

Zeit ist Geld Rechenzeit erst recht!

Jürgen Schnack

Fakultät für Physik – Universität Bielefeld
<http://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/>

Herbstakademie, 3., 4. & 5. September 2008

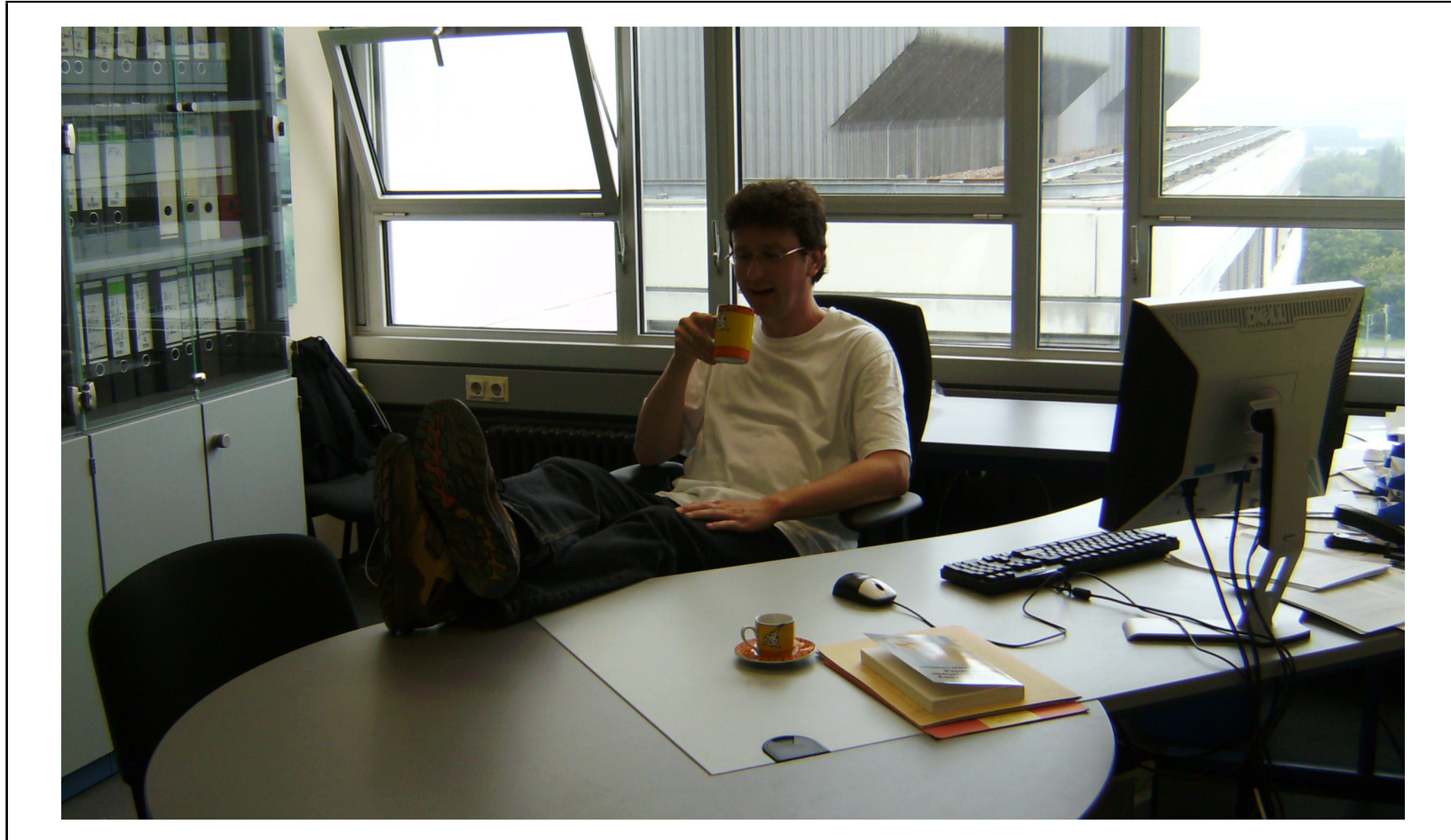
Inhalt



1. Was machen theoretische Physiker eigentlich so den ganzen Tag?
2. Wie integriert man, wenn's eigentlich nicht geht?
3. Die Herren Ising und Metropolis
4. Wofür ist das alles gut?
5. Ohne Quantenmechanik geht nichts!
6. Magnetische Moleküle als Speicher?

Was machen theoretische
Physiker eigentlich so
den ganzen Tag?

