

---

# Stochastische Geometrie und Perkolation

## Die Rolle der Euler-Charakteristik

Richard Neher

---



München 2003



---

# **Stochastische Geometrie und Perkolation**

## **Die Rolle der Euler-Charakteristik**

**Richard Neher**

---

Diplomarbeit  
an der Fakultät für Physik  
der Ludwig-Maximilians-Universität  
München

vorgelegt von  
Richard Neher  
aus Göttingen

München, den 4. November 2003

Erstgutachter: Prof. H. Wagner

Zweitgutachter: Prof. H.-O. Georgii

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Perkolation . . . . .	1
1.1.1	Weitere Perkulationsmodelle . . . . .	6
1.2	Clusterzahlen . . . . .	7
1.2.1	site-Perkolation in einer Dimension . . . . .	8
1.2.2	Clusterzahlen in zwei Dimensionen . . . . .	9
1.2.3	Perkolation auf dem Bethe-Gitter . . . . .	11
1.3	Perkolationsschwellen . . . . .	13
1.3.1	Rigorese Ungleichungen . . . . .	13
1.3.2	Dualität und matching – exakte Perkolationsschwellen . . . . .	13
1.3.3	Empirische Formeln für Perkolationsschwellen . . . . .	16
1.4	Euler-Charakteristik und Perkolation . . . . .	17
1.4.1	Zwei Dimensionen - archimedische Gitter . . . . .	17
1.4.2	Dreidimensionale Gitter . . . . .	18
1.4.3	Hyperkubische Gitter . . . . .	20
1.4.4	Kontinuumsperkolation . . . . .	20
<b>2</b>	<b>Euler-Charakteristik</b>	<b>23</b>
2.1	Euler-Charakteristik auf dem Konvexring . . . . .	23
2.2	Euler-Charakteristik und Gauß'sche Krümmung . . . . .	24
2.3	Morsetheorie . . . . .	25
2.3.1	Schnittrekursion . . . . .	26
2.4	Euler-Charakteristik in der Graphentheorie . . . . .	27
2.5	Euler-Charakteristik auf Gittern . . . . .	28
2.5.1	Zweidimensionale Gitter . . . . .	28
2.5.2	Dreidimensionale Gitter . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Stochastische Geometrie gemischter Perkolation</b>	<b>39</b>
3.1	Gemischte Perkolation in zwei Dimensionen . . . . .	39
3.2	Gemischte Perkolation in drei Dimensionen . . . . .	43
3.3	Anwendung auf Perkulationskonfigurationen . . . . .	47
3.3.1	bond-site Perkolation . . . . .	47
3.3.2	Euler-Charakteristik des bcc-Gitters . . . . .	49

3.3.3	Weitere Anwendungsmöglichkeiten . . . . .	51
<b>4</b>	<b>Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen</b>	<b>53</b>
4.1	Euler-Charakteristiken in zwei Dimensionen . . . . .	53
4.1.1	Laves-Gitter . . . . .	53
4.1.2	2-uniforme Gitter . . . . .	55
4.1.3	Bond-Perkolation . . . . .	59
4.1.4	Irreguläre Gitter . . . . .	61
4.1.5	Zufällig dekorierte Mosaike . . . . .	64
4.2	Euler-Charakteristik großer Cluster . . . . .	68
4.3	Euler-Charakteristiken in drei Dimensionen . . . . .	72
4.3.1	Gitterstapel . . . . .	73
4.3.2	Einfach-kubisches Gitter . . . . .	73
4.3.3	fcc-Gitter . . . . .	74
4.3.4	bcc-Gitter . . . . .	75
4.3.5	Diamantgitter . . . . .	77
4.4	Euler-Charakteristik und Perkolation in drei Dimensionen . . . . .	78
4.5	Bond-site-Perkolation . . . . .	81
<b>5</b>	<b>Gegenbeispiele</b>	<b>85</b>
5.1	site-Perkolation . . . . .	85
5.2	bond-Perkolation . . . . .	87
5.3	Eine Folge von Gittern mit $p_c = \frac{1}{2}$ und variierender Euler-Charakteristik . . . . .	88
5.4	Gegenbeispiele – Kontinuumsperkolation . . . . .	89
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>91</b>
<b>A</b>	<b>Numerik</b>	<b>95</b>
A.1	Der Algorithmus von Newman und Ziff [27] . . . . .	95
A.1.1	Die Gitterdefinition . . . . .	96
A.1.2	Cluster labelling . . . . .	97
A.1.3	site-Perkolation . . . . .	98
A.1.4	bond-Perkolation . . . . .	98
A.2	Bestimmung von Perkolationsschwellen . . . . .	98
A.2.1	Spanning Cluster . . . . .	98
A.2.2	finite-size-scaling . . . . .	99
A.3	Bestimmung von Clusterverteilungen . . . . .	100
A.4	Simulationen . . . . .	100
A.4.1	Perkolationsschwellen 2-uniformer Gitter . . . . .	100
A.4.2	Perkolation zufällig dekoriierter Gitter . . . . .	107
A.5	Bestimmung des Erwartungswertes von $\lambda(c_k)$ . . . . .	108

