

# Optimale Flusskonfigurationen bei endlichen Vortexdichten

Bachelorarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Bachelor of Science

vorgelegt von  
Hannes Franke  
geboren in Rostock

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund  
2014

1. Gutachter : Dr. Kai P. Schmidt
2. Gutachter : Prof. Dr. Jan Kierfeld

Datum des Einreichens der Arbeit: 10.07.2014

## Kurzfassung

In dieser Arbeit wird die energetisch optimale Anordnung magnetischer Flüsse auf dem Bienenwabengitter betrachtet. Die Flüsse werden durch den Aharonov-Bohm-Effekt erzeugt und verändern die Eigenschaften, wie z.B. Energie, des Bienenwabengitters. Gesucht werden diejenigen Anordnungen, die bei einer gegebenen Flussdichte die geringste Energie besitzen. Hierzu werden zwei verschiedene Algorithmen, der Metropolis- und ein evolutionärer Algorithmus, verwendet.

Für Flussdichten  $\rho \leq 1/3$  wird gezeigt, dass eine regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration mit hoher Wahrscheinlichkeit diejenige der niedrigsten Energie für ein Gitter mit endlicher Flussdichte darstellt. Grundzustands-Konfigurationen für diese Flussdichten, oder solche nahe an ihnen, enthalten daher immer leere Bereiche und solche, die mit der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration gefüllt sind.

Für Flussdichten  $\rho > 1/3$  werden keine regelmäßigen Strukturen beobachtet. Alle Flüsse bilden bei diesen Dichten einen zusammenhängenden, vollständig mit Flüssen besetzten Bereich.

## Abstract

This thesis analyses magnetic fluxes on a 2D honeycomb lattice. The fluxes are created by the Aharonov-Bohm-effect and change the behaviour, e.g. the energy, of the lattice. Here we target those configurations of fluxes with the minimal energy for any given flux-density.

Two different algorithms, a metropolis and an evolutionary algorithm, are used to find those configurations. For flux-densities  $\rho \leq 1/3$  the results indicate that the configuration with the lowest energy is the so-called regular  $1/3$ -configuration. Any configuration near the minimum energy one has areas void of any fluxes and other areas which are filled with the regular  $1/3$ -configuration.

For flux-densities  $\rho > 1/3$  no regular structures are found. Here all fluxes in the honeycomb lattice pile together forming regions with only fluxes and leaving other areas empty.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>IV</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Physik freier Fermionen . . . . .	3
2.2 Das Bienenwabengitter und magnetische Flüsse . . . . .	6
2.2.1 Von Fermionen zu Flüssen . . . . .	6
2.2.2 Darstellung und Nomenklatur . . . . .	8
2.2.3 Flussfreie Konfiguration und $1/3$ -Flussdichte . . . . .	10
<b>3 Methodische Aspekte</b>	<b>11</b>
3.1 Metropolis-Algorithmus . . . . .	11
3.1.1 Funktionsweise . . . . .	12
3.1.2 Simuliertes Abkühlen . . . . .	13
3.1.3 Nicht-konstante Flussdichte . . . . .	13
3.2 Evolutionärer Algorithmus . . . . .	13
3.2.1 Funktionsweise . . . . .	14
3.2.2 Zusammenführen von zwei Gittern . . . . .	15
<b>4 Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>16</b>
4.1 Flussdichte $\rho = 1/3$ . . . . .	18
4.2 Flussdichte $\rho < 1/3$ . . . . .	20
4.3 Flussdichte $\rho > 1/3$ . . . . .	21
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>23</b>
5.1 Übersicht verschiedener Flussdichten . . . . .	23
5.2 Fehlerquellen und Optimierungsmöglichkeiten . . . . .	24
5.3 Weiterführende Fragen . . . . .	24
<b>Quellenverzeichnis</b>	<b>25</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Für die Isolation und erste experimentelle Erforschung von Graphen wurde 2012 der Nobelpreis für Physik an Andre Geim und Konstantin Novoselov verliehen [1, 2]. Graphen ist eine einatomige Lage von Kohlenstoffatomen. Diese sind mit Valenzbindungen so verknüpft, dass sich ein *Bienenwabengitter* bildet. Aufgrund dessen, dass Graphen nur eine Atomlage dick ist, lassen sich viele Eigenschaften von Graphen durch zweidimensionale Modelle theoretisch beschreiben. Das Interessante an Graphen sind hier vor allem seine elektronischen Eigenschaften.

Häufig studiert werden freie Elektronen auf zweidimensionalen Bienenwabengittern bei halber Füllung, d.h. die Hälfte der Plätze des Gitters sind mit Elektronen besetzt. In diesem Fall beschreibt das Modell bei einer Temperatur von 0 K ein Halbmetall. Wird die Dispersionsrelation der Elektronen betrachtet, so fällt auf, dass sie sogenannte Dirac-Kegel enthält. In der Umgebung der Kegel verläuft die Dispersionsrelation linear. Außerdem existieren Impulse, bei denen die Bandlücke der Elektronen zwischen Leitungs- und Valenzband beliebig klein wird.

Ein mögliches Modell, welches für die Beschreibung der Elektronen dienen kann, sind sogenannte *freie Fermionen* auf einem Bienenwabengitter. Im Experiment lassen sich spinlose Elektronen durch ein starkes homogenes Magnetfeld, welches durch das Material gelegt wird, erzeugen. Alle Elektronen-Spins richten sich entlang des Magnetfelds aus und haben ihren Spin-Freiheitsgrad somit quasi verloren. Das hier verwendete Modell unterscheidet nicht zwischen Spin-Up- und Spin-Down-Fermionen. Jede Beschreibung des Modells für reine Spin-Up-Fermionen verhält sich wie eine exakte Kopie eines Modells für Spin-Down-Fermionen. Daher wird im weiteren Verlauf der Arbeit der Spin der Fermionen nicht weiter betrachtet.

Wird in diesem Modell durch eine einzelne Wabe des Bienenwabengitters ein lokales Magnetfeld gelegt, so erhält die Wellenfunktion eines Fermions bei der Bewegung um diese Wabe aufgrund des Aharonov-Bohm-Effekts einen Phasensprung [3]. In dieser Arbeit wird dieser Effekt in umgekehrter Richtung vollzogen. Ein geänderter Parameter im Modell beschreibt einen Phasensprung in der Wellenfunktion eines Fermions. Dieser Phasensprung lässt sich als ein durch eine Wabe gelegtes lokales Magnetfeld, ein magnetischer Fluss, interpretieren. Da solche magnetischen Flüsse die Physik des Systems

beeinträchtigen, sind sie von näherem Interesse.

Freie Fermionen auf Bienenwabengittern wurden schon von Lieb und Kitaev [4, 5] untersucht. Insbesondere bewies Lieb, dass das Bienenwabengitter ohne magnetische Flüsse die niedrigste Energie besitzt [4]. Auf dem Gitter können die magnetischen Flüsse beliebig angeordnet sein. Es stellt sich somit die Frage, welche *Konfiguration* (Anordnung) von magnetischen Flüssen die geringste Energie besitzt, wenn ein bestimmter Teil der Waben des Gitters von magnetischen Flüssen durchsetzt ist. Wie sieht die Grundzustands-Konfiguration für eine bestimmte Flussdichte aus, und gibt es dort periodische Strukturen?

Für eine endliche Flussdichte existieren im thermodynamischen Limes, d.h. für unendlich große Gitter, jedoch unendlich viele Konfigurations-Möglichkeiten. Auch für endliche Gittergrößen steigt die Anzahl der Möglichkeiten binomial mit der Gittergröße. Um diejenige Konfiguration der magnetischen Flüsse zu finden, welche die niedrigste Energie besitzt, müssen demnach Methoden verwandt werden, die den Raum aller möglichen Konfigurationen möglichst effizient absuchen. Hierzu werden der Metropolis- und ein evolutionärer Algorithmus verwandt, da sich herausstellt, dass der Metropolis allein nicht genügt, um Grundzustands-Konfigurationen aufzufinden. Eine schon untersuchte Struktur ist die in dieser Arbeit als *regelmäßige 1/3-Konfiguration* bezeichnete Flussanordnung. Von den von Kitaev untersuchten periodischen Anordnungen hat diese neben dem flussvollen Gitter die niedrigste Energie pro Wabe [5]. Zudem ist die elektronische Bandlücke bei dieser Konfiguration maximal [6].

In Kapitel 2.1 wird auf die Physik der freien Fermionen eingegangen und das hier verwandte Modell vorgestellt. Kapitel 2.2 befasst sich mit dem verwendeten Gitter und den magnetischen Flüssen. Kapitel 3 erläutert die Funktionsweisen des Metropolis- und evolutionären Algorithmus, deren Ergebnisse in Kapitel 4 vorgestellt und diskutiert werden. Kapitel 5 fasst die wichtigsten Ergebnisse zusammen.

# Kapitel 2

## Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel soll die Physik von freien Fermionen und magnetischen Flüssen erklärt werden. Dazu wird der Hamilton-Operator für freie Fermionen vorgestellt und auf Eigenschaften der im Hamilton-Operator vorkommenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eingegangen. Da das System bei halber Elektronenfüllung untersucht werden soll, wird erläutert wie die Energie eines Mehrteilchen-Zustands zu bestimmen ist. Es wird aufgezeigt, aus welchem Grund die Lösung für den Einteilchen-Unterraum genügt, um alle möglichen Eigenwerte des Vielteilchen-Hamilton-Operators zu finden.

Das Bienenwabengitter wird vorgestellt und der Einfluss von lokalen magnetischen Flüssen auf den Hamilton-Operator aufgezeigt. Durch Veränderungen des Hamilton-Operators werden Systeme erzeugt, welche lokale magnetische Flüsse enthalten. Die Eigenschaften dieser Flüsse werden besprochen.

### 2.1 Physik freier Fermionen

Spinlose Fermionen sind Fermionen, deren Spinfreiheitsgrad eingefroren ist. Sie lassen sich im Experiment z.B. in einem Festkörper simulieren, durch den ein starkes homogenes Magnetfeld gelegt wird. Die Spins von Leitungselektronen richten sich entlang des Magnetfelds aus und die Leitungselektronen bilden spinlose Fermionen.

Das in dieser Arbeit verwandte System besteht aus  $N$  Plätzen, welche von Fermionen besetzt werden können, und Verbindungen zwischen den Plätzen, über die sich Fermionen bewegen können. Jeder der Plätze kann aufgrund des Pauli-Verbotes nur von einem Fermion besetzt sein. Der Hamilton-Operator beschreibt die Bewegung der Fermionen über die Verbindung zwischen dem Platz  $i$  und dem Platz  $j$  mittels des Parameters  $t_{i,j}$ .

$$H = \sum_{i,j}^N t_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i). \quad (2.1)$$

$i,j$  = Summe über alle Plätze.