Theoretiker I



Theoretiker II



Theoretiker III



Theoretiker IV

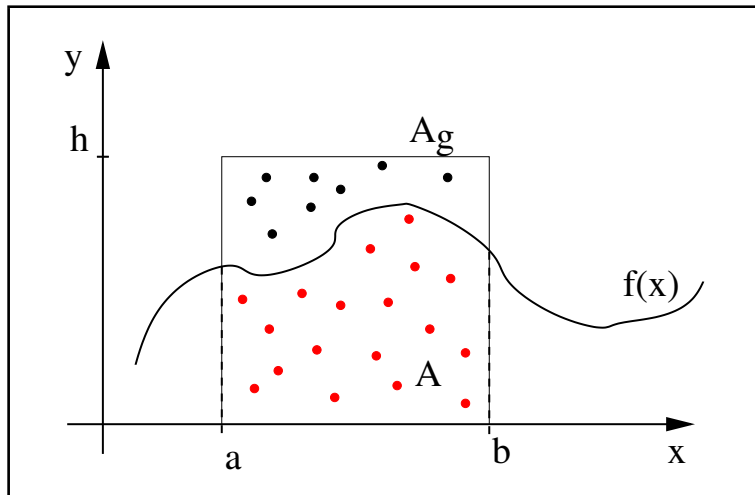


Und sonst?

Zum Beispiel Integrieren

Wie integriert man,
wenn's eigentlich nicht geht?

Wie integriert man, wenn's eigentlich nicht geht?

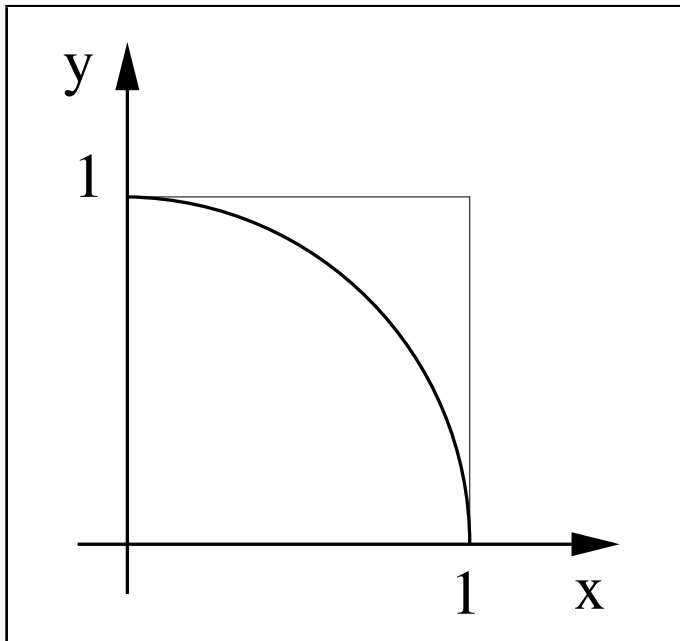


- Durch Auszählen (Archimedes) – zu langsam!
- Durch Auswürfeln (Monte Carlo) – prima!
- Würfel = Computerprogramm

Wir schreiben ein Computerprogramm, das zufällig N_g Punkte in das Rechteck der Fläche A_g wirft. Davon landen N in der Fläche, die wir berechnen wollen. Dann gilt

$$A \approx \frac{N}{N_g} A_g .$$

Kann man π auswürfeln?

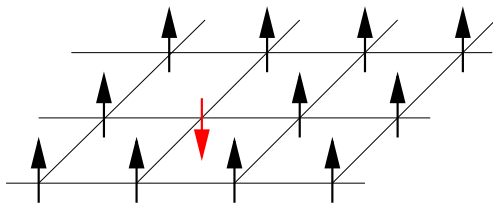


- Funktion $y = \sqrt{1 - x^2}$ beschreibt Viertelkreis im 1. Quadranten.
- Fläche $A = \pi r^2 / 4$ mit $r = 1$.
- Würfel zufällige Punkte in das Quadrat, das den Viertelkreis umschreibt.

Wieder sei N die Anzahl der Punkte, die in der gesuchten Fläche A landen. Die Gesamtzahl sei N_g . Die Fläche des Quadrats ist $A_g = 1$. Dann erhalten wir