---

<b>B</b>	<b>Rechnungen und Details</b>	<b>109</b>
B.1	sc-Gitter mit 18 Nachbarn . . . . .	109
B.2	bcc-Gitter . . . . .	109
B.3	Diamantgitter . . . . .	112
B.3.1	Konvexe Zellen . . . . .	112
B.3.2	Geteilte primitive Einheitszellen . . . . .	116
B.4	fcc-Gitter . . . . .	117
B.4.1	Wigner-Seitz-Zelle . . . . .	117
B.4.2	Prismen als Zellen des fcc-Gitters . . . . .	117
B.5	Bond-site-Perkolation . . . . .	118
B.5.1	Dreiecksgitter . . . . .	118
B.5.2	fcc-Gitter . . . . .	119
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>121</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>124</b>





# Kapitel 1

## Einleitung

Die Kenntnis der Perkolationsschwelle ist für die Vorhersage der Eigenschaften von Strukturen, die aus zufällig angeordneten Objekten bestehen, sehr wichtig. Zwischen der mittleren Euler-Charakteristik solcher Strukturen und ihrer Perkolationsschwelle besteht ein enger Zusammenhang, und die mittlere Euler-Charakteristik könnte daher zur Vorhersage von Perkolationsschwellen dienen. Dieser Zusammenhang wird in der vorliegenden Arbeit untersucht.

Zu Beginn dieses Kapitels werden Perkulationsprozesse an einigen Beispielen erläutert und Aspekte der Perkolationstheorie, die im weiteren Verlauf benötigt werden, dargelegt. Anschließend wird der Befund, dass die Nullstelle der mittleren Euler-Charakteristik bei einigen Perkulationsproblemen in der Nähe der Perkolationsschwelle liegt, vorgestellt. Die Euler-Charakteristik wird im zweiten Kapitel ausführlicher behandelt.

### 1.1 Perkolation

Um an einem Beispiel darzulegen, was man unter Perkolation versteht, betrachten wir ein leitendes Netzwerk, bestehend aus Knoten (Umspannwerke) und Verbindungen (Hochspannungsleitungen) [43]. Das Netzwerk könnte zur Elektrizitätsversorgung eines Landes dienen. Der Einfachheit halber seien die Knoten auf einem Quadratgitter angeordnet, und jeder Knoten sei mit seinen vier Nachbarn verbunden. Eine Gruppe von Saboteuren will die Stromversorgung unterbrechen und beginnt die Verbindungen (Hochspannungsleitungen) zwischen den Knoten in zufälliger Reihenfolge zu zerschneiden. Im Laufe ihrer Tätigkeit wird Strom, der durch das Netzwerk von linken Rand zum rechten Rand fließen kann, immer kleiner und verschwindet, wenn exakt die Hälfte aller Verbindungen durchtrennt ist. Das teilweise zerstörte Netzwerk und der Strom von linken zum rechten Rand als Funktion des Bruchteils  $p$  der intakten Verbindungen sind in Abbildung 1.1 skizziert. Anstatt die Verbindungen zwischen den Knoten zu zerstören, könnten die Saboteure auch die Knoten selbst angreifen. In diesem Fall genügt es, etwas mehr als 40% der Stationen zu zerstören, damit kein Strom mehr fließt. Das Ergebnis dieses Sabotageaktes und der Strom in Abhängigkeit des Bruchteils der intakten Knoten sind in Abbildung 1.2 skizziert. Bei beiden Sabotage-

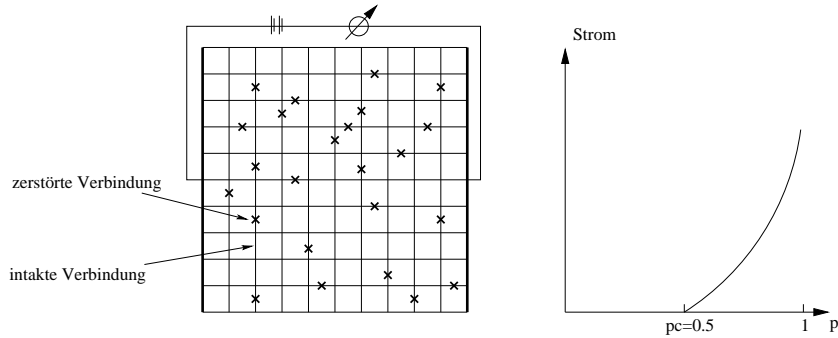


Abbildung 1.1: Zufällige Zerstörung der Verbindungen eines leitenden Netzwerks: Rechts ist der Strom als Funktion des Bruchteils  $p$  der intakten Verbindungen skizziert. Wenn weniger als 50% der Verbindungen intakt sind, fließt kein Strom mehr.

