

Hinweise

Empfohlen wird die Verwendung dieser Vorlage mit der jeweils aktuellsten TeXLive Version (Linux, Windows) bzw. MacTeX Version (MacOS). Aktuell ist dies TeXLive 2021. Download hier:

<https://www.tug.org/texlive/>

Die Vorlage `thesis.tex` ist für die Kompilierung mit `lualatex` ausgelegt, mit wenigen Anpassungen kann sie aber auch mit `pdflatex` oder `xelatex` verwendet werden. Die Dokumentenklasse `tudothesis.cls` kann mit allen drei Programmen verwendet werden.

Achten Sie auch auf die Kodierung der Quelldateien. Bei Verwendung von Xe \LaTeX oder Lua \LaTeX (empfohlen) müssen die Quelldateien UTF-8 kodiert sein. Bei Verwendung von pdf \LaTeX nutzen Sie die Pakete `inputenc` und `fontenc` mit der korrekten Wahl der Kodierungen.

Eine aktuelle Version dieser Vorlage steht unter

<https://github.com/maxnoe/tudothesis>

zur Verfügung.

Alle verwendeten Pakete werden im \LaTeX Kurs von Pep et al. erklärt:

<http://toolbox.pep-dortmund.org/notes>

Für Rückmeldungen und bei Problemen mit der Klasse oder Vorlage, bitte ein *Issue* auf GitHub aufmachen oder eine Email an maximilian.noethe@tu-dortmund.de schreiben.

Wenn Sie die Dokumentenklasse mit der Option `tucolor` laden, werden verschiedene Elemente in TU-Grün gesetzt.

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Mn-Verunreinigungen in Graphen: Eine Tight Binding Modellierung

Yanick Sebastian Kind
geboren in Fairfield

2022

Lehrstuhl für Theoretische Physik 2
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. Anders
Zweitgutachter: Prof. Dr. Uhrig
Abgabedatum: XX. Juli 2022

Kurzfassung

Hier steht eine Kurzfassung der Arbeit in deutscher Sprache inklusive der Zusammenfassung der Ergebnisse. Zusammen mit der englischen Zusammenfassung muss sie auf diese Seite passen.

Abstract

The abstract is a short summary of the thesis in English, together with the German summary it has to fit on this page.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	2
2.1	Greensche Funktionen	2
3	Wichtige Hinweise zum Dokument	5
3.1	Erstellen des Ausgabedokuments mit Make	6
3.2	Erstellen des Ausgabedokuments mit Texmaker	6
4	L^AT_EX-Grundlagen	8
4.1	Zahlen und Einheiten	8
4.2	Das Literaturverzeichnis	9
5	Abbildungen und Tabellen	11
5.1	Abbildungen	11
5.2	Tabellen	12
6	Berechnung	13
6.1	Tight-Binding-Hamiltonian	13
A	Ein Anhangskapitel	14
	Literatur	15

1 Einleitung

Hier folgt eine kurze Einleitung in die Thematik der Bachelorarbeit. Die Einleitung muss kurz sein, damit die vorgegebene Gesamtlänge der Arbeit von 25 Seiten nicht überschritten wird. Die Beschränkung der Seitenzahl sollte man ernst nehmen, da Überschreitung zu Abzügen in der Note führen kann. Um der Längenbeschränkung zu genügen, darf auch nicht an der Schriftgröße, dem Zeilenabstand oder dem Satzspiegel (bedruckte Fläche der Seite) manipuliert werden.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Greensche Funktionen

Die Greensche Funktion ist für zwei Operatoren definiert als

$$G_{A,B}(\tau, \tau') = -\frac{1}{\hbar} \langle T_s (A(\tau) B(\tau')) \rangle \quad (2.1)$$

$$= -\frac{1}{\hbar} (\langle A(\tau) B(\tau') \rangle \Theta(\tau - \tau') + s \langle B(\tau') A(\tau) \rangle \Theta(\tau' - \tau)) , \quad (2.2)$$

wobei T_s der Zeitordnungsoperator, $\langle \dots \rangle$ ein Erwartungswert und $\Theta(\tau' - \tau)$ die Heaviside-Funktion ist.[1][12] Der Parameter s sorgt mit $s = +1$ für bosonische bzw. $s = -1$ für fermionische Operatoren für das richtige Vorzeichen. Die imaginäre Zeit τ ist über die reale Zeit t als $\tau = it$ definiert.[12] Die Operatoren A und B Operatoren im Heisenbergbild besitzen somit die Darstellung