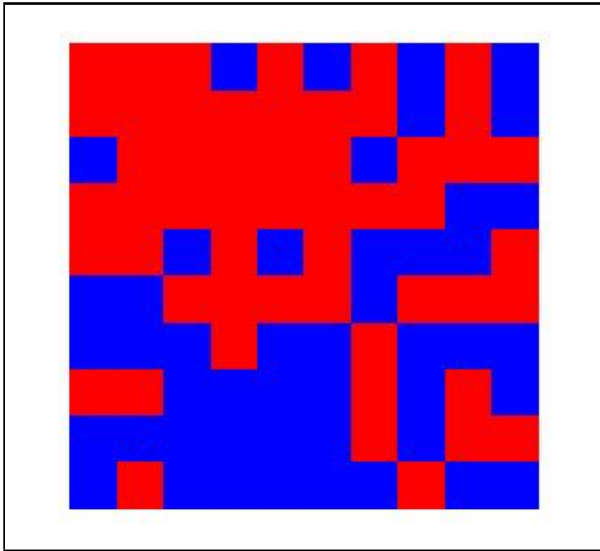
$$\pi \approx 4 \frac{N}{N_g}.$$

Die Herren Ising und Metropolis I



- Einfaches Modell des Ferromagnetismus.
- In einem Magneten können die „Magnetnadeln“ nur nach oben oder nach unten zeigen.
- Die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn bevorzugt Gleichrichtung.
- Eindimensionales Modell: analytisch gelöst, kein Phasenübergang (Ising verläßt Physik).
- Zweidimensionales Modell: analytisch gelöst, Phasenübergang.

Die Herren Ising und Metropolis II

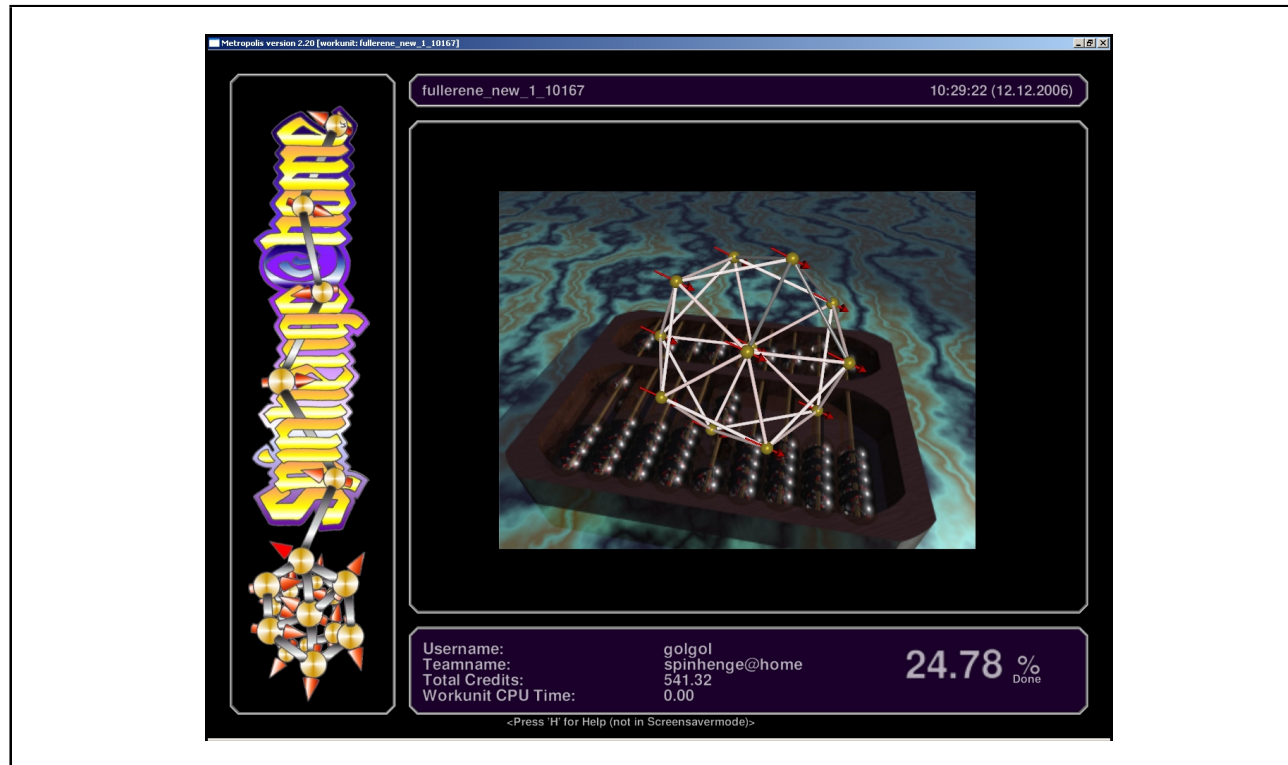


- Wie verhält sich der Ising-Ferromagnet als Funktion der Temperatur?
- Bei kleinen Temperaturen sollte er magnetisch sein, d.h., die Mehrheit der Magnetnadeln sollte in dieselbe Richtung schauen.
Bei großen Temperaturen sollte er unmagnetisch sein, d.h., die Magnetnadeln zeigen statistisch gleichverteilt nach oben und unten.
- Übergang ist ein Phasenübergang bei einer bestimmten Temperatur T_c .