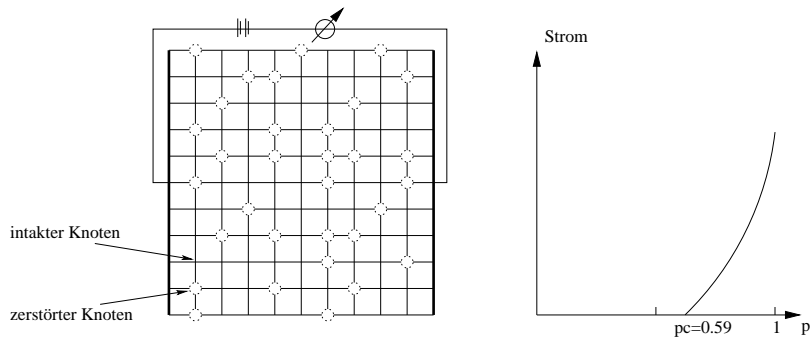


Abbildung 1.2: Zufällige Zerstörung der Knoten eines leitenden Netzwerks: Rechts ist der Strom als Funktion des Bruchteils  $p$  der intakten Knoten skizziert. Wenn weniger als 59% der Knoten intakt sind, fließt kein Strom mehr.

akten nimmt der Strom mit der Zahl der Zerstörungen ab und es existiert ein Wert  $p = p_c$ , unterhalb dessen der linke und rechte Rand nicht mehr verbunden sind, und daher kein Strom mehr fließt. Den Wert  $p_c$  nennt man Perkolationschwelle. Bei  $p = p_c$  ändern sich globale Eigenschaften des Netzwerkes durch eine infinitesimale Variation von  $p$ , denn für  $p > p_c$  existiert ein zusammenhängendes Netzwerk, das linken und rechten Rand verbindet, während es für  $p < p_c$  nur isolierte Inseln gibt. Ein ähnliches Verhalten beobachtet man in Systemen, die einen thermischen Phasenübergang zeigen. Dort existiert eine kritische Temperatur  $T_c$ , an der sich makroskopische Eigenschaften des Systems ändern. Für  $T < T_c$  existieren langreichweitige Korrelationen zwischen den Konstituenten, während diese Korrelationen für  $T > T_c$  exponentiell abfallen.

Eine scharfe Perkolationschwelle beobachtet man aber nur in einem unendlich großen System. Ist das System endlich, ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine Verbindung zwischen gegenüberliegenden Rändern existiert, für kleine  $p$  nahe null, während sie für große  $p$  fast eins ist. Der Übergangsbereich wird mit wachsender Systemgröße immer schmaler. Im Limes unendlicher Systemgröße wird dieser Übergang scharf, und die Wahrscheinlichkeit,

dass beide Seiten verbunden sind, zu einer Stufenfunktion mit Sprung bei  $p_c$ . Die Sabotageakte sind Beispiele für die beiden am besten untersuchten Perkulationsprozesse auf Gittern. Die Knoten entsprechen den Vertices eines Gitters; die Verbindungen zwischen den Knoten sind die Gitterkanten zwischen den Vertices. Beim ersten Sabotageakt sind alle Vertices (Knoten) vorhanden, aber nur ein Teil  $p$  der Gitterkanten ist besetzt (unzerstört). Dieses Modell beschreibt **bond-Perkolation**. Im anderen Fall ist nur ein Teil der Knoten intakt, und man nennt Vertices, die intakten Knoten entsprechen, besetzt. Benachbarte, besetzte Vertices sind durch Gitterkanten verbunden. Dieses Modell beschreibt **site-Perkolation** und der Anteil der besetzten Vertices ist die Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$ . Bond- und site-Perkolation sind in ihren mathematischen Aspekten sehr ähnlich. In der Tat lässt sich jedes bond-Perkulationsproblem als site-Perkolation auf dem Überdeckungsgitter (engl.: covering lattice) formulieren. Das Überdeckungsgitter entsteht, indem man auf jede Gitterkante (die bonds) einen Vertex setzt, und alle Vertices verbindet, deren zugehörige Kanten an einem gemeinsamen Vertex enden (siehe Abb. 1.3). Die physikalische Interpretation von bond- und site-Perkolation ist aber durchaus unterschiedlich.