Der Operator  $c_i^\dagger$  ist dabei der Erzeugungsoperator für ein Fermion auf dem  $i$ -ten Platz

und  $c_i$  der entsprechende Vernichtungsoperator. Da es sich um Fermionen handelt, gelten die Anti-Kommutatorrelationen

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{i,j} \quad (2.2)$$

$$\{c_i, c_j\} = 0 \quad (2.3)$$

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0. \quad (2.4)$$

Sei  $|i\rangle$  der Zustand, bei dem ein Fermion auf dem  $i$ -ten Platz sitzt und  $|0_i\rangle$  derjenige, bei dem der  $i$ -te Platz leer ist, so gelten für den Erzeugungs- und Vernichtungsoperator aufgrund des Pauli-Verbots

$$c_i |0_i\rangle = 0 \quad (2.5)$$

$$c_i |i\rangle = |0_i\rangle \quad (2.6)$$

$$c_i^\dagger |0_i\rangle = |i\rangle \quad (2.7)$$

$$c_i^\dagger |i\rangle = 0. \quad (2.8)$$

Die Gleichungen (2.5) bis (2.8) bedeuten, dass nur ein Fermion am Platz  $i$  erzeugt werden kann, wenn dort vorher noch keines war, und es kann nur eines vernichtet werden, wenn schon eines dort war. Eine wichtige Eigenschaft des Hamilton-Operators ist somit, dass er *teilchenzahlerhaltend* ist. Es ist zu beachten, dass ein Mehr-Fermionen-Zustand  $|i,j,k,\dots\rangle$  aus dem leeren Zustand  $|\emptyset\rangle$  erzeugt wird, indem die Erzeugungsoperatoren immer in der gleichen Reihenfolgen angewandt werden. Also z.B.  $|i,j\rangle = c_i^\dagger c_j^\dagger |\emptyset\rangle$  für  $i > j$ , und niemals andersherum.

Der Hamilton-Operator enthält nur kinetische Terme und beschreibt die Bewegung der Fermionen von Platz zu Platz. Anders ausgedrückt „Hüpfen“ die Fermionen. Daher wird der Parameter  $t_{i,j}$  auch *Hüpfparameter* genannt. In dieser Arbeit spielt die Energie eines Systems in einem bestimmten Zustand eine entscheidene Rolle. Es ist daher vonnöten, die Eigenwerte des Hamilton-Operators zu finden.

$$H |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle \quad (2.9)$$

Der gesamte Hilbertraum bei  $N$  Plätzen ist  $2^N \times 2^N$ -dimensional. Es lassen sich jedoch einige Vereinfachungen finden, die die Dimensionalität des zu lösenden Eigenwertproblems erheblich verringern. Eine erste Vereinfachung ergibt sich dadurch, dass der Hamilton-Operator die Fermionenzahl erhält, was bedeutet, dass für eine vorgegebene Anzahl an Fermionen nur ein kleinerer Unterraum des gesamten Hilbertraumes diagonalisiert werden muss. Das Besondere an freien Fermionen ist jedoch, dass sie keine Wechselwirkung aufeinander ausüben. Daher genügt schon die Lösung für ein einziges freies Fermion, um alle Energieeigenzustände des Systems für jede beliebige Anzahl an Fermionen zu finden.

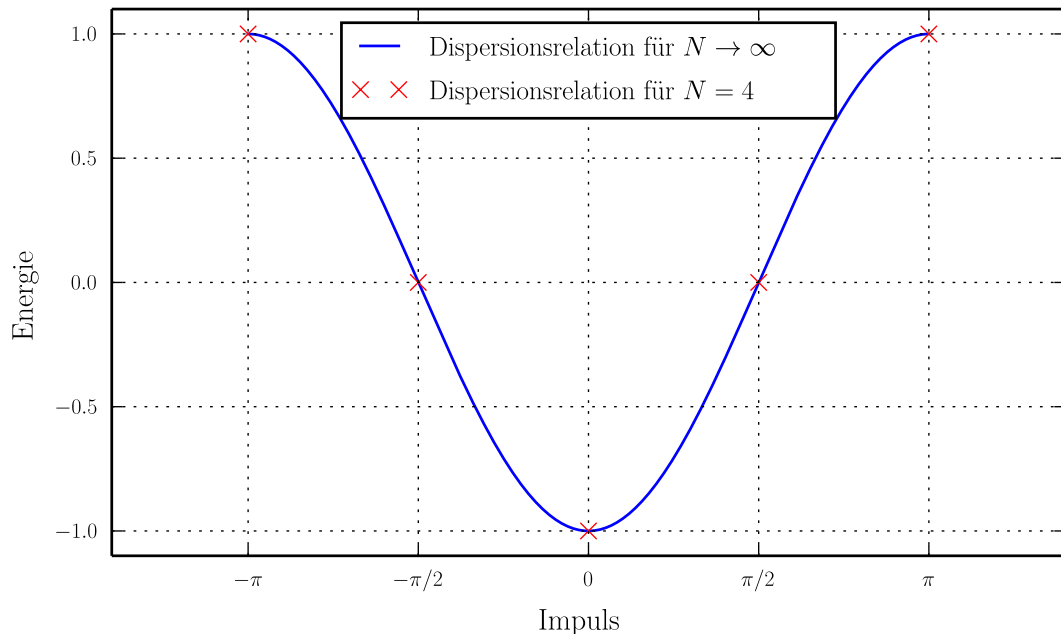
Sind die Eigenwerte  $\epsilon_i$  und die dazugehörigen Eigenzustände  $|i\rangle$  des Einteilchen-Hamilton-Operators gefunden

$$H |i\rangle = \epsilon_i |i\rangle, \quad (2.10)$$



lassen sich daraus die Energien von Zuständen mit mehreren Fermionen berechnen. Eine Energie für einen Zustand aus  $F$  Fermionen bestimmt sich über die Summe von  $F$  Einteilchen-Energien. Das Pauli-Verbot wird dadurch berücksichtigt, dass jede Einteilchen-Energie nur einmal in der Summe vorkommt.

Die Vereinfachung auf den Einteilchen-Unterraum ist anschaulich durch eine Betrachtung der Dispersionsrelation der Fermionen zu verstehen. Zu jedem Fermionenimpuls lässt sich mithilfe der Dispersionsrelation eine bestimmte Energie finden. Aufgrund des Pauli-Verbots können keine zwei Fermionen denselben Impuls tragen. Außerdem ist die Dispersionsrelation für endliche Systeme diskretisiert. Daher ergibt sich die Energie eines Mehrteilchen-Zustands durch verschiedene Kombinationen der Einteilchen-Energien (siehe Abb. 2.1).



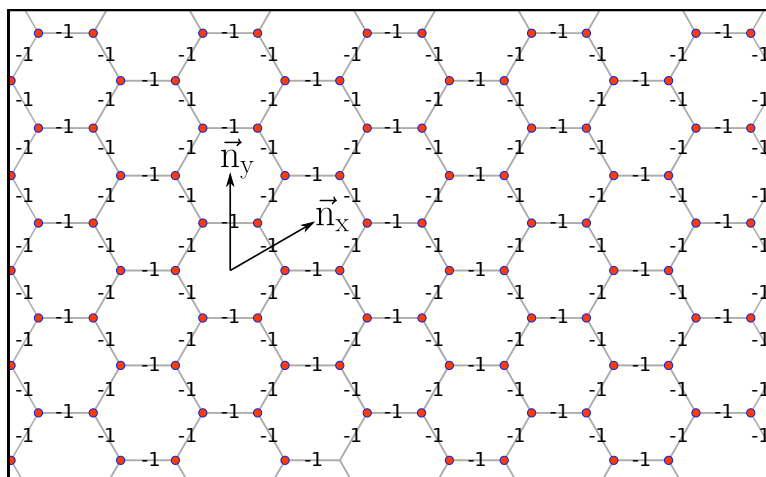
**Abbildung 2.1:** Die kontinuierliche Dispersionsrelation im thermodynamischen Limes (blau) wird für endliche Systeme diskretisiert (rote Kreuze). Verschiedene Energien für  $F$ -Teilchen-Zustände ergeben sich über mögliche Summen von je  $F$  Einteilchen-Energien. Die dargestellten Dispersionsrelationen sind die der periodische Spinkette mit  $N = 4$  Plätzen.

In dieser Arbeit werden periodisch geschlossene Systeme bei *halber Füllung*, d.h. die Hälfte der Plätze im Gitter ist besetzt, bzw.  $F = N/2$ , bei einer Temperatur von 0 K betrachtet. Bei  $T = 0$  K befindet sich das System in Grundzustand. Seine Energie ergibt sich durch Aufsummieren der  $N/2$  kleinsten Einteilchen-Energien  $\epsilon_i$ .

## 2.2 Das Bienenwabengitter und magnetische Flüsse

In diesem Kapitel soll auf das Bienenwabengitter eingegangen werden. Es kann, wie bereits in der Einleitung angemerkt, als Modell für Graphen dienen. Auf dem Bienenwabengitter kann das Vorhandensein von lokalen Magnetfeldern, sog. *magnetischen Flüssen*, modelliert werden. Hierzu werden bestimmte Hüpfparameter  $t_{i,j}$  im Hamilton-Operator (Gl.2.1) verändert. Es wird auf die Entstehung, sowie die Positionierung der Flüsse eingegangen, und eine bestimmte Anordnung von Flüssen, die *regelmäßige 1/3-Konfiguration*, beschrieben.

Der Hamilton-Operator (Gl. 2.1) beschreibt die Energie eines Systems mit  $N$  Plätzen, welche untereinander verbunden sind. Die Verbindungen werden durch den Hüpfparameter  $t_{i,j}$  dargestellt. Im System bewegen sich Fermionen über die Verbindungen von Platz zu Platz. Die Plätze und Verbindungen können bei richtiger Wahl der Hüpfparameter ein Bienenwabengitter bilden. Dabei sind die Plätze jeweils auf den Ecken der einzelnen Bienenwaben angeordnet, und jeder Platz hat drei Verbindungen zu seinen Nachbarn (siehe Abb. 2.2). Hüpfparameter zwischen nicht verbundenen Plätzen haben den Wert  $t_{i,j} = 0$  und werden für den Rest der Arbeit nicht weiter beachtet.