Metropolis-Algorithmus: statt aller Terme einer Summe nehme ich nur zufällig ausgewählte Terme (mit bestimmten Gewichten) mit.
Merke: Auch Summen kann man auswürfeln.

Spinhenge@Home

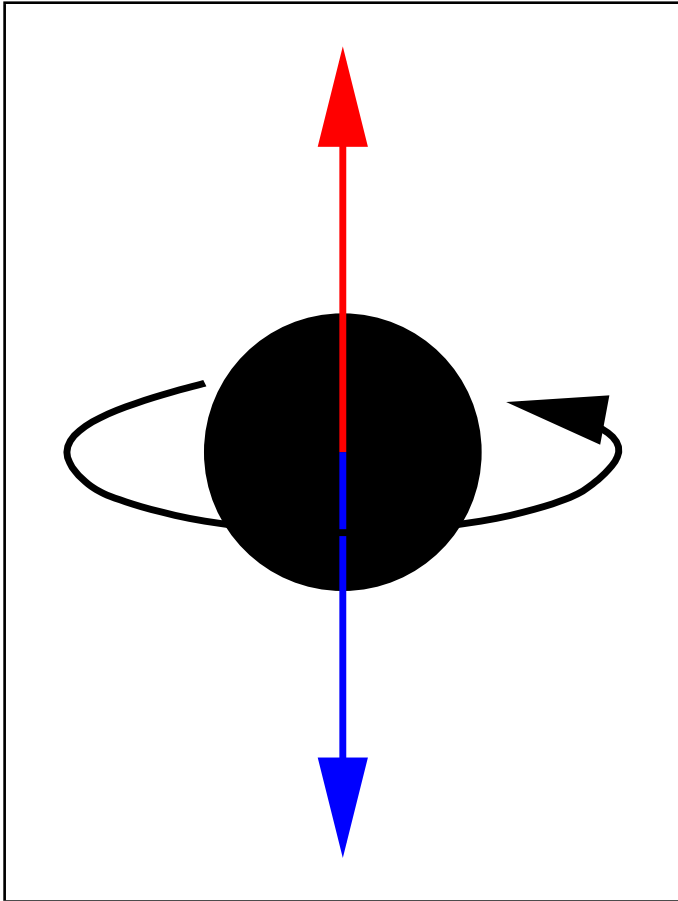
Weltweites Würfeln für die Wissenschaft



Prof. Dr. Christian Schröder; <http://spin.fh-bielefeld.de/>
 58.623 Menschen aus 174 Ländern stellen 128.494 PCs zur Verfügung.
 Theoretische Leistung 214 TFLOPS, realistische Leistung etwa 25 TFLOPS.

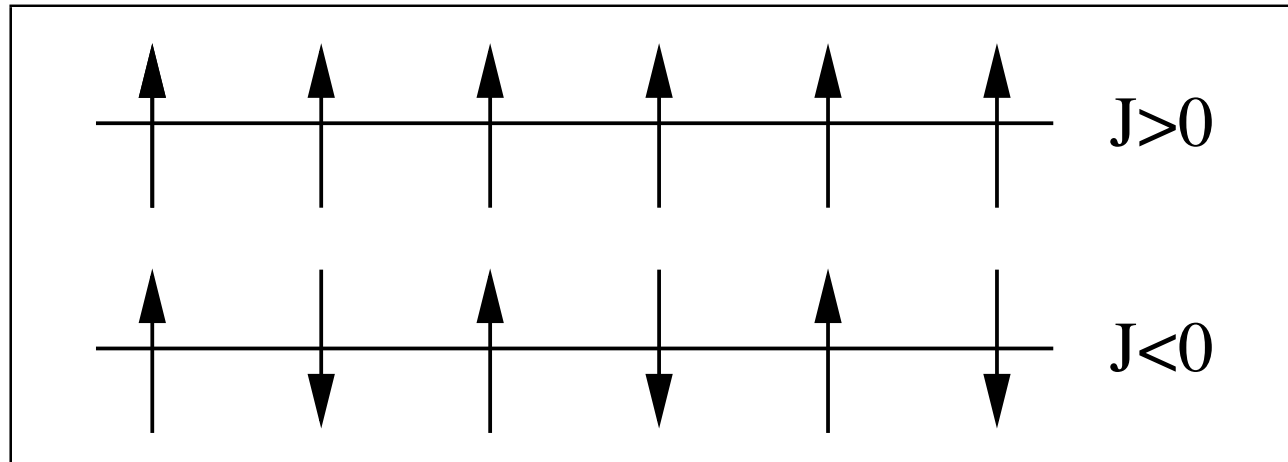
Wofür ist das alles gut?