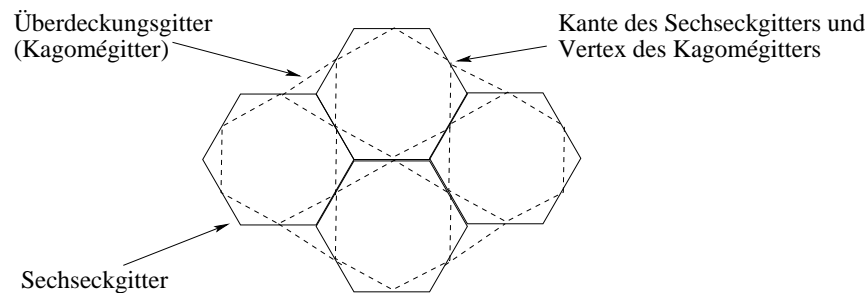


Abbildung 1.3: Das Überdeckungsgitter des Sechseckgitters ist das Kagomé-Gitter.

Das bond-Perkulationsmodell wird z.B. verwendet, um den Prozess der Gelbildung zu beschreiben. Man betrachtet Monomere in einem Container und nimmt an, dass sie auf den Vertices eines Gitters angeordnet sind, und, dass sich zwischen diesen Monomeren mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit  $p$  chemische Bindungen ausbilden (siehe Abb. 1.4). Ist  $p$  klein, existieren nur sehr wenige Bindungen, und die entstehenden Polymere sind klein. Mit  $p$  wachsen die Moleküle. Bei  $p = p_c$  entsteht erstmals ein großes Makromolekül, dass sich durch den ganzen Container erstreckt. Der Inhalt des Containers wird von einer Flüssigkeit zu einem Gel. Das Makromolekül enthält aber nur einen Bruchteil der Moleküle und durchzieht den nach wie vor flüssigen Anteil wie ein Netz. Wächst  $p$  weiter an, wird das Netz immer dichter, bis es schließlich bei  $p = 1$  alle Monomere enthält.

Ein prominentes Beispiel für einen site-Perkulationsprozess ist die Modellierung von Waldbränden. Die Bäume im Wald werden durch Vertices eines zweidimensionalen Gitters dargestellt. Auf jedem Gitterplatz steht mit Wahrscheinlichkeit  $p$  ein Baum, d.h. Vertices sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt. Wenn in einen beliebigen Baum ein Blitz einschlägt, beginnt der Baum zu brennen. Der brennende Baum entzündet alle Bäume in seiner Nachbarschaft und es entwickelt sich ein Waldbrand (siehe Abb. 1.5). Die erwartete Anzahl  $S$

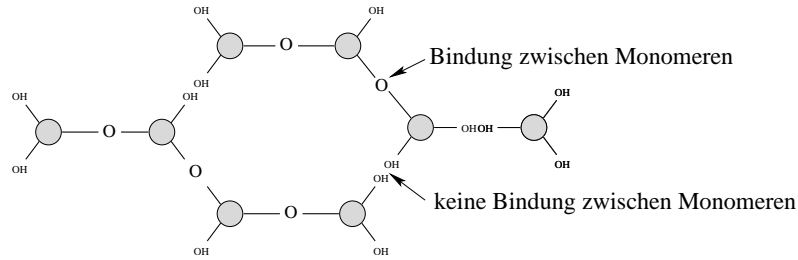


Abbildung 1.4: Monomere auf einem Sechseckgitter, zwischen denen sich chemische Bindungen ausbilden können.

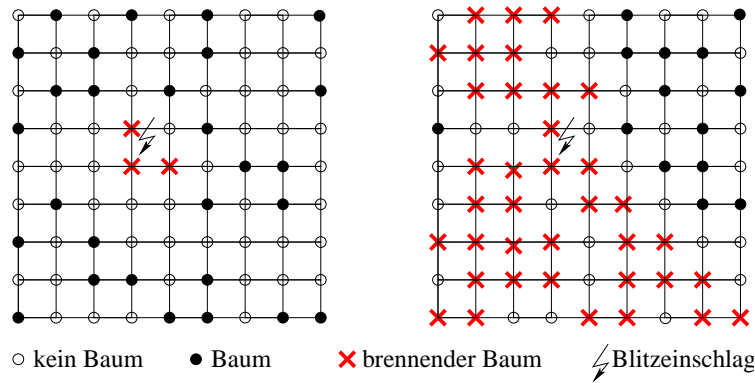


Abbildung 1.5: Links: ein spärlich bewachsener Wald, in dem sich der Brand nicht ausbreiten kann. Rechts: ein dicht bewachsener Wald mit großräumigen Brandschaden.