**Abbildung 2.2:** Das Bienenwabengitter mit Basisvektoren  $\vec{n}_x$  und  $\vec{n}_y$ . Plätze sind orangefarben dargestellt, Verbindungen grau und die Hüpfparameter auf ihnen schwarz.

Die von Null verschiedenen Hüpfparameter  $t_{i,j}$  haben zunächst alle denselben Wert (hier  $t_{i,j} = -1$ ). Die endlichen Bienenwabengitter werden an den Rändern periodisch geschlossen.

### 2.2.1 Von Fermionen zu Flüssen

Wird ein lokales Magnetfeld durch eine Wabe gelegt, erhält ein sich um die Wabe bewegendes Elektron aufgrund des Aharonov-Bohm-Effekts [3] einen Phasensprung um den Winkel  $\varphi$ . Im Modell wird die Wellenfunktion des Elektrons beim Bewegen vom

Platz  $i$  zum Platz  $j$  mit dem Hüpfparameter  $t_{i,j}$  multipliziert. Daher lässt sich ein Phasensprung durch den Hüpfparameter auf einer Verbindung darstellen. Es gilt mit der imaginären Zahl  $i$ :  $t_{i,j} = e^{i\varphi}$ . Ein direktes Ändern eines Hüpfparameters beschreibt demnach umgekehrt einen Phasensprung, und damit ein Bienenwabengitter, in welchem durch die Waben mit dem geänderten Hüpfparameter je ein lokales Magnetfeld gelegt ist.

Bei einer Bewegung um eine Bienenwabe „sammelt“ ein Elektron die Vorzeichen der Hüpfparameter auf den Verbindungen ein. Bei einer Beschränkung auf die Hüpfparameter  $-1$  und  $+1$  können nur Phasensprünge von  $0$  und  $\pi$  auftreten (vgl. Abb. 2.3 und 2.4 sowie dazugehörige Gleichungen). Eine Veränderung eines einzelnen Hüpfparameters von  $-1 \rightarrow +1$  entspricht einem Phasensprung von  $\pi$ . In der Interpretation durch den Aharonov-Bohm-Effekt zeigt ein magnetischer Fluss durch die Bienenwabe. Aufgrund des Phasensprungs von  $\pi$  werden solche Flüsse als  $\pi$ -*Flüsse* bezeichnet. Da im Modell die  $t_{i,j}$  entweder  $-1$  oder  $+1$  sind, und demnach keine nicht- $\pi$ -Flüsse vorkommen, werden alle  $\pi$ -Flüsse im Folgenden nur noch als *Flüsse* bezeichnet.

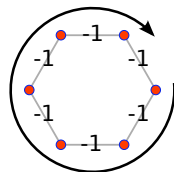
In einer Wabe, deren Hüpfparameter allesamt  $-1$  sind, ist der Gesamt-Hüpfparameter nach einmaligem Umlaufen

$$t_{\text{Wabe}} = \prod_{i=1}^6 (-1) = 1$$

und nach  $1 = e^{i \cdot 0}$

der Phasensprung  $\varphi = 0$ .

Bewegung des Elektrons



**Abbildung 2.3:** Eine Bienenwabe ohne magnetischen Fluss.

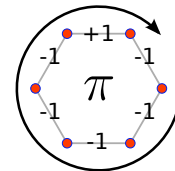
Bei einer Wabe, bei der ein Hüpfparameter von  $-1 \rightarrow +1$  geändert ist, ergibt sich als Gesamt-Hüpfparameter

$$t_{\text{Wabe}} = -1$$

und nach  $-1 = e^{i\pi}$

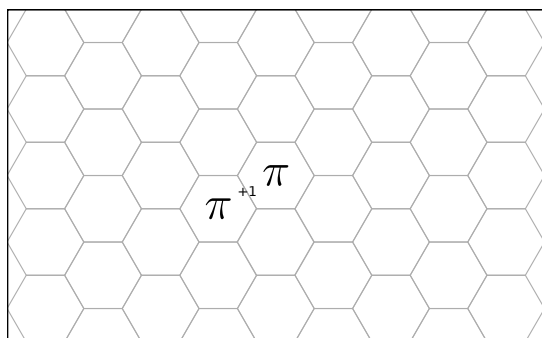
der Phasensprung  $\varphi = \pi$ .

Bewegung des Elektrons

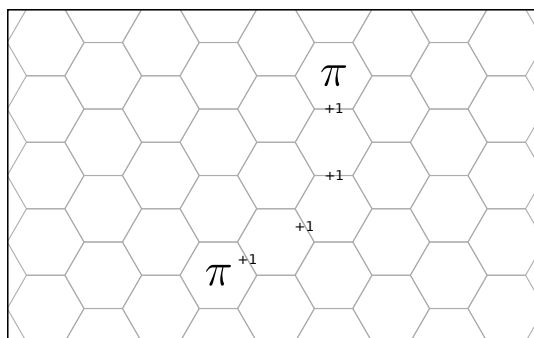


**Abbildung 2.4:** Eine Bienenwabe mit  $\pi$ -Fluss durch einen geänderten Hüpfparameter (oben).

Da sich je zwei Waben eine Verbindung teilen, wird beim Ändern eines Hüpfparameters in beiden Waben ein Fluss erzeugt (siehe Abb. 2.5). Haben zwei Verbindungen derselben Wabe ein von  $-1 \rightarrow +1$  geänderten Hüpfparameter, so ist der Gesamt-Phasensprung  $2\pi$ . In dieser Wabe entsteht somit kein Fluss. Die benachbarten Waben, die nur eine Verbindung mit geändertem Hüpfparameter haben, besitzen jedoch einen Fluss. Mit dieser Technik lassen sich Flüsse an beliebigen Orten erzeugen und auch bewegen, indem sie mit Vorzeichenketten verbunden werden (siehe Abb. 2.6).



**Abbildung 2.5:** Zwei  $\pi$ -Flüsse in zwei Waben, erzeugt durch ein geändertes Vorzeichen des Hüpfparameters an ihrer gemeinsamen Verbindung. Dargestellt ist nur der geänderte Hüpfparameter



**Abbildung 2.6:** Beliebige Positionierung von Flüssen durch Vorzeichenketten. Dargestellt sind nur die geänderten Hüpfparameter

**Hinweis:** Die Beschreibung des Systems findet für den Rest der Arbeit auf dem Level der Flüsse und ihren Anordnungen statt.

Die Fermionen bilden lediglich den Hintergrund, um Flüsse entstehen zu lassen und zur Bestimmung der Energien des Systems. Als effektives Modell werden die Flüsse verwendet, welche als *Quasiteilchen* behandelt werden. Die Auseinandersetzung damit, warum dieses effektive Modell möglich ist, wurde schon in [7] durchgeführt. Hier sei deshalb nur angemerkt, dass die Energie einer Konfiguration nur von der Anordnung der Flüsse abhängt. Es stellt sich die Frage, welche Anordnung die Energie minimiert.

### 2.2.2 Darstellung und Nomenklatur

Es werden verschiedene Begriffe und Darstellungen von Bienenwabengittern benutzt.

- **Flussdichte/Dichte:** Da das Gitter endlich viele Waben hat, können nur eine bestimmte Anzahl an Flüssen auf ihm erzeugt werden. Der Anteil  $\rho = \frac{\text{Anzahl Flüsse}}{\text{Anzahl Bienenwaben}}$  wird als *Flussdichte* bezeichnet.
- **Konfiguration:** Durch die in Kapitel 2.2.1 eingeführte Methode der Vorzeichenketten lassen sich auf dem Bienenwabengitter an beliebigen Stellen Flüsse erzeugen. Eine *Konfiguration* ist die Anordnung von Flüssen auf dem endlichen Gitter.
- **Energie pro Wabe:** Die Energie für ein endliches Bienenwabengitter ist eine extensive Größe, die mit der Wabenanzahl steigt. Um den Einfluss der Konfiguration der Flüsse von dem der Gittergröße zu trennen, wird die Energie einer Konfiguration immer pro Wabe angegeben.
- **Grundzustands-Konfiguration** Diese Konfiguration hat die geringste Energie im Vergleich zu allen anderen Konfigurationen mit derselben Flussdichte. Es können auch mehrere Grundzustands-Konfigurationen existieren. Diese können aufgrund der Symmetrie des Gitters topologisch identisch zueinander sein. Es ist

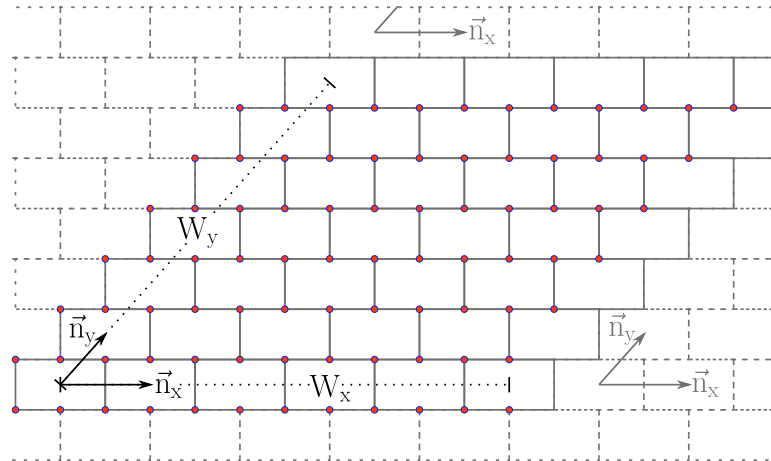
allerdings auch denkbar, dass verschiedene Grundzustands-Konfigurationen existieren, die sehr unterschiedlich aussehen.

Anzumerken ist, dass die Größe des Bienenwabengitters einen Einfluss auf die möglichen Flussdichten hat. Auf dem periodischen Gitter können immer nur zwei Flüsse zugleich gesetzt werden. Da das Gitter eine endliche Größe, und somit eine endliche Anzahl an Waben  $N_W$  hat, sind nur diskrete Flussdichten

$$\rho = \frac{2n}{N_W}, n \in \mathbb{N} \leq \frac{N_W}{2} \quad (2.11)$$

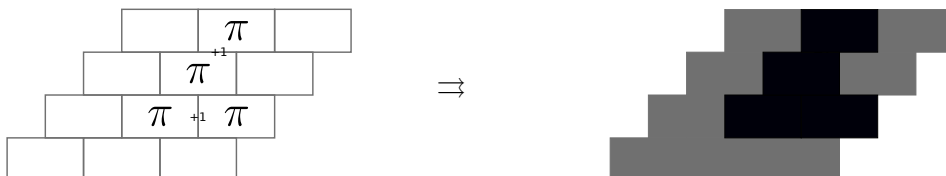
realisierbar.