Magnetismus I



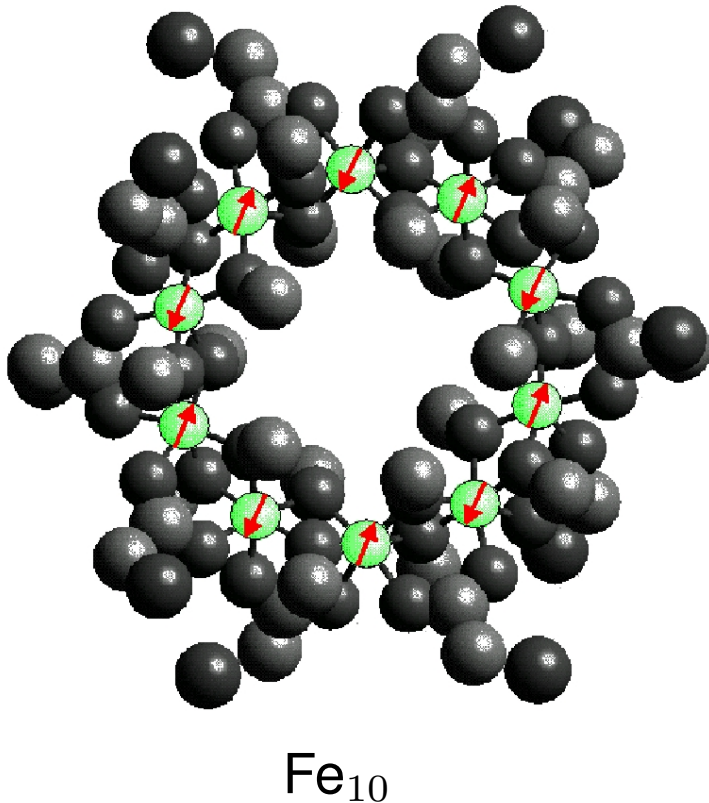
- Modernes Bild vom Magnetismus:
- Kreisströme, z.B. Elektronen im Atom, haben magnetisches Moment.
- Der Spin (Eigendrehimpuls) ist ebenfalls mit einem magnetischen Moment verbunden.
- Magnetische Momente wechselwirken mit Magnetfeldern wie die Kompassnadel mit dem Erdmagnetfeld.

Magnetismus II



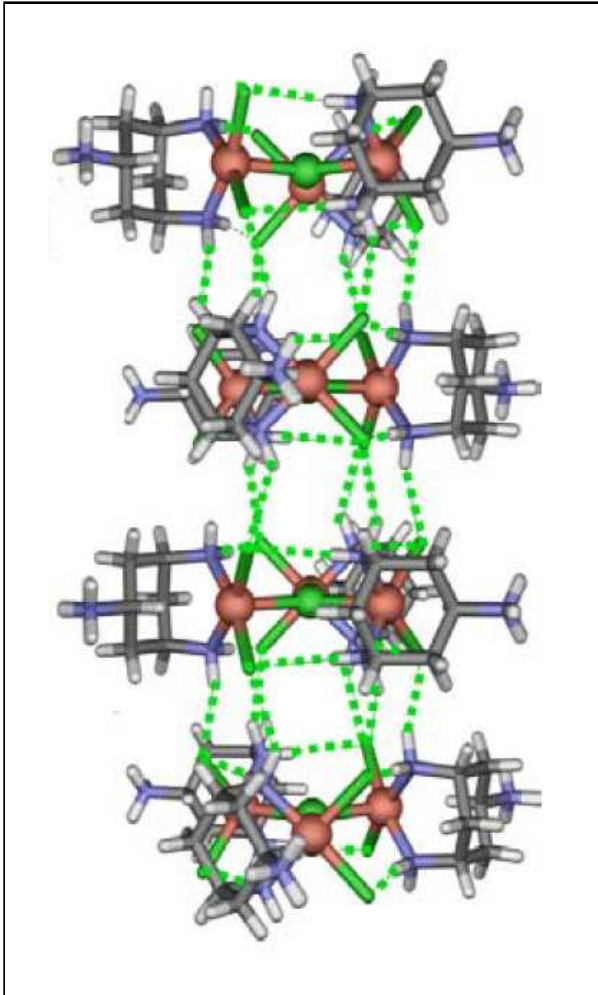
- **Paramagnet:** einzelnes Moment, das sich im Feld ausrichten kann.
- **Heisenberg-Modell:** $\tilde{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}(i) \cdot \vec{s}(j)$
- **Ferromagnet:** gleichgerichtete Momente, $J > 0$.
- **Antiferromagnet:** möglichst entgegengesetzt gerichtete Momente, $J < 0$.
- **Diamagnet:** Material hat kein permanentes Moment, dieses kann aber durch ein äußeres Magnetfeld hervorgerufen werden (siehe fliegender Frosch).