der verbrannten Bäume hängt von  $p$  ab. Ist  $p$  sehr klein, hat der Baum typischerweise keine Nachbarn und  $S$  ist klein. Ist  $p$  nahe eins, wird der Wald vollständig verbrennen und  $S$  ist unendlich. Bei  $p = p_c$  ändert sich das erwartete Schicksal des Waldes dramatisch. Für  $p < p_c$  existieren nur endliche zusammenhängende Bereiche, sog. Cluster, und der Waldbrand bleibt auf einen endlichen Cluster beschränkt. Die erwartete Anzahl der verbrannten Bäume  $S$  ist die mittlere Clustergröße und für  $p < p_c$  endlich. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Baum, der im Abstand  $r$  vom Einschlagort des Blitzes steht, verbrennt, ist durch die *pair-connectedness* Funktion  $\rho(r)$  gegeben. Die pair-connectedness Funktion ist die Wahrscheinlichkeit, dass zwei besetzte Vertices im Abstand  $r$  zum gleichen Cluster gehören. Für  $p < p_c$  und große  $r$  fällt  $\rho$  mit  $r$  exponentiell auf einer Skala  $\xi(p)$  ab. Für  $p > p_c$  existiert ein unendlicher Cluster, und wenn der Blitz in einen Baum dieses Clusters einschlägt, bleibt der Waldbrand nicht auf ein endliches Gebiet beschränkt. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Vertex zu einem unendlichen Cluster gehört, wird Perkolationswahrscheinlichkeit genannt. Für die Perkolationswahrscheinlichkeit gilt

$$P_\infty(p) \quad \begin{cases} = 0 & p < p_c \\ > 0 & p > p_c \end{cases}. \quad (1.1)$$

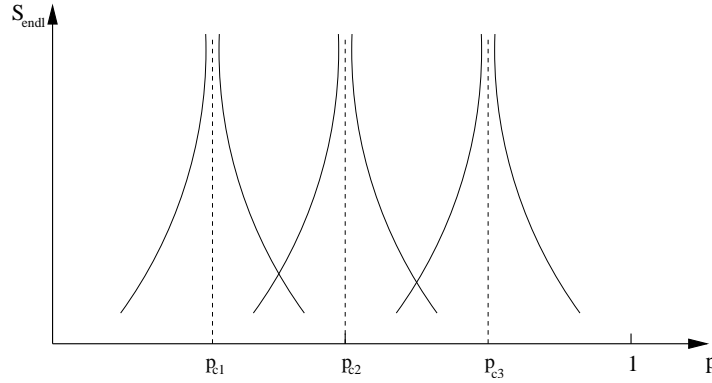


Abbildung 1.6: Schematische Darstellung des universellen asymptotischen Verhalten der mittleren Clustergröße endlicher Cluster  $S_{endl}(p)$  von Perkulationsprozessen mit unterschiedlichem  $p_c$ .

Für  $p > p_c$  schlägt der Blitz also mit endlicher Wahrscheinlichkeit in einen Baum aus dem unendlichen Cluster ein, und  $S$  ist unendlich. Die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Bäume zum gleichen Cluster gehören, ist auch bei beliebig großen Abstand echt größer null und es gilt  $\rho(r) \rightarrow P_\infty(p)^2$  für  $r \rightarrow \infty$ . Schränkt man die mittlere Clustergröße auf endliche Cluster ein, ist  $S_{endl}(p)$  sowohl für  $p < p_c$ , als auch  $p > p_c$  endlich, und divergiert für  $p \rightarrow p_c$ . Unterhalb von  $p_c$  ist  $S(p) = S_{endl}(p)$ .

Der Wert der Perkolationsschwelle  $p_c$  hängt von dem Gitter, auf dem die Vertices angeordnet sind, ab. Vertices der Gitter sind durch Gitterkanten verbunden, und in aller Regel gilt, dass  $p_c$  umso kleiner ist, je mehr Nachbarn die Vertices haben. Im Dreiecksgitter z.B. hat ein Vertex sechs Nachbarn, während ein Vertex des Quadratgitters nur vier Nachbarn hat. Die site- und die bond-Perkolationsschwelle des Dreiecksgitters liegen unterhalb der entsprechenden Schwellen des Quadratgitters. Während  $p_c$  von Gitter zu Gitter variiert, beobachtet man für andere Größen in der Nähe von  $p_c$  universelles Verhalten (siehe Abb. 1.6). Für diese Größen findet man

$$P_\infty(p) \sim (p - p_c)^\beta \quad \text{für } p > p_c, \quad (1.2)$$

$$S_{endl}(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma}, \quad (1.3)$$

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad \text{für } p < p_c. \quad (1.4)$$

Die funktionelle Abhängigkeit dieser Größen von  $p$  ist universell, und die Exponenten hängen nur von der Dimension des verwendeten Gitters ab. Das Skalenverhalten kann mit Renormierungsargumenten verstanden werden, ist aber nicht im mathematischen Sinne bewiesen.