Zur Abbildung einer bestimmten Konfiguration wird häufig ein gestauchtes Bienenwabengitter, das Backsteingitter (Abb. 2.7), verwandt. Dieses ist topologisch mit dem Bienenwabengitter identisch, ist jedoch einfacher darstellbar.



**Abbildung 2.7:** Das endliche periodisch fortgesetzte Backsteingitter aus  $N_W = W_x \times W_y$  Waben mit Basisvektoren  $\vec{n}_x$  und  $\vec{n}_y$  sowie periodischer Fortsetzung (gestrichelt). Plätze sind orangefarben und Verbindungen grau dargestellt.

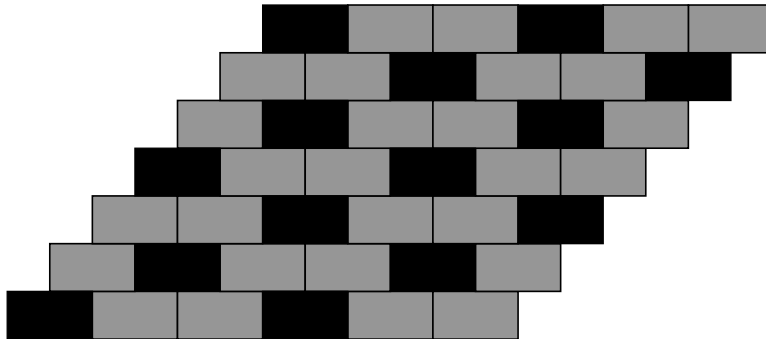
Zudem wird die graphische Darstellung stark vereinfacht, wenn auch die Verbindungen weggelassen und Waben (bzw. „Backsteine“) mit einem  $\pi$ -Fluss in schwarz, Waben ohne Fluss in grau dargestellt werden (siehe Abb. 2.8). Diese Darstellung ermöglicht es, viele Konfigurationen platzsparend nebeneinander zu zeigen.



**Abbildung 2.8:** Schematik der in dieser Arbeit verwendeten Darstellung des Backsteingitters mit Flüssen.

### 2.2.3 Flussfreie Konfiguration und $1/3$ -Flussdichte

Eine interessante Frage ist diejenige, welche Konfiguration von Flüssen bei einer gegebenen Flussdichte die Energie minimiert. Ein flussfreies Gitter ( $\rho = 0$ ) hat bewiesenermaßen die geringste Energie [4]. Neben dem flussfreien Gitter kommt eine besondere Bedeutung der *regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration* zu. Von den von Kitaev untersuchten regelmäßigen Konfigurationen besaß diese eine sehr geringe Energie pro Fluss [5]. Zudem wird die elektronische Bandlücke maximal [6]. Es wird zunächst davon ausgegangen, dass die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration den Grundzustand für  $\rho = 1/3$  darstellt. In Kapitel 4 wird gezeigt, dass diese Vermutung mit hoher Wahrscheinlichkeit richtig ist.



**Abbildung 2.9:** Die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration. Diese Anordnung ist aller Voraussicht nach die Grundzustands-Konfiguration für  $\rho = 1/3$ .

## Kapitel 3

# Methodische Aspekte

Der Raum der möglichen Konfigurationen bei endlicher Flussdichte ist unendlich groß. Bei endlichen Systemen von endlicher Größe, jedoch binomial mit der Systemgröße wachsend. Um für eine gegebene Flussdichte die Grundzustands-Konfiguration zu finden, müssen Methoden verwandt werden, welche diesen Raum möglichst effizient absuchen. Es werden insgesamt zwei verschiedene Methoden verwendet, die in diesem Kapitel vorgestellt werden. Zunächst wird der Metropolis- und anschließend ein evolutionärer Algorithmus erläutert. Die Einführung des evolutionären Algorithmus ist vonnöten, da sich herausstellt, dass der Metropolis-Algorithmus nicht zuverlässig genug Grundzustands-Konfigurationen findet.

Die Energiemessung für eine bestimmte Flusskonfiguration geschieht über die in Kapitel 2.1 beschriebene Methode. Dazu wird ein Programm geschrieben, welches für diese Konfiguration den Einteilchen-Hamilton-Operator in Matrixform aufstellt. Von dieser Matrix werden mit *exakter Diagonalisierung* alle Eigenwerte bestimmt. Über die Hälfte der kleinsten Eigenwerte wird summiert, um die Energie bei halber Fermionenfüllung und 0 K zu erhalten. Das Ergebnis wird anschließend durch die Anzahl der Bienenwaben im Gitter geteilt, um die Energie pro Wabe zu erhalten (vgl. Kapitel 2.2.2, Punkt „Energie pro Wabe“).

### 3.1 Metropolis-Algorithmus

Der Metropolis-Algorithmus wird meistens für die Simulation von thermodynamischen Systemen verwandt, da er Zustände bei einer Temperatur  $T$  erzeugt, die nach dem Boltzmann-Gewicht verteilt sind [8]. Die Grundidee des Metropolis-Algorithmus ist es, eine Konfiguration durch kleine Fluktuationen dahingehend zu verändern, dass eine neue Konfiguration entsteht. Die Regel für das Annehmen oder Ablehnen der Fluktuationen erzeugt Boltzmannverteilte Konfigurationen. Entscheidend für diese Regel ist die Temperatur  $T$ . Dabei ist diese nicht mit der Temperatur aus Kapitel 2.1, welche die Möglichkeiten des Auffüllens der Dispersionsrelation vorgibt, zu verwechseln. Sie wird daher im Folgenden mit  $T_M$  gekennzeichnet, und beschreibt im physikalischen Analogon die thermische Bewegung der Flüsse auf dem Bienenwabengitter. Die Grundzustands-

Konfiguration wird bei  $T_M = 0$  angenommen.

### 3.1.1 Funktionsweise

Der Metropolis-Algorithmus ist ein iteratives Verfahren mit folgender Iterationsvorschrift:

1. Eine zufällige Startkonfiguration mit einer vorgegebenen Flussdichte  $\rho$  wird erzeugt.
2. Eine zufällige Wabe mit einem Fluss wird ausgewählt
3. Dieser Fluss wird auf eine zufällig gewählte angrenzende Wabe ohne Fluss verschoben. Wenn keine angrenzende flussfreie Wabe existiert, wird der Fluss auf eine zufällig gewählte flussfreie Wabe verschoben. Da Flüsse nur verschoben werden, erhält der Metropolis-Algorithmus die Flussdichte.
4. Die Energie der Konfiguration vor und nach der Verschiebung wird bestimmt, und die Energiedifferenz  $\Delta E$  gemessen. Wenn die Energie geringer geworden ist ( $\Delta E < 0$ ), wird die durch die Verschiebung entstandene Konfiguration in den nächsten Schritt übernommen. Ist die Energie nicht kleiner geworden, wird die Konfiguration nur mit der Wahrscheinlichkeit  $p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T_M}\right)$  übernommen.
5. Wiederholen ab Schritt 2 oder Beenden des Algorithmus nach genügend Iterationen.

Dabei ist die Boltzmann-Konstante  $k_B = 1$  gesetzt, und die schon eingangs erwähnte Temperatur  $T_M$  definiert eine Energieskala für Änderungen an der Konfiguration.

#### Anmerkungen:

- Die Temperatur  $T_M$  wird Anfangs in der Größenordnung der Energieänderung  $\Delta E$  nach Verschieben eines Flusses gewählt.
- Nach Beenden des Algorithmus wird jeweils diejenige Konfiguration mit der geringsten gemessenen Energie ausgegeben. Dies ist aufgrund der meist endlichen Temperatur  $T_M$  nicht notwendigerweise die Konfiguration, die nach der letzten Metropolis-Iteration vorliegt.
- Bei jeder Energiemessung einer Konfiguration muss der Einteilchen Hamilton-Operator diagonalisiert werden. In jeder Metropolis-Iteration ist in Schritt 4 eine Energiemessung vonnöten. Aufgrund dessen ist die Laufzeit des Metropolis-Algorithmus im Wesentlichen durch die Laufzeit der einzelnen Diagonalisierungen bestimmt.



### 3.1.2 Simuliertes Abkühlen

Eine Variante des Metropolis-Algorithmus ist das langsame, konstante Absenken von  $T_M$  (*Cooling-Metropolis*). Naiv kann die Temperatur direkt  $T_M = 0$  gesetzt werden. Dann werden nur Fluktuationen angenommen, welche die Energie absenken. Es stellt sich jedoch heraus, dass der Algorithmus bei  $T_M = 0$  häufig nur eine Konfiguration findet, die ein lokales Energie-Minimum darstellt. In einem lokalen Energieminimum führt jede Verschiebung eines Flusses zur einer Erhöhung der Energie. Durch z.B. zwei hintereinander ausgeführte Verschiebungen ließe sich jedoch eine Konfiguration mit noch geringerer Energie erzeugen. Da nur Änderungen angenommen werden, welche die Energie verkleinern, wird dieses Energieminimum auch nach unendlich vielen Schritten des Algorithmus nicht verlassen. Die entsprechende Konfiguration bildet eine „Sackgasse“. Das langsame Absenken der Temperatur vermeidet diesen Effekt.

### 3.1.3 Nicht-konstante Flussdichte

Eine andere Methode zum Auffinden der Grundzustands-Konfiguration bei einer vorgegebenen Flussdichte  $\rho_{\text{target}}$  ist das schrittweise Erhöhen der Flussdichte  $\rho$  von  $\rho_0 = 0$  um  $\Delta\rho$ , bis  $\rho_{\text{target}}$  erreicht ist. Zwischen dem Hinzufügen von Flüssen werden einige Metropolis-Iterationen durchgeführt. Statt in Schritt 1 eine zufällige Konfiguration zu erzeugen, wird jeweils die vorherige End-Konfiguration geladen und die Flussdichte um  $\Delta\rho$  erhöht. Umgekehrt kann dieser Prozess auch von hohen zu niedrigen Flussdichten vollzogen werden. Die Temperatur  $T_M$  wird dabei konstant gehalten und relativ niedrig gewählt. Dadurch werden vor allem die neu hinzugefügten Flüsse (deren Verschiebung möglicherweise die größte Energieänderung hervorruft) auf dem Gitter verschoben.