Magnetismus III – Magnetische Moleküle



- Makromoleküle (Polyoxometallate etc.): bestehen aus Bestandteilen wie Wasserstoff (H), Kohlenstoff (C), Sauerstoff (O), diamagnetischen Ionen (z.B. Mo) sowie aus paramagnetischen Ionen wie Eisen (Fe), Chrom (Cr), Kupfer (Cu), Nickel (Ni), Vanadium (V) oder Mangan (Mn);
- Reine organische magnetische Moleküle: hier tragen freie Radikale das magnetische Moment;
- **Spekulative Anwendungen: magnetische Speichertechnik, Einsatz in biologischen Systemen, lichtinduzierte Nanoschalter, Displays, Quantencomputer, ...**

Magnetismus IV – Magnetische Moleküle



- Dimere (Fe_2), Tetraeder (Cr_4), Würfel (Cr_8);
- Ringe, insbesondere Eisenringe (Fe_6 , Fe_8 , Fe_{10} , ...);
- Komplexe Strukturen (Mn_{12}) – erstes magnetisches Molekül (1980);
- „Fußbälle“, genauer Ikosidodekaeder (Fe_{30}) und andere Makromoleküle;
- Ketten und Netze von gekoppelten magnetischen Molekülen, z.B. eine Kupferdreieckskette.

Ohne Quantenmechanik geht
nichts!

Warnung zu den folgenden Folien

„Es ist unmöglich, die Schönheiten der Naturgesetze angemessen zu vermitteln, wenn jemand die Mathematik nicht versteht.
Ich bedaure das, aber es ist wohl so.“

Richard Feynman, Physiker, 1918-1988

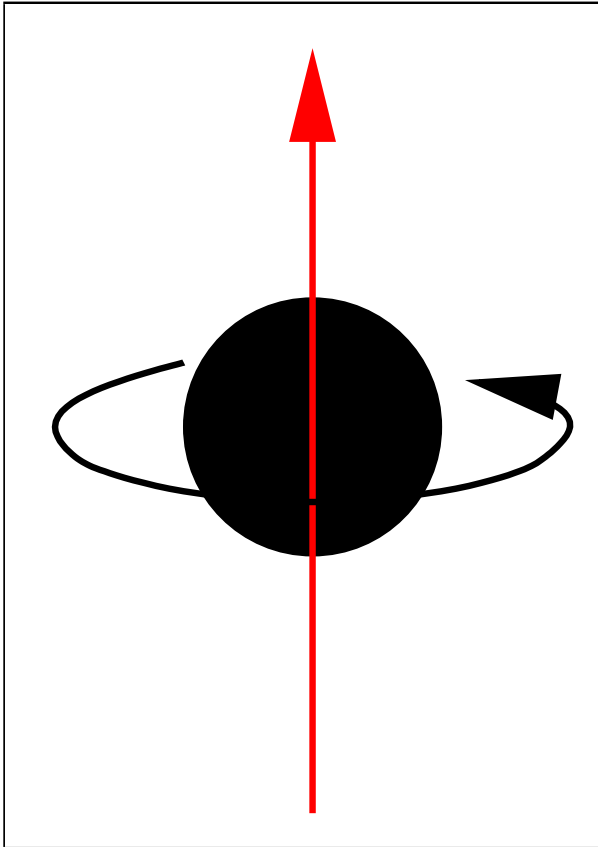
Quantenspins I – Zustände

$$\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Zustände des Quantensystems werden durch Vektoren dargestellt.
Ein Spin $s = 1/2$ lebt in einem zweidimensionalen Vektorraum.

Quantenspins II – Spinoperatoren



$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Operatoren des Quantensystems werden durch Matrizen dargestellt.
Matrizen vermitteln Abbildungen.
Spins sind Vektoroperatoren, also Vektoren von Matrizen.

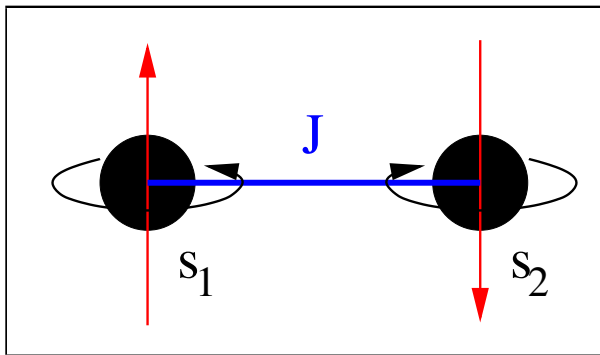
Quantenspins III – Zustände für 2 Spins

$$\begin{aligned} \uparrow\uparrow &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \uparrow\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \downarrow\uparrow &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \downarrow\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zwei Spins von je $s = 1/2$ leben in einem vierdimensionalen Vektorraum.