$$A(\tau) = e^{H\tau} A_S e^{-H\tau} \quad (2.3)$$

mit H als Hamiltonoperator und A_S als Operator im Schrödingerbild. In Gleichung (2.3) wurde das reduzierte Planksche Wirkungsquantum breits auf eins gesetzt, was in den folgenden Abschnitten beibehalten wird. Da in dieser Arbeit nur fermionische Systeme betrachtet werden, wird s ab jetzt ohne weitere Bemerkungen auf -1 gesetzt. Unter der Annahme, dass die partielle Ableitung von A verschwindet, ist die zeitliche Entwicklung eines Operators A durch die Heisenbergsche Bewegungsgleichung gemäß

$$\frac{d}{dt} A(\tau) = i[H, A] \iff \frac{d}{d\tau} (A(\tau) = [H, A] \quad (2.4)$$

gegeben. In dieser Arbeit ist die Bewegungsgleichung für die Greensche Funktion (2.2) von großer Bedeutung, welche mittels partieller Ableitung nach der Zeit gewonnen

werden kann. Somit folgt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} G(\tau, \tau') &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial \tau} A(\tau) B(\tau') \right\rangle \Theta(\tau - \tau') - \langle A(\tau) B(\tau') \rangle \delta(\tau - \tau') \\
 &\quad + \left\langle B(\tau') \frac{\partial}{\partial \tau} A(\tau) \right\rangle \Theta(\tau' - \tau) - \langle B(\tau') A(\tau) \rangle \delta(\tau' - \tau) \\
 &= - \langle [H, A] B(\tau') \rangle \Theta(\tau - \tau') - \langle A(\tau) B(\tau') \rangle \delta(\tau - \tau') \\
 &\quad + \langle B(\tau') [H, A] \rangle \Theta(\tau' - \tau) - \langle B(\tau') A(\tau) \rangle \delta(\tau' - \tau) \\
 &= G_{[H, A], B}(\tau, \tau') - \langle [A, B] \rangle \delta(\tau - \tau')
 \end{aligned}$$

Eine mögliche Struktur der Arbeit sieht wie folgt aus:

1. Einleitung

In der *kurzen* Einleitung wird die Motivation für die Arbeit dargestellt und ein Einblick in die kommenden Kapitel gegeben.

2. Theoretische Grundlagen

Alles was an theoretischen Grundlagen benötigt wird, sollte auch eher kurz gehalten werden. Statt Grundlagenwissen zu präsentieren, eher auf die entsprechenden Lehrbücher verweisen. Etwa: Tiefer gehende Informationen zur klassischen Mechanik entnehmen Sie bitte [7].

3. Ergebnisse

Der eigentliche Teil der Arbeit, das was getan wurde.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung der Ergebnisse, Optimierungsmöglichkeiten, mögliche weitergehende Untersuchungen.

Die Gliederung sollte auf der einen Seite nicht zu fein sein, auf der anderen Seite sollten sich klar unterscheidende Abschnitte auch kenntlich gemacht werden.

In der hier verwendeten KOMA-Script-Klasse `scrbook` ist die oberste Gliederungsebene, die in der Bachelorarbeit verwendet werden sollte, das `\chapter`.

Ein Kapitel sollte erst dann in tiefere Gliederungsebenen unterteilt werden, wenn es auch wirklich etwas zu unterteilen gibt. Es sollte keine Kapitel mit nur einem Unterkapitel (`\section`) geben.

In dieser Vorlage ist die Tiefe des Inhaltsverzeichnisses auf `chapter` und `section` beschränkt. Möchten Sie diese Beschränkung aufheben, entfernen Sie den Befehl

`\setcounter{tocdepth}{1}`

aus der Präambel oder ändern Sie den Zahlenwert entsprechend. Das Inhaltsverzeichnis sollte für eine Bachelorarbeit auf eine Seite passen.

3 Wichtige Hinweise zum Dokument

Diese Vorlage ist auf die Kompilierung mit `lualatex` ausgelegt. Als Dokumentenklasse wird die KOMA-ScriptKlasse `scrbook` verwendet. Falls Sie Änderungen am Layout vornehmen möchten, lesen Sie die KOMA-Script-Dokumentation: [6].