Durch dieses Verfahren sind die verschiedenen Konfigurationen einer Dichte jedoch mit denen bei einer geringeren/höheren Flussdichte korreliert und es ist nur schwer möglich, Grundzustands-Konfigurationen zu finden, die sich bei verschiedenen Dichten stark unterscheiden. Dadurch ist diese Variante ungeeignet, die Grundzustands-Konfiguration für beliebige Dichten zu bestimmen. Vor allem bei mittleren Flussdichten sind Probleme zu erwarten, da sich die Korrelationen dort am stärksten aufsummieren.

## 3.2 Evolutionärer Algorithmus

Da der in Kapitel 3.1 vorgestellte Metropolis-Algorithmus genügt nicht, um für beliebige Flussdichten Grundzustands-Konfigurationen zu finden. Daher wird ein weiterer Algorithmus vorgestellt, der *evolutionäre Algorithmus*.

Die Grundidee eines evolutionären Algorithmus ist es, mit Hilfe einer Analogie zu den in der Natur wirkenden Kräften der Evolution ein bestimmtes Ziel, in diesem Fall das Auffinden einer Grundzustands-Konfiguration, zu erreichen. Hier wird dabei aus je zwei Konfigurationen durch *Zusammenführen* eine neue Konfiguration erzeugt, die einige Eigenschaften der Alten übernimmt. Durch das Erzeugen von vielen neuen Konfigurationen und anschließende Auswahl derjenigen, welche die geringste Energie haben,

sinkt die Energie der Konfigurationen mit jeder Iteration des Algorithmus. Nach genügend Iterationen sollten Grundzustands-Konfigurationen vorliegen.

Dieses Verfahren funktioniert nur, da diejenigen Konfigurationen, deren Energie ein lokales Minimum darstellt, zumindest in Teilen die Grundzustands-Konfiguration enthalten. Eine visuelle Begutachtung der in Abb. 4.3 dargestellten Konfigurationen zeigt, dass viele von ihnen in Teilen der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration ähneln. Werden nun zwei Konfigurationen zusammengeführt, so können sie eine Neue bilden, die der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration stärker ähnelt als die beiden Ausgangs-Konfigurationen, und deren Energie somit vermutlich geringer ist.

### 3.2.1 Funktionsweise

Der evolutionäre Algorithmus ist ein iteratives Verfahren, welches in jedem Schritt aus einer Menge an Flusskonfigurationen eine neue Menge erzeugt. Dabei sinkt die Energie der einzelnen Konfigurationen mit jeder Iteration, da nur diejenigen Konfigurationen in den nächsten Iterationsschritt übernommen werden, welche eine geringe Energie haben. Es gilt folgende Iterationsvorschrift:

1. Zu Beginn des Algorithmus werden  $K$  zufällige Ausgangs-Konfigurationen erzeugt.
2. Jede der  $K$  Konfigurationen wird durch einige Iterationen des simulierten Abkühlens verändert, um ein (höchstwahrscheinlich lokales) Energieminimum zu finden.
3. Durch Zusammenführen von je zwei der  $K$  Konfigurationen wird eine neue Konfiguration erzeugt. *Eine genaue Erläuterung des Zusammenführens folgt in Kapitel 3.2.2.* Es werden insgesamt  $M$  neue Konfigurationen von jeweils verschiedenen der  $K$  Ausgangs-Konfigurationen erzeugt. Diese stehen zur Auswahl für die nächste Iteration des Algorithmus.
4. Die Energie der  $M$  neuen Konfigurationen wird gemessen. Die  $K - M$  mit der höchsten Energie werden verworfen, sodass  $K$  Konfigurationen übrigbleiben.
5. Der Prozess wird ab Schritt 2 wiederholt oder nach genügend Iterationen beendet. Die verbleibenden  $K$  Konfigurationen bilden dabei die neuen Ausgangs-Konfigurationen.

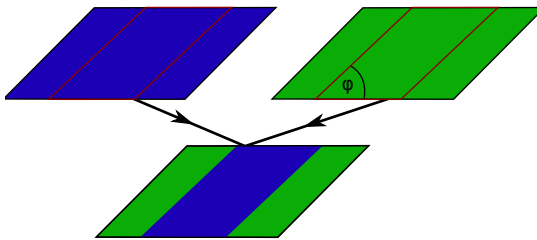
#### Anmerkungen:

- Der evolutionäre Algorithmus bedient sich immer noch des Metropolis-Algorithmus, um die neu generierten Konfigurationen lokal zu verändern. Anders als die lokalen Fluktuationen des Metropolis-Algorithmus, sind durch das Zusammenführen große Änderungen an den Konfigurationen, und damit an ihren Energien, möglich. Die Wahrscheinlichkeit, dass der evolutionäre Algorithmus ein lokales Energieminimum findet, welches nicht mehr verlassen werden kann, ist dadurch geringer.
- Auf die Laufzeit hat der enthaltene Metropolis-Algorithmus den Haupteinfluss, da insgesamt sehr viel mehr Metropolis-Schritte ausgeführt werden müssen, als Energiemessungen von neuen Konfigurationen (in Schritt 4).

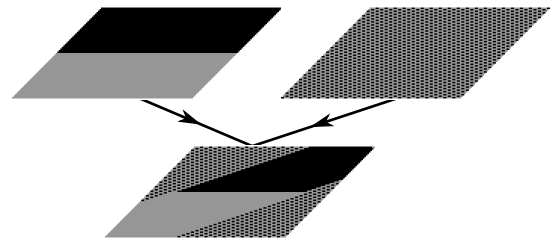
### 3.2.2 Zusammenführen von zwei Gittern

Um aus zwei Konfigurationen eine Neue zu generieren, welche Eigenschaften beider Ausgangs-Konfigurationen enthält, müssen diese auf irgendeine Weise verbunden werden. Hierzu wird durch die Gitter beider Ausgangs-Konfigurationen von einer zufälligen Wabe aus in einem zufälligen Winkel  $\varphi$  ein „Schlauch“ gelegt. Dieser Schlauch bedeckt genau die Hälfte eines Gitters.

Die neue Konfiguration wird erzeugt, indem die Flüsse innerhalb des Schlauchs in der neuen Konfiguration genau an die gleichen Stellen gesetzt werden wie die Flüsse innerhalb des Schlauchs in der ersten Ausgangs-Konfiguration. Umgekehrt für die zweite Ausgangs-Konfiguration im Bereich außerhalb des Schlauchs (siehe Abb. 3.1 und 3.2).



**Abbildung 3.1:** Funktionsweise des Zusammenführens von zwei Konfigurationen im evolutionären Algorithmus. Je eine Hälfte der neuen Konfiguration (unten) stammt aus der blauen bzw. grünen.



**Abbildung 3.2:** Beispiel für das Zusammenführen von zwei Gittern. (hier ist die Flussdichte der beiden Ausgangs-Konfigurationen zur Veranschaulichung unterschiedlich. Ein solcher Fall tritt in der normalen Simulation nicht auf.)

#### Anmerkungen:

- Es sind auch Zusammenführungen möglich, bei der die Ausgangs-Konfigurationen um eine Wabe verschoben sind. Hierzu werden alle Flüsse, die aus der Ausgangs-Konfiguration innerhalb des Schlauchs kommen, um eine Wabe verschoben ausgewählt.
- Da die neu entstandene Konfiguration nicht notwendigerweise die gleiche Flussdichte wie die Ausgangs-Konfigurationen besitzt, werden nach dem Zusammenführen entsprechend viele Flüsse an zufälligen Positionen entfernt bzw. hinzugefügt.
- Im Schritt 3 des Algorithmus werden von je zwei Konfigurationen immer mehrere „Schläuche“ in mehreren Winkeln  $\varphi$  gelegt und neue Konfigurationen erzeugt. Diejenige mit der geringsten Energie wird eine der  $M$  Konfigurationen, welche für die nächste Iteration ausgewählt werden können.
- Aufgrund von numerischen Effekten bei der Diskretisierung des Schlauchs auf die einzelnen Bienenwaben (werden die Waben am Rand des Schlauchs aus der einen oder der anderen Ausgangs-Konfiguration gewählt?) bestimmen die verschiedenen Ausgangs-Konfigurationen manchmal unterschiedlich viele Waben der neuen Konfiguration.

## Kapitel 4

# Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der verschiedenen Algorithmen für bestimmte Flussdichten-Bereiche vorgestellt und diskutiert. Zunächst wird  $\rho = 1/3$  untersucht, da dort die Grundzustands-Konfiguration aller Voraussicht nach die in Abb. 2.9 dargestellte Form hat. Daher werden die Algorithmen an  $\rho = 1/3$  getestet. Es stellt sich heraus, dass der Metropolis-Algorithmus nicht geeignet ist, um Grundzustands-Konfigurationen für hohe Flussdichten aufzufinden. Der Bereich  $\rho > 1/3$  wird demnach nur mit dem evolutionären Algorithmus untersucht.

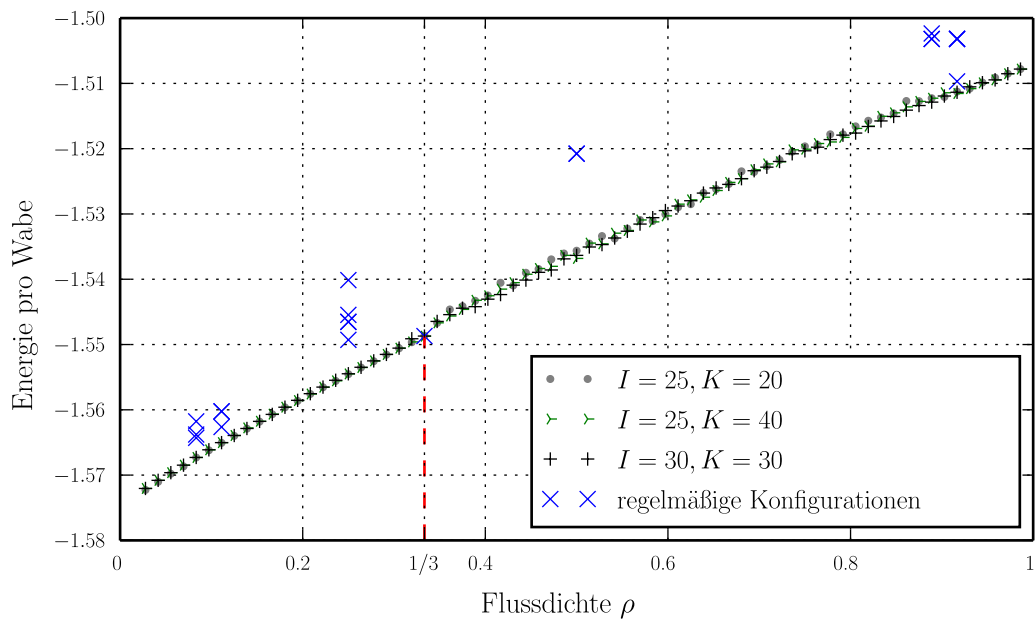
Die in dieser Auswertung verwandten Datensätze werden mit den vorgestellten Algorithmen und folgenden Einstellungen generiert:

1. Mit dem evolutionären Algorithmus werden auf dem  $12 \times 12$  Bienenwabengitter für Flussdichten von  $\rho = \frac{4}{144}$  bis  $\rho = \frac{142}{144}$  in Schritten von  $\Delta\rho = \frac{2}{144}$  Konfigurationen generiert. Pro Flussdichte werden Durchläufe mit je  $K$  Konfigurationen über  $I$  Iterationen in den Kombinationen  $(I = 20, K = 25)$ ,  $(I = 30, K = 25)$  und  $(I = 40, K = 35)$  durchgeführt.
2. Auf dem  $12 \times 12$  Bienenwabengitter wird für  $\rho = 1/3$  mit 60000 Iterationen des Metropolis-Algorithmus mit Hilfe der Methode des simulierten Abkühlens (Kapitel 3.1.2) nach Grundzustands-Konfigurationen gesucht. Dies wird insgesamt für 25 Konfigurationen durchgeführt.
3. Für Flussdichten von  $\rho = \frac{4}{144}$  bis  $\rho = 1/3$  werden auf dem  $12 \times 12$  Bienenwabengitter mithilfe des Metropolis-Algorithmus mit der Methode der nicht-konstanten Flussdichte (Kapitel 3.1.3) Grundzustands-Konfigurationen gesucht. Dabei wird die Flussdichte in Schritten von  $\Delta\rho = \frac{2}{144}$  erhöht. Nach jedem Erhöhen der Flussdichte werden 10000 Metropolis-Iterationen bei konstanter Temperatur  $T_M$  durchgeführt.
4. Für die Flussdichten  $\rho = 2/3$  und  $\rho = 1/2$  wird der evolutionäre Algorithmus angewandt, um Grundzustands-Konfigurationen bei verschiedenen Gittergrößen von  $5 \times 5$  bis  $20 \times 20$  zu finden. Da aufgrund von Gleichung (2.11) nicht jede Flussdichte auf alle Gittergrößen abgebildet werden kann, werden für diese Fälle

die Anzahl der ins Gitter eingefügten Flüsse auf die nächste ganze gerade Zahl gerundet. Für jede Gittergröße wird ein Durchlauf des evolutionären Algorithmus mit  $I = 30$  Iterationen und  $K = 30$  Konfigurationen pro Iteration durchgeführt.

Werden jeweils die niedrigsten Energien aus Datensatz 1 gegen die Flussdichte aufgetragen, entsteht der in Abb. 4.1 dargestellte Graph. Er verläuft im Bereich von  $\rho \leq 1/3$  besonders gleichmäßig, und alle Durchläufe stimmen in den Energien überein. Aus diesem Grund werden drei Dichtebereiche unterschieden:  $\rho < 1/3$ ,  $\rho = 1/3$  und  $\rho > 1/3$ .

Die vermutete Grundzustands-Konfiguration bei  $\rho = 1/3$  hat eine einfache regelmäßige Struktur. Es liegt daher die Vermutung nahe, dass möglicherweise noch andere einfache periodische Strukturen zu finden sind, die eine sehr geringe Energie aufweisen. Um dies zu testen sind in Abb. 4.1 zudem die Energien für einige einfache periodische Strukturen dargestellt, welche auf ein  $12 \times 12$  Bienenwabengitter gesetzt werden können. Außer der schon bekannten regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration ist jedoch die Energie der verschiedenen einfachen periodischen Strukturen immer höher (oft sogar wesentlich höher) als die Energie der mit dem Algorithmus gefundenen Konfigurationen.

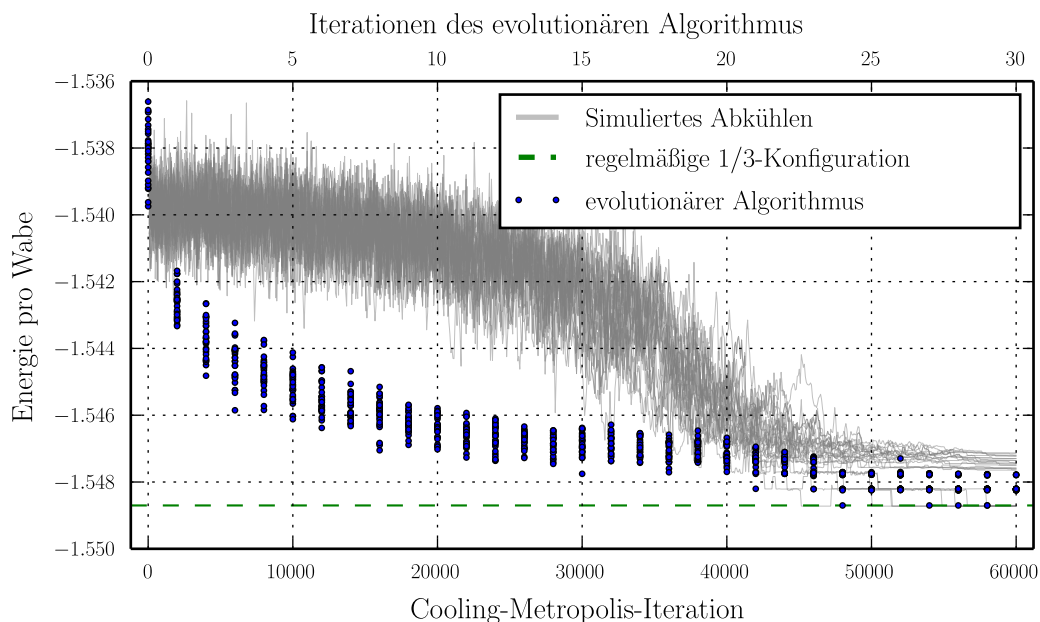


**Abbildung 4.1:** Energie derjenigen Konfiguration mit der geringsten Energie auf dem  $12 \times 12$  Bienenwabengitter bei verschiedenen Flussdichten  $\rho$  nach dem evolutionären Algorithmus mit unterschiedlicher Anzahl an Iterationen  $I$  und Konfigurationen pro Iteration  $K$ . Zum Vergleich sind die Energien einiger regelmäßiger Konfigurationen abgebildet. Auffällig ist, dass die Energie für  $\rho \leq 1/3$  sehr gleichmäßig verläuft.

## 4.1 Flussdichte $\rho = 1/3$

Wie schon in Kapitel 2.2.3 angemerkt, ist die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration aller Voraussicht nach diejenige mit der geringsten Energie für  $\rho = 1/3$ . Diese bekannte Struktur wird daher verwendet, um die verschiedenen Algorithmen zu testen. Um den Metropolis- mit dem evolutionären Algorithmus zu vergleichen, werden die Datensätze 1 und 2 verwendet. Der Vergleich der verschiedenen Datensätze liegt nahe, da jede der 30 Konfigurationen des evolutionären Algorithmus in der Summe 60000 Metropolis-Iterationen durchläuft.

Die Energien der Konfigurationen im Verlauf der Cooling-Metropolis-Iterationen und der Iterationsschritte des evolutionären Algorithmus sind in Abb. 4.2 aufgetragen.

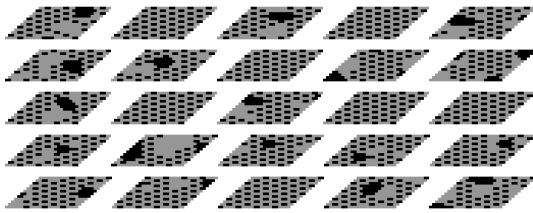


**Abbildung 4.2:** Energien von Konfigurationen auf dem  $12 \times 12$  Bienenwabengitter bei  $\rho = 1/3$ . Die Energien im Verlauf von 60000 Cooling-Metropolis-Iterationen (untere Skala, graue Linien) zeigen, dass viele Durchläufe nur ein lokales Energieminimum finden. Im Vergleich dazu ist die Energie der einzelnen Konfigurationen in jeder von insg. 30 Iterationen des evolutionären Algorithmus (obere Skala, blaue Punkte) aufgetragen. Die Energie ist in den meisten Fällen kleiner als die des Metropolis-Algorithmus. Daher ist der evolutionäre Algorithmus besser geeignet, um Grundzustands-Konfigurationen zu finden. Keine einzige Konfiguration hat eine geringere Energie als die der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration (grün gestrichelte Linie). Ein Hinweis darauf, dass sie für  $\rho = 1/3$  tatsächlich die Grundzustands-Konfiguration darstellt.

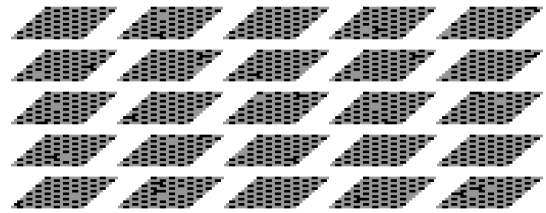
Zu erkennen ist, dass mithilfe des simulierten Abkühlens die vermeintliche Grundzustands-Konfiguration in 7 von 25 Durchläufen gefunden wird. Der evolutionäre Algorithmus findet diese nur 5 mal. Betrachtet man jedoch nicht nur den Grundzustand, sondern auch die anderen Konfigurationen, zeigt sich, dass der evolutionäre Algorithmus besser geeig-

net ist als der Metropolis-Algorithmus. Die Energien derjenigen End-Konfigurationen des evolutionären Algorithmus, die nicht der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration entsprechen, sind insgesamt niedriger als Energien vergleichbarer Konfigurationen nach dem simulierten Abkühlen.

Diese Vermutungen werden bei Betrachtung der Konfigurationen bestätigt. Die Konfigurationen mit den jeweils niedrigsten Energien aus Datensatz 1 und 2, deren Energie in Abb. 4.2 abgebildet ist, sind in Abb. 4.3 bzw. 4.4 dargestellt.



**Abbildung 4.3:** 25 Konfigurationen nach je 60000 Schritten simulierten Abkühlens. Der vermutete Grundzustand mit der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration (vgl Kapitel 2.2.3) wurde 7 mal gefunden, obwohl er eine deutlich niedrigere Energie als die anderen Konfigurationen hat (vgl. Abb. 4.2).