Der Perkulationsprozess ist in vielen Aspekten kontinuierlichen thermischen Phasenübergängen mit divergierender Korrelationslänge sehr ähnlich. In der Tat geht der Phasenübergang in Spinmodellen mit dem erstmaligen Auftreten eines unendlichen Spinclusters einher [3]. Perkolation kann als Limes  $\lambda \rightarrow 1$  des  $\lambda$ -Zustands-Pottsmodells erhalten werden ([8], siehe auch Abschnitt 2.5.1).  $P_\infty(p)$  spielt die Rolle des Ordnungsparameters, die

mittlere Clustergröße  $S$  die der Suszeptibilität und die charakteristische Länge der Pair-connectedness Funktion entspricht der Korrelationslänge zweier Spins.

Perkolation wurde als Modell für ungeordnete poröse Medien eingeführt und hat im Laufe der Jahrzehnte in so unterschiedlichen Bereichen wie Epidemiologie, der Theorie der Phasenübergänge und der Beschreibung kosmischer Strukturen Anwendungen gefunden. Für eine umfassende Einführung in die mathematische Perkolationstheorie sei auf die Bücher von Grimmett [9] und Hughes [14] verwiesen, für die physikalischen Aspekte der Perkolationstheorie ist das Buch von Stauffer und Aharony [30] eine unterhaltsame Quelle.

Das Hauptaugenmerk der Perkolationstheorie liegt auf dem Verständnis der universellen Eigenschaften in der Nähe des kritischen Punktes. Für viele praktische Anwendungen ist aber die Kenntnis des Wertes von  $p_c$  entscheidend. Die Art und Weise, wie  $p_c$  von den mikroskopischen Details des Perkulationsprozesses, insbesondere der Gitterstruktur abhängt, ist Gegenstand dieser Arbeit. Klaus Mecke und Herbert Wagner haben bemerkt, dass die Nullstelle  $p_0$  der mittleren Euler-Charakteristik bei einer Reihe von Perkulationsproblemen in der Nähe von  $p_c$  liegt. Das Ziel der Arbeit ist es, diesen Befund ausführlicher zu untersuchen, und  $p_0$  als Schätzwert für  $p_c$  empirisch zu begründen. Diese Faustregel ist vergleichbar mit dem Lindemann-Kriterium für das Schmelzen von Kristallen, welches besagt, dass ein Kristall schmilzt, sobald die mittlere Schwingungsamplitude der Kristallatome ungefähr  $1/10$  des Gitterabstandes erreicht. In vergleichbarer Weise ist die Nullstelle der Euler-Charakteristik geeignet den Perkulationsübergang abzuschätzen. In zwei Dimensionen ist die Euler-Charakteristik die Differenz der Zahl der Cluster und der Zahl der in diesen Clustern enthaltenen Löcher. Die Euler-Charakteristik wird negativ, wenn die Löcher überwiegen. Unterhalb von  $p_c$  besteht die Anordnung aus vielen endlichen Clustern, die Löcher enthalten können. Oberhalb von  $p_c$  existiert ein unendlicher Cluster, der unbesetzte Inseln enthält, die wiederum endliche besetzte Cluster enthalten können. Oberhalb von  $p_c$  ist also jeder endliche Cluster in einem Loch des unendlichen Clusters enthalten und jeder positive Beitrag zur Euler-Charakteristik geht mit einem negativen Beitrag einher. Man erwartet also für  $p < p_c$  positive und für  $p > p_c$  negative Euler-Charakteristik und es ist plausibel, dass  $p_0$  in der Nähe von  $p_c$  liegt.

### 1.1.1 Weitere Perkulationsmodelle

Als anschauliche Beispiele für bond- und site-Perkolation haben wir Saboteure betrachtet, die in zufälliger Reihenfolge entweder Verbindungen oder Knoten eines Netzwerkes zerstören. Wenn zwei verschiedene Gruppen von Saboteuren, von denen eine Verbindungen und die andere Knoten zerstört, gleichzeitig eine Attacke starten, erzeugen sie einen gemischten **bond-site-Perkulationsprozess**. Die Bruchteile der Verbindungen  $p_b^*$  und Knoten  $p_s^*$ , die zum Zeitpunkt, an dem die Leitfähigkeit verschwindet, zerstört sind, hängen von den Geschwindigkeiten ab, mit denen Verbindungen bzw. Knoten zerstört werden. Der kritische Ort ist eine Kurve  $p_s^*(p_b^*)$  in der  $(p_s, p_b)$ -Ebene. Auch die anderen angeführten Beispiele lassen sich leicht auf bond-site-Perkolation verallgemeinern. Wenn beim Modell der Gelierung nur auf einem Bruchteil der Gitterpunkte ein Monomer sitzt, erhält man

einen bond-site-Perkulationsprozess. Entsprechend könnten im Waldbrandmodell brennende Bäume ihre Nachbarn nicht mit Sicherheit, sondern nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit entzünden.