Eine umfangreiche Einführung in die moderne Verwendung von \LaTeX gibt es hier: [9], lesenswert ist außerdem das \LaTeX -Tabu: [3]

Um dieses Dokument vollständig zu erstellen sind maximal vier Programmläufe nötig:

1. `lualatex BachelorArbeit.tex`
2. `biber BachelorArbeit.bcf`
3. `lualatex BachelorArbeit.tex`
4. `lualatex BachelorArbeit.tex`

Beim ersten Lauf des \LaTeX -Compilers werden die Kapitel, Links und zitierten Bibliographieeinträge in Hilfsdateien geschrieben.

Dann ist ein Lauf des Programms `biber` nötig, welches die benötigten Einträge aus der Hilfsdatei einliest, die Einträge aus der `.bib` Datei einliest, sortiert und formatiert und in eine weitere Hilfsdatei schreibt.

Beim nächsten \LaTeX -Lauf werden dann diese Hilfsdateien eingelesen und Literatur- und Inhaltsverzeichnis erstellt.

Manchmal ist ein vierter Lauf nötig, falls sich durch das Einfügen des Literaturverzeichnisses Seitenzahlen verändert haben.

Das Tool `latexmk` übernimmt dies mit nur einem Programmaufruf und führt nur so viele Aufrufe durch, wie nötig sind.

```
latexmk --lualatex BachelorArbeit.tex
```

Eine gute Option ist es, den \LaTeX Output in einem anderen Ordner zu erzeugen, dies ist mit der `--output-directory` Option möglich:

```
latexmk --output-directory=build --lualatex BachelorArbeit.tex
```

3.1 Erstellen des Ausgabedokuments mit Make

Für diese Vorlage wird ein Makefile zur Verfügung gestellt, welches automatisch alle Schritte ausführt, die für das fertige Dokument nötig sind. Die Ausgabe erfolgt dabei in den Unterordner `build/`. Make prüft, ob die Quelldateien verändert wurden, falls nicht, werden auch keine Befehle ausgeführt.

Falls Sie das Makefile benutzen möchten, sollten Sie alle Abhängigkeiten eintragen (Eigene Dateien für Kapitel, Plots, etc.).

Download und weitere Informationen zu Make gibt es unter [5]. Die Befehle sind für die Bash ausgelegt. Wenn Sie sie unter Windows nutzen wollen, benötigen Sie einen Bash-Emulator, wie Git Bash, Download unter [4] möglich. Wenn Sie Make installiert haben, rufen Sie einfach in der Konsole im Verzeichnis der Arbeit den Befehl `make`.

3.2 Erstellen des Ausgabedokuments mit Texmaker

3.2.1 Einrichten der nötigen Befehle

Ein beliebter Editor für alle Betriebssysteme ist Texmaker, Download unter [11]. Damit Texmaker das Dokument korrekt kompiliert, fügen sie einen benutzerdefinierten Befehl hinzu:

1. Klicken sie oben in der Menüleiste auf *Benutzer/in*
2. Klick auf *Eigene Befehle*
3. Klick auf *Eigene Befehle editieren*, dort können Sie bis zu 5 eigene Befehle definieren
4. Geben Sie dem Befehl unter *Menüeintrag* einen Namen und tragen sie folgende Befehle in das Befehlsfeld ein:
`latexmk --lualatex --interaction=batchmode --halt-on-error %.tex |`
5. Bestätigen Sie mit *OK*

In Abbildung 3.1 ist ein Screenshot des Befehlsmenü gezeigt. Ihren Befehl können Sie nun im Drop-Down-Menü zum Kompilieren des Dokuments auswählen und mit einem Klick auf den Pfeil starten.

3.2.2 Aufräumen

Nach einem L^AT_EX-Fehler ist es oft notwendig, die erstellten Hilfsdateien zu löschen. Klicken Sie hierzu auf *Werkzeuge*→*Aufräumen*.

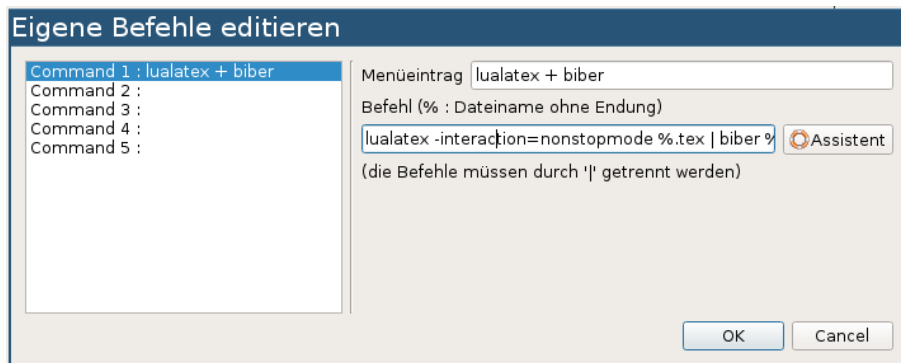


Abbildung 3.1: Screenshot zur Erstellung des Kompilier-Befehls in Texmaker

4 L^AT_EX-Grundlagen

Bitte beachten Sie beim Schreiben der Arbeit folgende Konventionen bzw. Grundlagen:

- **Abschnitte und Zeilenumbrüche**

Es sollten im Fließtext keine Zeilenumbrüche mit `\\` erzwungen werden. Schreiben Sie höchstens einen Satz in eine Code-Zeile. Absätze werden im Code mit einer Leerzeile markiert und dann entsprechend der Einstellung von `parskip` in der Dokumentenklasse gesetzt.

- **Kursiv/Aufrecht**

- Variablen und physikalische Größen werden kursiv gesetzt.
- Einheiten werden immer aufrecht und mit einem halben Leerzeichen Abstand zur Zahl gesetzt. Nutzen Sie `siunitx`!
- Mathematische Konstanten und Funktionen werden ebenfalls aufrecht gesetzt. Zum Beispiel die Eulersche Zahl e , das imaginäre i und das infinitesimale d . Im Mathematikmodus können Sie dies mit dem Befehl `\mathrm{}` erreichen. Für die Funktionen stellt L^AT_EX Befehle bereit, z.B. `\arccos`.
- Integrand und ein dx sollten ebenfalls durch ein kleines Leerzeichen (`\,`) getrennt werden.

4.1 Zahlen und Einheiten

Jede Zahl, jede Einheit und jede Zahl mit Einheit sollte mit Hilfe der in dem Paket `siunitx` zur Verfügung gestellten Befehle gesetzt werden. Grundsätzlich gilt: Einheiten werden aufrecht gesetzt und haben ein kleines Leerzeichen (`\,`) Abstand zu ihrer Zahl. Werden Fließkommazahlen ohne `siunitx` gesetzt, entsteht ein hässlicher Leerraum zwischen Komma und erster Nachkommastelle, da L^AT_EX das Komma nicht als Dezimaltrennzeichen, sondern als Satzzeichen interpretiert.

Das Paket wurde mit deutschen Spracheinstellungen (also mit Komma als Dezimaltrennzeichen und \cdot zwischen Zahl und Zehnerpotenz) geladen, sowie mit den Einstellungen, dass die Standardabweichung stets durch \pm abgetrennt wird und Einheiten falls nötig als Brüche ausgegeben werden.

Tabelle 4.1: Beispiele für siunitx

Befehl	Ergebnis
<code>\num{1.2345}</code>	1,2345
<code>\num{1.2e3}</code>	$1,2 \cdot 10^3$
<code>\num{1.2 +- 0.2}</code>	$1,2 \pm 0,2$
<code>\num{10000}</code>	10 000
<code>\si{\meter\per\second}</code>	m/s
<code>\SI{1.2(1)}{\micro\ampere}</code>	$(1,2 \pm 0,1) \mu\text{A}$
<code>\SI{1.2\pm0.1e3}{\kilo\gram\per\cubic\meter}</code>	$(1,2 \pm 0,1) \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$

Das Paket stellt unter anderem die drei wichtigen Befehle

- `\num{Zahl}`,
- `\si{Einheit}` und
- `\SI{Zahl}{Einheit}`

zur Verfügung. Diese Befehle sollten stets genutzt werden, wenn Zahlen angegeben werden. Sie funktionieren sowohl im Text- als auch im Mathematikmodus. In Tabelle 4.1 sind einige Beispiele aufgetragen. Bitte lesen Sie die Dokumentation [13].

4.2 Das Literaturverzeichnis

Das Literaturverzeichnis wird mit Hilfe von BibLaTeX und biber erstellt. Tragen Sie alle ihre Quellen in die Datei `references.bib` ein, Sie enthält bereits einige Beispiele. Für weitere Informationen lesen Sie bitte die Dokumentation [8].

Im Text können Sie mit `\cite{kürzel}` zitieren. Seitenzahlen geben Sie in eckigen Klammern an: `\cite[10]{kürzel}`.

Das Literaturverzeichnis ist so eingestellt, dass es Ihre Quellen in alphabetischer Reihenfolge nach Autoren nummeriert. Möchten Sie das Literaturverzeichnis nach der Reihenfolge des Auftauchens im Text sortieren, fügen sie die Paktetoption `sorting=none` beim Laden des BibLaTeX-Pakets hinzu.

Den Zitier- und Bibliographie-Stil geben sie mit der Option `style=Stil` an. Die beiden gebräuchtesten Stile sind `numeric` und `alphabetic`. Bei `numeric` werden die Quellen durchnummeriert, bei `alphabetic` wird ein Buchstabenkürzel aus Autor(en)-Name(n) und Jahr verwendet. Für weitere Stile konsultieren Sie bitte die Dokumentation: [8].

Ein Beispiel für das Zitieren eines Buches lautet so [10], wissenschaftliche Artikel hingegen werden so [2] zitiert.

Damit das Literaturverzeichnis erstellt wird, ist ein Aufruf von `biber` nach einem ersten kompilieren mit `lualatex` nötig. Danach muss das Dokument erneut mit `lualatex` kompiliert werden.

Zum korrekten Kompilieren des Dokuments siehe Kapitel 3.

5 Abbildungen und Tabellen

5.1 Abbildungen

Achten Sie bei ihren Plots auf ausreichend große Achsenbschriftungen, ausreichende Schriftsticken und gut unterscheidbare Farben. Im Idealfall haben Sie im Plot und der Arbeit die gleiche Schriftgröße und Schriftart. Dies lässt sich durch Erstellen des Plots in der korrekten Größe und Einbinden mit dem optionalen Argument `scale=1` erreichen. Ein Beispiel sehen Sie in Abbildung 5.1.

Nutzen Sie wenn möglich Vektorgrafiken (pdf) und nur in Ausnahmen Rastergrafiken wie .png oder .jpg. Setzen Sie Punkte hinter Abbildungsunterschriften.

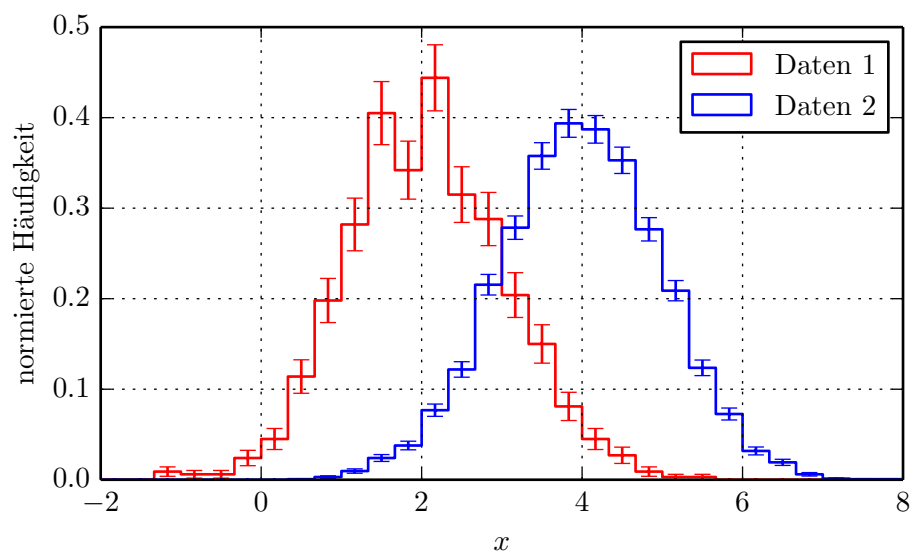


Abbildung 5.1: Ein Histogramm mit Fehlerbalken für zwei Datensätze, Schriftgröße und -art entsprechen der des Dokuments.

5.2 Tabellen

Tabellen sollten so einfach wie möglich aufgebaut sein, verzichten Sie auf zu viele Linien. In fast allen Fällen reichen drei horizontale Linien aus, jeweils über und unter der Tabelle und zwischen den Spaltenüberschriften und der eigentlichen Tabelle.

Das Paket `booktabs` stellt hierfür `\toprule`, `\midrule` und `\bottomrule` zur Verfügung. Das Paket `siunitx` stellt eine extrem mächtige neue Spalteneinstellung bereit: `S`, mit ihr können Zahlen und Einheiten sehr sauber und gut ausgerichtet gesetzt werden.

Diese Vorlage geht von Tabellenüberschriften aus, möchten Sie dagegen Tabellenunterschriften entfernen Sie das entsprechende optionale Argument für die Dokumentenklasse in der Präambel.

Ein Beispiel ist Tabelle 5.1.

Tabelle 5.1: Beispieltabelle mit willkürlichen Werten, für die Zahlenwerte wurde die `S`-Option aus `siunitx` verwendet.

p / Pa	T / K
1024,23	273,15
1025,31	274,5
1026,27	276,2

6 Berechnung

6.1 Tight-Binding-Hamiltonian

Der Hamiltonian in Ortsdarstellung ist

$$H = \sum_m \epsilon_m d_m^\dagger d_m - t \sum_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \sum_{m,j} (V_{mj} d_m^\dagger c_j + V_{mj}^* c_j^\dagger d_m) \quad (6.1)$$

[1]

A Ein Anhangskapitel

Hier könnte ein Anhang stehen, falls Sie z. B. Code, Konstruktionszeichnungen oder Ähnliches mit in die Arbeit bringen wollen. Im Normalfall stehen jedoch alle Ihre Resultate im Hauptteil der Bachelorarbeit und ein Anhang ist überflüssig.

Literatur

- [1] F. B. Anders. „Einführung in die Festkörpertheorie“. Vorlesungsskript. 2020.
- [2] A. Einstein. „A Generalization of the relativistic theory of Gravitation“. In: *Annals of Mathematics* 46.4 (1945), S. 578–584.
- [3] Marc Ensenbach und Mark Trettin. *Das LATEX2 -Sündenregister*. 2011. URL: <ftp://ftp.mpi-sb.mpg.de/pub/tex/mirror/ftp.dante.de/pub/tex/info/l2tabu/german/l2tabu.pdf>.
- [4] *Git Bash - Download*. 2014. URL: <http://msysgit.github.io/>.
- [5] *Gnu-Make Homepage*. 2014. URL: <http://www.gnu.org/software/make/>.
- [6] Markus Kohm und Jens-Uwe Morawski. *KOMA -Script. ein wandelbares LaTeX-Paket*. 2013. URL: <http://mirror.selfnet.de/tex-archive/macros/latex/contrib/koma-script/doc/scrguide.pdf>.
- [7] Friedhelm Kuypers. *Klassische Mechanik*. 9. Auflage. Wiley-VCH, 2010.
- [8] Philipp Lehman et al. *The Biblalex Package. Programmable Bibliographies and Citations*. 2014. URL: <ftp://ftp.fu-berlin.de/tex/CTAN/macros/latex/contrib/biblalex/doc/biblalex.pdf>.
- [9] *Pep et al. Toolbox – L^AT_EX-Folien*. 2014. URL: <http://toolbox.pep-dortmund.org/files/archive/2014/latex.pdf>.
- [10] D. Satas, Hrsg. *Handbook of pressure sensitive adhesive technology*. 2nd. New York: Van Nostrand Reinhold, 1989.
- [11] *Texmaker. The universal LaTeX editor, Downloads*. 2014. URL: <http://www.xmlmath.net/texmaker/download.html>.
- [12] G. S. Uhrig. „Festkörpertheorie II“. Vorlesungsskript. 2020.
- [13] Joseph Wright. *siunitx - A comprehensive (SI) units package*. 2013. URL: <http://mirror.selfnet.de/tex-archive/macros/latex/contrib/siunitx/siunitx.pdf>.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem Titel „Mn-Verunreinigungen in Graphen: Eine Tight Binding Modellierung“ selbstständig 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