**Abbildung 4.4:** 25 Konfigurationen mit der niedrigsten Energie nach 30 Iterationen des evolutionären Algorithmus. Der vermutete Grundzustand mit der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration (vgl Kapitel 2.2.3) wurde 5 mal gefunden, im Vergleich zu den Konfigurationen nach einer vergleichbaren Anzahl an Cooling-Metropolis-Iterationen (Abb. 4.3) ähnelt der Rest der Konfigurationen allerdings sehr der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration. Meist sind nur ein oder zwei Flüssen an falschen Positionen.

Die End-Konfigurationen des evolutionären Algorithmus (Abb. 4.4) gleichen sich sehr stark. Bis auf ein oder zwei Flüsse, die an anderen Positionen sitzen, sehen sie der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration sehr ähnlich. Es lässt sich folgern, wie die Grundzustands-Konfiguration beschaffen ist.

Das gleiche Verfahren auf diejenigen Konfigurationen aus Abb. 4.3 anzuwenden, die nicht der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration entsprechen, liefert nicht dasselbe Ergebnis. Sie bestehen zum Teil aus der regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration, enthalten allerdings auch Ansammlungen von Flüssen und leere Bereiche. Durch reine Betrachtung der gefundenen Konfigurationen lässt sich keine Aussage treffen, wie die Grundzustands-Konfiguration beschaffen ist. Obwohl die Temperatur  $T_M$  beim simulierten Abkühlen über 60000 Iterationen pro Schritt nur extrem langsam sinkt, kann nicht verhindert werden, dass der Algorithmus in einigen Fällen in eine energetische „Sackgasse“ läuft. Eine mögliche Erklärung ist, dass die Energielandschaft tiefe lokale Minima enthält.

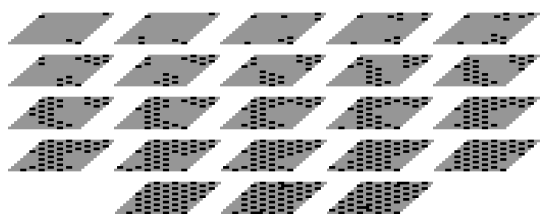
Da nach Grundzuständen bei beliebigen Dichten gesucht werden soll, wird ein Algorithmus benötigt, der diese zuverlässig findet. *Der evolutionäre Algorithmus ist besser geeignet, um Grundzustands-Konfigurationen zu finden als der Metropolis-Algorithmus.*

Dennoch bestärken diese Ergebnisse die in Kapitel 2.2.3 geäußerte Vermutung, dass

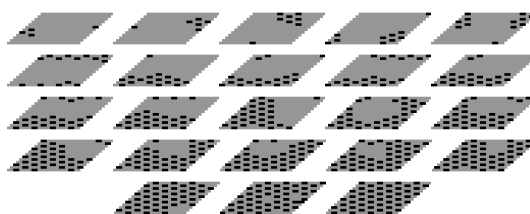
die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration den Grundzustand für  $\rho = 1/3$  bildet. Keine der im Verlauf der verschiedenen Algorithmen gefundenen Konfigurationen hat eine niedrigere Energie als die der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration.

## 4.2 Flussdichte $\rho < 1/3$

Für Flussdichten unter  $\rho < 1/3$  ergeben sich mithilfe des Metropolis-Algorithmus, wenn die in Kapitel 3.1.3 erläuterte Methode der nicht-konstanten Flussdichte angewandt wird, die in Abb. 4.5 abgebildeten Konfigurationen aus dem Datensatz 3. Ähnliche Konfigurationen, welche in Abb. 4.6 dargestellt sind, findet der evolutionäre Algorithmus (Datensatz 1).



**Abbildung 4.5:** Die Konfigurationen mit der niedrigsten Energie, gefunden durch schrittweises Erhöhen der Flussdichte mit 10000 Metropolis-Iterationen pro Dichte für verschiedene Flussdichten  $\rho = \frac{4}{144}, \frac{6}{144}, \dots, \frac{48}{144}$  ( $= 1/3$ ) auf dem  $12 \times 12$ -Bienenwabengitter. Bemerkenswert ist, dass diese Flussanordnungen einem schrittweisen Auffüllen der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration entsprechen. Zudem gleichen die Konfigurationen denen in Abb. 4.6, welche durch den evolutionären Algorithmus generiert wurden.



**Abbildung 4.6:** Die Konfigurationen mit der niedrigsten Energie nach 30 Generationen des evolutionären Algorithmus für verschiedene Flussdichten  $\rho = \frac{4}{144}, \frac{6}{144}, \dots, \frac{48}{144}$  ( $= 1/3$ ) auf dem  $12 \times 12$ -Bienenwabengitter. Auch hier scheint die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration schrittweise aufgefüllt zu werden (vgl. Abb. 4.5).

Es finden sich für Flussdichten  $\rho \leq 1/3$  verschiedene Konfigurationen, die vermutlich Grundzustände darstellen. Für alle Dichten bis  $\rho = 1/3$  bildet sich Bereiche heraus, die der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration entsprechen und Bereiche, die flussfrei bleiben. Da sowohl der Metropolis-Algorithmus mit nicht-konstanter Flussdichte als auch der evolutionäre Algorithmus Konfigurationen dieser Art finden, können sie als Grundzustands-Konfigurationen angesehen werden. Sie entsprechen dem schrittweisen Auffüllen bis auf die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration.

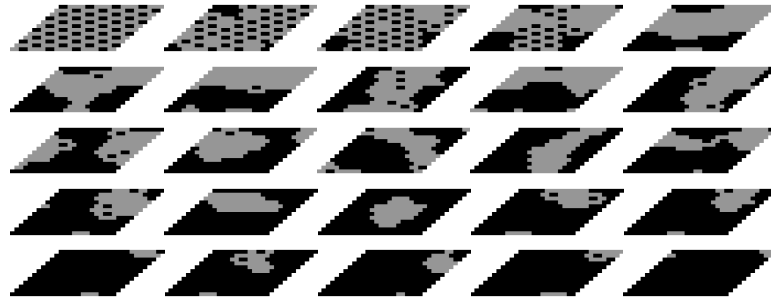
Dieses Ergebnis ist für  $\rho \leq 1/3$  auch zu erwarten, da bewiesen ist, dass das flussfreie Gitter die geringste Energie hat. Wenn nun die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration die nächstniedrige Energie besitzt, werden sich im Gitter freie Bereiche und solche mit der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration herausbilden, genau wie beobachtet. Somit ist auch der gleichmäßige Verlauf für  $\rho \leq 1/3$  in Abb. 4.1 zu erklären. Jeder neu hinzugefügte Fluss liefert einen neuen Beitrag zur Energie. Dieser ergibt sich durch das Einfügen des Flusses



an eine freie Position in der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration. Und dieser Beitrag scheint nahezu konstant zu sein.

### 4.3 Flussdichte $\rho > 1/3$

Für Flussdichten über  $\rho = 1/3$  wird nur noch der evolutionäre Algorithmus verwendet, da der Metropolis-Algorithmus schlechter geeignet ist, um Grundzustands-Konfigurationen zu finden (vgl. Kapitel 4.1). Einige Konfigurationen mit der geringsten Energie aus Datensatz 1 für verschiedene Flussdichten sind in Abb. 4.7 abgebildet. Anders als für Flussdichten  $\rho \leq 1/3$  lassen sich ab  $\rho = \frac{54}{144}$  keine periodischen Strukturen erkennen. Alle Flüsse im Gitter bilden einen zusammenhängenden Bereich. Nur für sehr hohe Flussdichten ist zu bemerken, dass einzelne Flüsse entweder direkt mit anderen verbunden sind oder isoliert stehen.



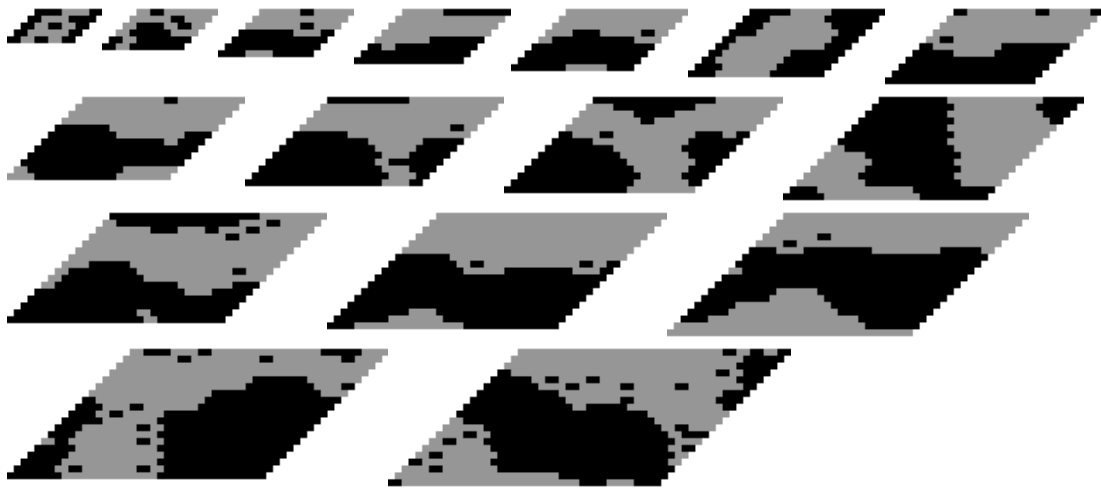
**Abbildung 4.7:** Einige Konfigurationen mit der geringsten Energie nach 30 Iterationen des evolutionären Algorithmus bei Flussdichten  $\rho \geq 1/3$  angefangen von oben links bei  $\rho = \frac{48}{144} (= 1/3), \frac{50}{144}, \frac{52}{144}, \frac{54}{144}, \frac{56}{144}$ , danach mit Lücken. Dargestellt sind nur 25 der 48 gemessenen Flussdichten, da sie sich alle sehr stark ähneln. Es lassen sich außer für Flussdichten sehr nah an  $\rho = 1/3$  keine periodischen Strukturen erkennen.

Es zeigt sich eine Art Phasenübergang von einer Struktur auf eine andere, dessen nähere Untersuchung nicht mehr im Rahmen dieser Bachelorarbeit geschehen kann.