Hausaufgabe: Wie groß ist der Vektorraum für drei Spins mit $s = 1/2$? Für N ?

Quantenspins IV – Wechselwirkende Spins



$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -\frac{2J}{\hbar^2} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \\ &= -J \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Wechselwirkungsenergie ist wieder eine Matrix.

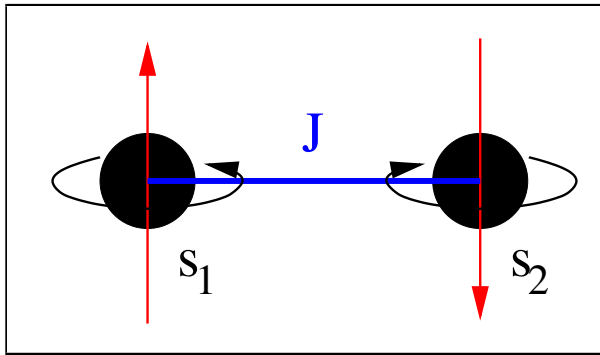
Sie hat die Dimension des Vektorraumes.

Für zwei Spins mit $s = 1/2$ ist das also eine 4×4 -Matrix.

Wir benötigen alle Eigenwerte und Eigenvektoren, um zu verstehen, was das Quantensystem macht.

Jetzt ist Ihnen wahrscheinlich
klar, warum wir soviel Kaffee
brauchen.

Quantenspins V – Antiferromagnetischer Grundzustand

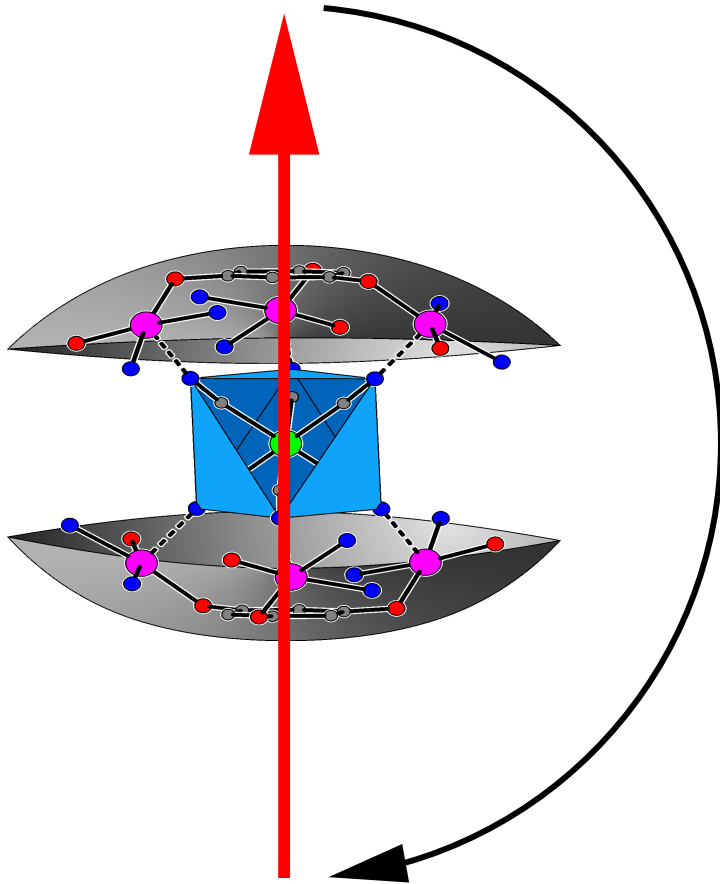


- Antiferromagnetischer Grundzustand:
 $\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow$
- So etwas gibt es klassisch nicht!
Superposition aus $\uparrow\downarrow$ und (gleichzeitig) $\downarrow\uparrow$;

- Grundlage für Quantenkryptographie und Quantencomputer;
- Geschichte: Albert Einstein und Nils Bohr haben sich genau darüber Jahrzehnte lang gestritten.

Magnetische Moleküle als Speicher?

Magnetische Moleküle als Speicher I



- Magnetische Moleküle können einen großen Gesamtspin aufweisen;
- Gesamtspin kann durch Anisotropiebarriere stabilisiert werden;
- Speicher: 1 Molekül = 1 Bit.

ABER . . .



- Gott sei Dank haben wir Computer!
- Zukunft: großartig, 200.000,- € bewilligt
8 ITANIUM TUKWILA (a 4 cores),
512 GB RAM
(eine unglaubliche Leistung)
- 2008:
4 XEON TIGERTON (a 4 cores),
16 GB RAM
- 2007:
4 ITANIUM MONTECITO (a 2 cores),
64 GB RAM
(eigentlich auch schon unglaublich,
aber man kann sich daran gewöhnen ;-)))

Magnetische Moleküle als Speicher III

```

schnack@singlet:~/hpc
File Edit View Terminal Tabs Help
top - 15:50:00 up 35 min, 1 user, load average: 7.72, 7.82, 6.41
Tasks: 132 total, 9 running, 123 sleeping, 0 stopped, 0 zombie
Cpu0 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu1 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu2 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu3 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu4 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu5 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu6 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Cpu7 : 100.0% us, 0.0% sy, 0.0% ni, 0.0% id, 0.0% wa, 0.0% hi, 0.0% si
Mem: 66751936k total, 9873792k used, 56878144k free, 142656k buffers
Swap: 2047872k total, 0k used, 2047872k free, 359040k cached

  PID USER      PR  NI  VIRT  RES  SHR S %CPU  %MEM    TIME+  COMMAND
 5390 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   24:53.33 glanczoshm-dode
 5396 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   24:37.46 glanczoshm-dode
 5397 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   24:52.95 glanczoshm-dode
 5398 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   24:57.60 glanczoshm-dode
 5399 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   25:39.64 glanczoshm-dode
 5400 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   25:10.02 glanczoshm-dode
 5401 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   25:39.93 glanczoshm-dode
 5402 schnack   25   0 15.6g  8.5g 5952 R 99.9 13.4   25:09.29 glanczoshm-dode
    1 root      15   0  5184  2880 2048 S   0.0   0.0    0:14.44 init
    2 root      RT   0     0     0     0 S   0.0   0.0    0:00.00 migration/0
  
```

```

!$omp parallel private(ii) shared(LV, LVNum, LVNorm)
!$omp do
    do ii=1, HMDim
        LV(ii, LVNum) = LV(ii, LVNum) / LVNorm
    enddo
!$omp end parallel
  
```

Wenn das nicht reicht ...



Supercomputer HLRB II am Leibniz-Rechenzentrum in Garching:
SGI Altix 4700, 9.728 Intel Itanium Montecito cores,
peak performance mehr als 62 TFLOPS, 39 TByte RAM

Wenn das auch nicht
mehr hilft:

Papier und Bleistift

(Zeit für eine neue Theorie)

Vielen Dank an meine Mitstreiter weltweit

- T. Englisch, T. Glaser, S. Haas, M. Höck, S. Leiding, A. Müller, Chr. Schröder, B. Soleymanzadeh, J. Ummethum (BI)
- K. Bärwinkel, H.-J. Schmidt, M. Allalen, M. Brüger, D. Mentrup, D. Müter, M. Exler, P. Hage, F. Hesmer, K. Jahns, F. Ouchni, R. Schnalle, P. Shchelokovskyy, S. Torbrügge & M. Neumann, K. Küpper, M. Prinz (UOS);
- M. Luban, D. Vaknin (Ames Lab, USA); P. Kögerler (RWTH, Jülich, Ames)
J. Musfeld (U. of Tennessee, USA); N. Dalal (Florida State, USA);
R.E.P. Winpenny (Man U, UK); L. Cronin (U. of Glasgow, UK);
H. Nojiri (Tohoku University, Japan); A. Postnikov (U. Metz)
- J. Richter, J. Schulenburg, R. Schmidt (U. Magdeburg);
S. Blügel (FZ Jülich); A. Honecker (U. Göttingen);
E. Rentschler (U. Mainz); U. Kortz (IUB); A. Tennant, B. Lake (HMI Berlin);
B. Büchner, V. Kataev, H. Klauß, R. Klingeler (Dresden)

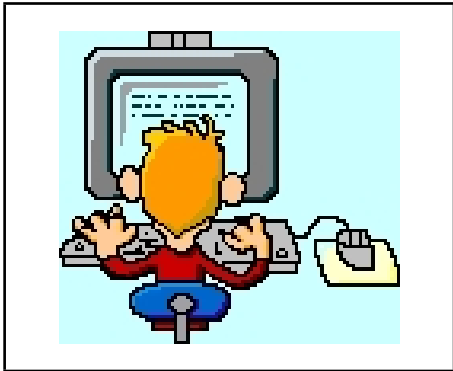
Arbeitsgruppe



Und Ihnen allen:
Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit

(Sie haben's geschafft!)

Nützliche Links



- <http://www.hfml.ru.nl/froglev.html>
- <http://www.tcd.ie/Physics/Schools/what/materials/magnetism>
- http://www.phy.syr.edu/courses/ijmp_c/Ising.html
- <http://www.physik.tu-dresden.de/itp/members/kobe/isingphbl/>
- <http://physics.ucsc.edu/~peter/java/ising/ising.html>
- <http://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/>
- <http://ti.fh-bielefeld.de/ti/vorlesung/swe/schroeder/index.htm>
- <http://spin.fh-bielefeld.de/>