Perkolation auf Gittern ist ein einfaches Modell, das reale Phänomene nur eingeschränkt wiedergeben kann. Perkolation kann aber ebenso gut als kontinuierliches Modell formuliert werden. Man kann beispielsweise Punkte nach einem gewissen Zufallsprozess verteilen und sie nach einer geeigneten Vorschrift als verbunden einstufen. Das prominenteste Modell ist das Boolesche Kornmodell. Man betrachtet poissonverteilte Punkte und heftet an diese Punkte geometrische Körper. Überlappen die Körper, sind die entsprechenden Punkte verbunden. Ab einer gewissen Punktdichte tritt ein unendlicher Cluster auf. Verschiedene Perkulationsmodelle im Kontinuum sind im Buch von Meester und Roy [23] ausführlich beschrieben. Viele mathematische Resultate für Perkolation auf Gittern gelten in analoger Weise auch für Kontinuumsperkolation.

In allen bisher diskutierten Fällen wurden Verbindungen bzw. Vertices unabhängig voneinander geöffnet bzw. besetzt. Es gibt auch Modelle, in denen die Konstituenten miteinander wechselwirken und die Verteilung der geöffneten Verbindungen bzw. besetzten Vertices Korrelationen aufweist. Ein prototypisches Beispiel sind Cluster gleich ausgerichteter Spins in den Spinmodellen des Ferromagnetismus. Benachbarte Spins wechselwirken miteinander, und wir bezeichnen die Verbindung zwischen zwei benachbarten Spins als geöffnet, wenn sie parallel ausgerichtet sind. Dadurch entsteht ein Perkulationsprozess, in dem Verbindungen nicht unabhängig voneinander geöffnet sind. Ohne äußeres Feld richten sich isolierte Cluster unabhängig voneinander aus und der Betrag des Erwartungswertes der Magnetisierung ist null. Wenn die Spincluster perkolieren, existiert ein einziger unendlicher Cluster und die Magnetisierung ist von null verschieden. Der Perkulationsübergang der Spincluster fällt also mit dem thermischen Phasenübergang zusammen [3].

Ein weitere interessante Anwendung der Perkolationstheorie sind verdünnte Isingmodelle. Werden in einem Gitter von Spins mit ferromagnetischer Wechselwirkung mit Wahrscheinlichkeit  $q$  Leerstellen eingefügt, sinkt die kritische Temperatur  $T_c$ . Wenn  $q$  so groß wird, dass  $p = 1 - q < p_c$  ist, zerfällt das Spingitter in endliche Cluster und es kann kein Phasenübergang mehr auftreten.  $T = 0$  und  $p = 1 - q = p_c$  ist ein multikritischer Punkt, an dem sowohl die thermische Korrelationslänge der Spins  $\xi_T$ , als auch die Längenskala  $\xi_P$  der pair-connectedness Funktion  $\rho(r)$  divergieren. In Abbildung 1.7 sind der Verlauf von  $T_c(p)$  und das verdünnte Isingmodell skizziert.

## 1.2 Clusterzahlen

Bei einem Perkulationsprozess auf einem Gitter entstehen in zufälliger Weise zusammenhängende Bereiche. Zwei besetzte Vertices des Gitters sind verbunden, wenn sie nächste Nachbarn sind und die Gitterkante zwischen ihnen geöffnet ist. Eine maximale Menge von Vertices, die untereinander durch eine Kette von Vertices verbunden sind, heißt Cluster. Wenn die Verteilung der Cluster bekannt ist, können alle für die Perkolationstheorie relevanten Größen ausgerechnet werden.