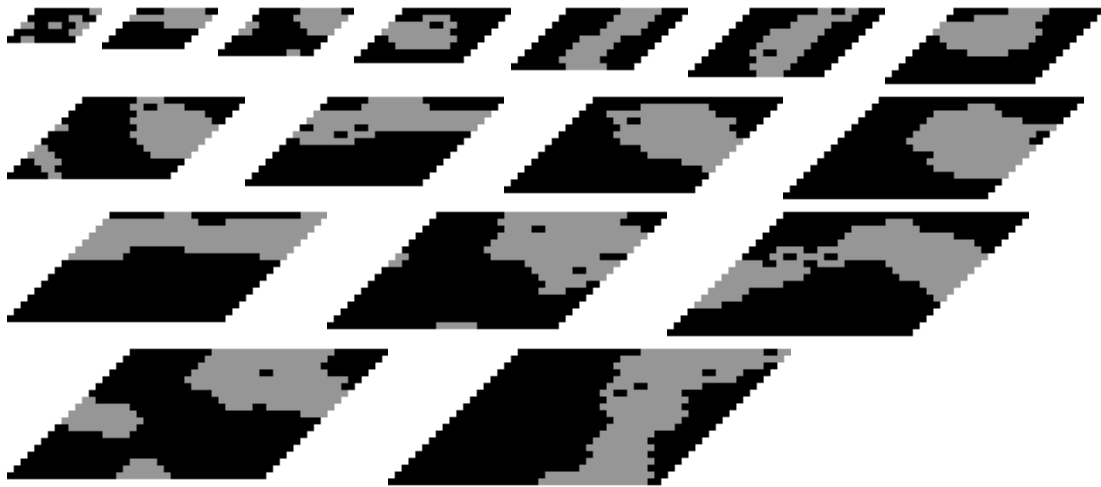
Weitere Analysen werden für die ausgewählten Flussdichten  $\rho = 1/2$  und  $\rho = 2/3$  durchgeführt. Hierfür werden Gitter verschiedener Größe betrachtet, da nicht jede Struktur auf jede Gittergröße abbildbar ist, und dieser mögliche Effekt untersucht werden soll. Verwendet wird demnach Datensatz 4.

Wie in Kapitel 3.2.1 und 3.1.1 erwähnt hängt die Laufzeit des evolutionären Algorithmus vor allem von der Gittergröße ab. Nach Gleichung (2.11) gibt es für Gitter mit  $12 \times 12$  Waben 70 nicht-triviale Flussdichten. Um diese durchzurechnen werden 36 Stunden Rechenzeit benötigt. Eine einzelne Dichte auf einem Gitter der Größe  $20 \times 20$  Waben benötigt dagegen allein 16 Stunden Rechenzeit. Daher werden hier nur zwei Dichten auf mehreren Gittergrößen betrachtet.

Die Konfigurationen mit der geringsten Energie die verschiedenen Gittergrößen aus Datensatz 4 sind in Abb. 4.8 für  $\rho = 1/2$  und in Abb. 4.9 für  $\rho = 2/3$  dargestellt.



**Abbildung 4.8:** Konfigurationen mit der niedrigsten Energie nach 30 Iterationen des evolutionären Algorithmus bei  $\rho = 1/2$  für Gittergrößen von  $5 \times 5$  bis  $20 \times 20$ . Es sind keine periodischen Strukturen erkennbar. Alle Flüsse bilden einen großen, zusammenhängenden Bereich.



**Abbildung 4.9:** Konfigurationen mit der niedrigsten Energie nach 30 Iterationen des evolutionären Algorithmus bei  $\rho = 2/3$  für Gittergrößen von  $5 \times 5$  bis  $20 \times 20$ . Es sind keine periodischen Strukturen erkennbar. Alle Flüsse bilden einen großen, zusammenhängenden Bereich.

Auch hier lassen sich keine periodischen Strukturen erkennen. Eine weitere Analyse von anderen Flussdichten auf verschiedenen Gittergrößen unterbleibt aufgrund der langen Rechenzeit, die diese benötigen würde.

# Kapitel 5

## Zusammenfassung

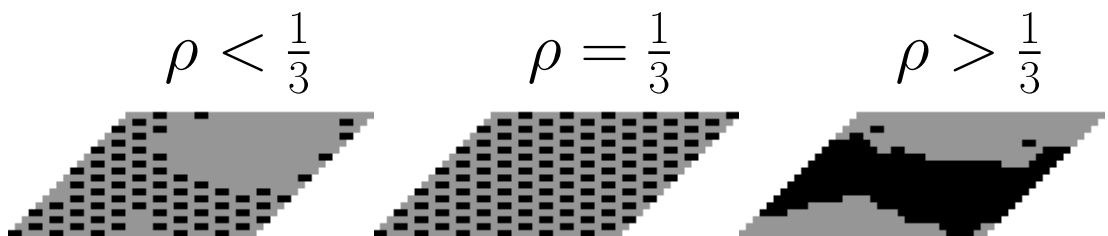
### 5.1 Übersicht verschiedener Flussdichten

Abschließend lässt die in Kapitel 1 gestellte Frage, ob für bestimmte Flussdichten periodische Strukturen existieren, welche Grundzustands-Konfigurationen darstellen, beantworten. Die Suche nach einer periodischen Struktur liefert für bestimmte Flussdichten ein eindeutiges Ergebnis.

Für endliche Flussdichten  $\rho \leq 1/3$  ist die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration mit hoher Wahrscheinlichkeit die energetisch günstige Anordnung. Diese Struktur wird mit verschiedenen Methoden unabhängig voneinander gefunden. Im Flussdichtenbereich  $\rho < 1/3$  wird die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration langsam aufgefüllt, bis sie bei  $\rho = 1/3$  komplett erreicht ist.

Für Flussdichten  $\rho > 1/3$  wird keine periodische Struktur gefunden, welche die Energie minimiert. Hier scheinen Anhäufungen von Flüssen, bei gleichzeitigem Bilden von freien Bereichen, die energetisch bevorzugte Anordnung zu sein. Dies wird für die Flussdichten  $\rho = 1/2$  und  $\rho = 2/3$  für verschiedene Gittergrößen bestätigt.

Diese Erkenntnisse sind anschaulich in Abb. 5.1 zusammengefasst.



**Abbildung 5.1:** Eine Übersicht der gefundenen optimalen Konfigurationen für verschiedene Flussdichten-Bereiche. Auffüllen der regelmäßigen  $1/3$ -Konfiguration bis  $\rho = 1/3$  und für Flussdichten  $\rho > 1/3$  Anhäufungen von Flüssen.

## 5.2 Fehlerquellen und Optimierungsmöglichkeiten

Im Verlauf dieser Bachelorarbeit wurden verschiedene Algorithmen vorgestellt. Dabei können einige Teile dieser Algorithmen die Ergebnisse in bestimmten Fällen verfälschen.

- Eine mögliche Fehlerquelle ist das Zusammenführen der Konfigurationen aus Kapitel 3.2.2. Da der Schlauch gerade ist kann implizit eine Auswahl der möglichen Strukturen getroffen werden, welche sich auf dem Gitter bilden können. Es wurde versucht diese Fehlerquelle dadurch zu eliminieren, dass der Schlauch in vielen verschiedenen Winkeln und von mehreren Ausgangspunkten ausgehend gelegt wird. Zudem werden Verschiebungen der Teil-Konfigurationen um bis zu eine Wabe ausprobiert. Nur jeweils die neue Konfiguration mit der geringsten Energie wird verwandt.
- Die genauen Parameter (z.B. die Temperatur  $T_M = 0$  für den Metropolis-Algorithmus) wurden meist durch ein Trial-And-Error Verfahren ermittelt und bieten sicher noch Raum für Optimierungen.
- Um die in Punkt 5.2 angemerkte Fehlerquelle weiter zu eliminieren, können zum Zusammenführen von Konfigurationen noch mehr Verfahren als nur das in Kapitel 3.2.2 erläuterte Zusammenführen durch Schläuche.

## 5.3 Weiterführende Fragen

Im Verlauf dieser Arbeit sind einige Fragen aufgekommen, die durch weitere Untersuchungen zu beantworten sind:

- Finden sich möglicherweise periodische Strukturen bei Kombinationen von Gittergröße und Flussdichte, die in dieser Arbeit nicht behandelt wurden? Größere Gitter erlauben aufgrund von Gleichung (2.11) mehr Abstufungen in der Flussdichte, sodass die hier gesammelten Ergebnisse noch genauer überprüft werden können.
- Was genau passiert am Phasenübergang von  $\rho < 1/3$  zu  $\rho > 1/3$ ? Existiert dieser unabhängig von der Gittergröße? Wenn nein, wie sieht die Abhängigkeit aus?
- Lässt sich die regelmäßige  $1/3$ -Konfiguration auch auf Gittern finden, deren Wabenzahl kein Vielfaches von 6 ist, auf die sie demnach nicht genau abbildbar ist? Dies ist für große Gitter zu vermuten, da dort der Effekt, dass  $\rho = 1/3$  nicht genau erreicht werden kann, immer weniger Einfluss haben sollte.

# Quellenverzeichnis

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102(30):10451–10453, 2005.
- [3] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *Physical Review*, 115:485–491, August 1959.
- [4] Elliott H. Lieb. Flux phase of the half-filled band. In Bruno Nachtergaele, Jan Philip Solovej, and Jakob Yngvason, editors, *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, pages 79–82. Springer Berlin Heidelberg, 2004.
- [5] Alexei Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, 321(1):2 – 111, 2006. January Special Issue.
- [6] Michael Kamfor, Sébastien Dusuel, Kai Phillip Schmidt, and Julien Vidal. Fate of dirac points in a vortex superlattice. *Phys. Rev. B*, 84:153404, Oct 2011.
- [7] P. Westphälinger. Einfluss von magnetischen Flüssen auf freie Fermionen in zwei Dimensionen. Bachelorarbeit, Lehrstuhl für Theoretische Physik I, Technische Universität Dortmund, September 2013.
- [8] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.

## Danksagung

Diese Bachelorarbeit wäre ohne die Unterstützung einiger Personen sicher nicht möglich gewesen.

Ich danke meinem Professor, Kai Schmidt, der dieses spannende Thema ausgesucht hat, und im Verlauf der Bachelorarbeit alle aufkommenden Fragen beantworten konnte. Mein Dank gilt auch meinen Betreuern Michael Powalski und Kris Coester, die während vieler Diskussionen weiterführende Anmerkungen parat hatten. Michael Powalski war es auch, der einen evolutionären Algorithmus zur Lösung des Problems vorschlug.

Außerdem danke ich allen, die beim Korrekturlesen meine vielen Zeichensetzungsfehler ertragen mussten: Meiner Freundin Paulina, meinen Kommilitonen Dimitrios S. und Julius T., meinem Vater Kai F. und meinem Großvater Wilhelm R..

## Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel "Optimale Flusskonfigurationen bei endlichen Vortexdichten" selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

### Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift