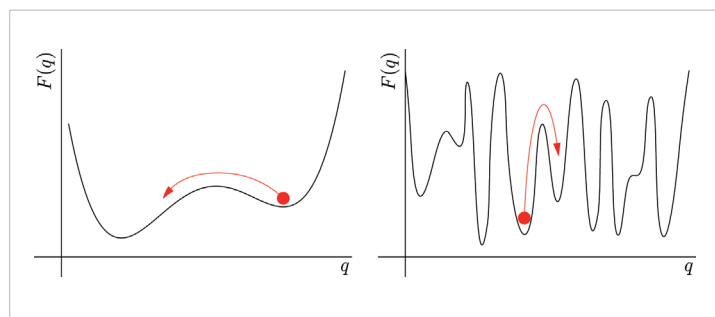


Alle Abb.: © T. Schilling & M. Weigel

makroskopische magnetische Eigenschaften wie wir sie aus dem Alltag kennen (vgl. Abb. 1). Es gibt dann zwei äquivalente Gleichgewichtslagen des Systems, in der die Mehrzahl der Momente entweder gemeinsam nach oben oder gemeinsam nach unten zeigen. Das entspricht den schwarzen und weißen Bereichen in Abbildung 1. Zeigen die Momente nach oben und man legt ein nach unten gerichtetes magnetisches Feld an, so findet ein Phasenübergang erster Ordnung in die Phase mit nach unten gerichteten Momenten statt. Es muss daher Übergangszustände mit einem Tropfen von Momenten der umgekehrten Orientierung geben, wie in der mittleren Konfiguration von Abbildung 1 dargestellt. Solche Zustände sind jedoch gegenüber den Gleichgewichtslagen hochgradig unterdrückt, da ihre (freie) Energie höher ist als die der reinen Phasen. Wie die Wahrscheinlichkeitsverteilung in Abbildung 1 zeigt, kann diese Unterdrückung viele Größenordnungen betragen (man beachte die logarithmische Skala der Ordinate). Es handelt sich daher um seltene Ereignisse, die sowohl in der Natur als auch in einer Computersimulation schwer zu beobachten sind.

Abb. 1: Magnetisches System aus nach oben (schwarz) oder nach unten (weiß) gerichteten magnetischen Momenten. Um von der einen in die andere Phase zu gelangen, muss ein seltenes Ereignis eintreten – hier die Bildung eines Tropfens von umgekehrten Momenten.

Abb. 2: (Freie) Energielandschaften für ein System mit einem einfachen Phasenübergang erster Ordnung (links) und ein komplexes System mit einer Vielzahl von Minima und Barrieren (rechts).



## Computersimulationen

Während sich die Dynamik solcher Systeme im Experiment nur bedingt beeinflussen lässt, erlauben neue Methoden der Computersimulation die präzise Bestimmung der Eigenschaften von seltenen Übergangszuständen. Solche Methoden werden auch in

unserer Arbeitsgruppe in Mainz aktiv weiterentwickelt. Eine klassische Monte Carlo-Simulation erzeugt Konfigurationen des Systems entsprechend der Häufigkeit, mit der sie auch experimentell beobachtet würden. Angesichts von Wahrscheinlichkeitsverteilungen wie der in Abbildung 1 gezeigten, sind die gesuchten Ereignisse aber so selten, dass für größere Systeme in der zur Verfügung stehenden Rechenzeit kein einziges zu beobachten sein wird. Wenn sich das System, wie im linken Teil von Abbildung 2 angedeutet, in einem metastabilen Zustand befindet, wird es also aufgrund der Energiebarriere sehr lange Zeit brauchen, bis es in die thermodynamisch stabile Phase niedrigerer (freier) Energie übergeht. Wenn man am Studium der Übergangszustände interessiert ist, befindet sich das System also fast die gesamte Zeit im „uninteressanten“ Teil des Phasenraums. Mit Hilfe sogenannter multikanonischer Simulationen und verwandter Techniken lassen sich die seltenen Ereignisse dennoch beobachten und hochpräzise vermessen: die Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens wird künstlich angehoben, und zwar unter Umständen um viele Größenordnungen, wobei auf die ursprüngliche Verteilung jederzeit ohne systematische Fehler zurückgerechnet werden kann. In Abbildung 1 würde also das „Tal“ zwischen den reinen Phasen in der Verteilungsfunktion mit diesem Ansatz überbrückt.

### Komplexe Systeme

Problemstellungen von der beschriebenen Art treten in vielen aktuellen Forschungsgebieten auf. So untersuchen wir etwa kolloidale Systeme, also mesoskopische Teilchen von einigen Nanometern bis zu einem Mikrometer Größe, die sich in einem Lösungsmittel aus mikroskopischen Teilchen (Größe von einigen Ångström) bewegen. Solche Systeme sind als Modelle für eine Vielzahl von physikalischen Situationen in Computersimulationen und Experimenten sehr nützlich. Betrachtet man etwa eine Suspension aus stäbchenförmigen Kolloiden, so verhalten sich diese unter bestimmten Umständen wie Flüssigkristalle, das heißt es gibt neben dem ungeordneten (isotropen) und dem kristallinen Zustand auch teilgeordnete Phasen, wie etwa die im linken Teil von Abbildung 3 zu sehende nematische Phase. Dort sind die Stäbchen zwar bezüglich ihrer Richtung, jedoch nicht hinsicht-

lich ihrer Position geordnet sind. Der Übergang von der isotropen in die nematische Phase ist von erster Ordnung, so dass Effekte von Metastabilität und Koexistenz (vgl. Abb. 3) zu beobachten sind.

Während die entsprechenden Übergangszustände mit konventionellen Simulationsmethoden nicht mit vertretbarem Aufwand untersucht werden können, erlauben verallgemeinerte Methoden vom Typ der multikanonischen Simulationen eine genaue Bestimmung der Landschaft der (freien) Energie. Das Ergebnis einer solchen Simulation ist in Abbildung 4 veranschaulicht, wo die freie Energie als Funktion der Anzahl der Stäbchen (bei konstantem Volumen) und der Ausprägung nematischer Ordnung dargestellt ist. Dies entspricht einer logarithmischen Darstellung der Wahrscheinlichkeiten. Man erkennt also, dass die Übergangszustände auf dem Sattel zwischen den Hügeln hochgradig unterdrückt sind.

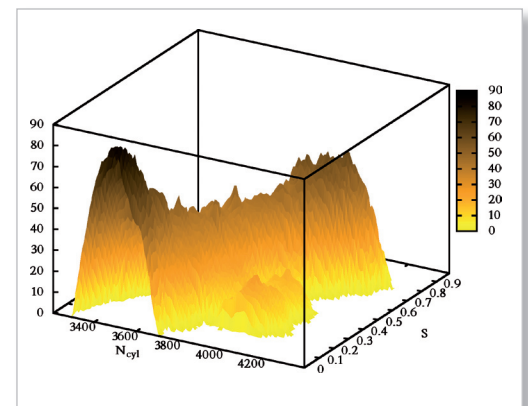
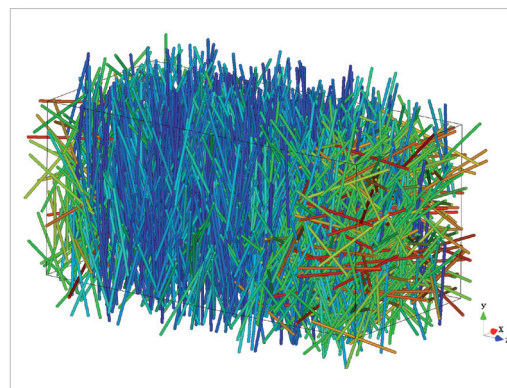
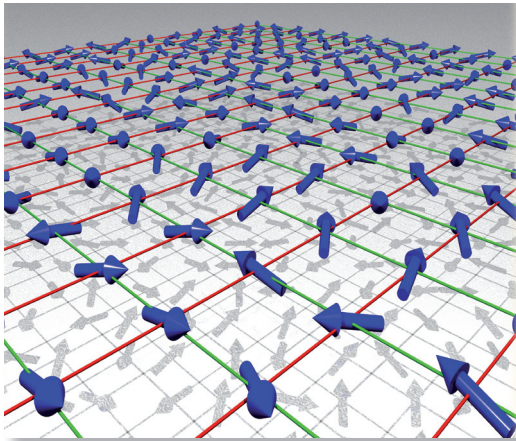


Abb. 4: (Inverse) freie Energie einer Suspension von Stäbchen als Funktion der Zahl der Stäbchen ( $N_{cyl}$ ) und des nematischen Ordnungsparameters ( $S$ ). Der vordere Gipfel entspricht dabei der isotropen und der hintere der nematischen Phase des Systems.

Noch schwieriger ist die numerische Untersuchung von Systemen mit frustrierender Unordnung, wie sie etwa bei magnetischen Systemen mit einer zufälligen Mischung ferromagnetischer und antiferromagnetischer Kopplungen auftritt. Diese Situation ist für viele magnetische Materialien kennzeichnend, etwa auch für eine Reihe von Kandidaten für Hochtemperatursupraleiter. Solche Spinglassysteme zeigen nicht nur einen oder wenige metastabile Zustände wie bei Phasenübergängen erster Ordnung, sondern weisen eine hochkomplexe Landschaft der freien Energie mit einer Vielzahl von Tälern und dazwischenliegenden Energiebarrieren auf; man vergleiche dazu den rechten Graphen in Abbildung 2. Die Anwesenheit widerstreitender Wechselwirkungen im System führt dabei zu Frustrationseffekten, die schließlich in der Vielzahl metastabiler Zustände münden. Bei niedrigen Temperaturen zeigt ein solches System keine langreichweitige Ordnung, wie der Ferromagnet in Abbildung 1, sondern ein Einfrieren der Momente in zufälligen relativen Orientierungen (vgl. Abb. 5).

Abb. 3: Koexistenzkonfiguration der nematischen und isotropen Phase in einer Suspension aus stäbchenförmigen Kolloiden.





### Dr. Martin Weigel

Martin Weigel, Jahrgang 1972, studierte Physik, Philosophie und Betriebswirtschaftslehre an der Johannes Gutenberg-Universität, wo er 1998 mit einer Diplomarbeit zu konformen Skalenrelationen abschloss. Er wurde 2002 bei Prof. Wolfhard Janke in Leipzig über Zufallsgeometrien in der statistischen Physik und Quantengravitation promoviert. Er wechselte dann als Postdoc an die University of Waterloo und 2005 mit einem Marie Curie-Stipendium der EU nach Edinburgh. Seit 2008 leitet Martin Weigel eine Nachwuchsgruppe im Emmy Noether-Programm, die sich mit der statistischen Physik ungeordneter und frustrierter Systeme befasst. Derzeit vertritt er einen Lehrstuhl für theoretische Physik an der Universität des Saarlandes.

Abb. 5: In einem Spinglas sind die magnetischen Momente bei tiefen Temperaturen in zufälligen relativen Orientierungen eingefroren.

Dabei führt die Existenz vieler solcher metastabiler Konfigurationen mit ähnlichen Energien zu interessanten dynamischen Phänomenen, wie etwa Gedächtnis- und Verjüngungseffekten. Für die Untersuchung solcher Systeme mit Computersimulationen ist der Einsatz moderner Simulationstechniken, wie der multikanonischen Verfahren, schon zur Untersuchung der reinen Phasen erforderlich. Denn diese entsprechen, gemäß der Skizze in Abbildung 1, der Überlagerung einer Vielzahl von metastabilen Zuständen.

### Ausblick

Ein komplexes und reichhaltiges Spektrum von Effekten ist für Systeme aus einfachen Bausteinen in der Physik der kondensierten Materie eher die Regel als die Ausnahme. Computersimulationen erlauben die Forschung an vereinfachten Systemen ebenso wie an realistischen Modellen und machen viele Aspekte ihres Verhaltens erst der Untersuchung zugänglich. Ein ergiebiger Begriff zum Verständnis solcher Systeme ist das Konzept der Energielandschaft, das von Situationen mit zwei oder wenigen Tälern bis zu hochkomplexen Strukturen in Anwesenheit von frustrierenden Wechselwirkungen reicht. In Mainz begegnen wir der Herausforderung solch komplexer Energielandschaften durch die Weiterentwicklung neuartiger Simulationsmethoden. Mit ihnen lassen sich seltene Ereignisse häufig machen und damit im Detail studieren.

### Summary

A large number of condensed matter systems, ranging from spin glasses over biopolymers to colloids, show complex behavior resulting from competing interactions and effects of geometric competition. Statistical physics explains these observations in terms of studying the arrangement of favorable and unfavorable configurations of such systems which is known as the „energy landscape“. New algorithms allow for a much more efficient investigation of such problems using computer simulations.



### PD Dr. Tanja Schilling

Tanja Schilling, Jahrgang 1974, studierte Physik in Frankfurt am Main. Sie erhielt 1997 ihr Diplom für eine Arbeit über theoretische Kernstrukturphysik. 2001 wurde sie in Köln promoviert. In ihrer Doktorarbeit beschäftigte sie sich mit den Benetzungseigenschaften von Flüssigkeitsgemischen. Danach verbrachte sie drei Jahre als Postdoc mit einem Marie Curie-Stipendium der EU in Amsterdam. Seit 2004 leitet Tanja Schilling eine Emmy Noether-Gruppe an der Universität Mainz, in der Materialeigenschaften weicher kondensierter Materie mittels Computersimulation untersucht werden. Im Jahr 2007 wurde Tanja Schilling habilitiert.

### Kontakt

Dr. Martin Weigel  
 Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
 Institut für Physik  
 Staudinger Weg 7  
 D-55099 Mainz  
 Tel. +49(0)6131-3922581  
 Fax +49(0)6131-3927230  
 Email: weigel@uni-mainz.de  
<http://www.cond-mat.physik.uni-mainz.de/~weigel/>