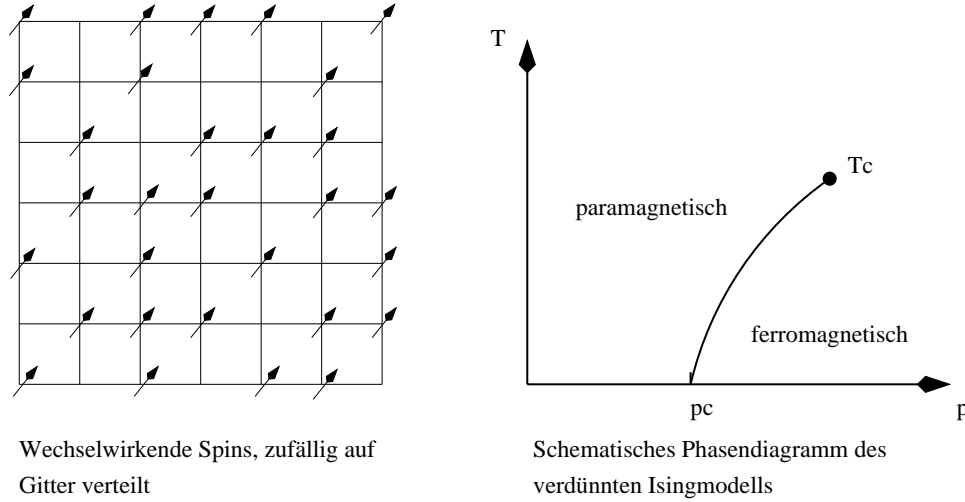


Abbildung 1.7: Verdünntes Isingmodell

### 1.2.1 site-Perkolation in einer Dimension

Auf einer eindimensionalen Kette von Vertices sind die einzigen möglichen Cluster zusammenhängende Stücke der Kette. Jeder Cluster ist durch seine Länge vollständig festgelegt. Damit ein Vertex das linke Ende eines Clusters der Größe  $s$  ist, muss sein linker Nachbar unbesetzt, er selbst und seine  $s - 1$  rechten Nachbarn besetzt, und der darauffolgende Vertex wiederum unbesetzt sein (siehe Abb. 1.8). Die Wahrscheinlichkeit dieses Ereignisses ist  $n_s(p) = p^s(1 - p)^2$ .  $n_s$  ist die erwartete Anzahl der Cluster der Größe  $s$  pro Vertex. Summiert man über alle  $s$ , erhält man die Gesamtzahl der Cluster pro Vertex

$$n(p) = (1 - p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p^s = p(1 - p). \quad (1.5)$$

Ein besetzter Vertex ist unterhalb von  $p_c$  in genau einem endlichen Cluster enthalten. Der Vertex kann an jedem der  $s$  Plätze eines Clusters der Größe  $s$  sein und die bedingte Wahrscheinlichkeit für dieses Ereignis ist  $\mathcal{P}\{x \in \text{Cluster der Größe } s \mid x \text{ ist besetzt}\} = sp^{s-1}(1 - p)^2$ . Jeder Vertex ist mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt und es gilt

$$p = (1 - p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} sp^s. \quad (1.6)$$



Abbildung 1.8: Kette von unbesetzten und besetzten Vertices. Es treten Cluster der Größen 1, 3 und 4 auf. Die Wahrscheinlichkeit dieser Anordnung ist  $qpqppppppppppq = p^8q^5$  ( $q = 1 - p$ ).



Die mittlere Größe des Clusters, zu dem ein beliebiger besetzter Vertex gehört, ist durch

$$S = \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s = \frac{p+1}{p-1} \quad (1.7)$$

gegeben. Die mittlere Clustergröße ist für  $p < 1$  endlich und divergiert im Limes vollständiger Besetzung. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Vertex Teil eines Clusters der Größe  $s$  ist, ist für  $p < 1$  proportional zu  $sp^s$ . Im Limes unendlicher Clustergröße gilt

$$\lim_{s \rightarrow \infty} sn_s(p) = \begin{cases} 0 & \text{für } p < 1, \\ 1 & \text{für } p = 1. \end{cases} \quad (1.8)$$

Daher ist in einer Dimension die triviale Perkolationsschwelle  $p_c = 1$ , und es gibt keine perkolierende Phase. Die Euler-Charakteristik einer eindimensionalen Figur ist gleich der Zahl der Komponenten. Die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex ist also  $\chi(p) = n(p) = p(1-p)$ . Ihre Nullstelle  $p_0 = 1$  fällt mit  $p_c$  zusammen.

Auch auf einem zweidimensionalen Gitterstreifen mit unendlicher Ausdehnung in horizontaler Richtung und endlicher Höhe  $l$  tritt für  $p < 1$  kein unendlicher Cluster auf (siehe Abb. 1.9). Die Wahrscheinlichkeit, dass zwischen oberen und unteren Rand eine senkrechte Kette unbesetzter Gitterplätzen existiert, ist  $Q = (1-p)^l > 0$ . Damit ein Cluster eine horizontale Länge  $s$  hat, dürfen an  $s$  Stellen keine solchen Ketten auftreten. Daher ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Cluster mit horizontaler Ausdehnung  $s$  auftritt, kleiner als  $(1-Q)^s$  und verschwindet für große  $s$ .

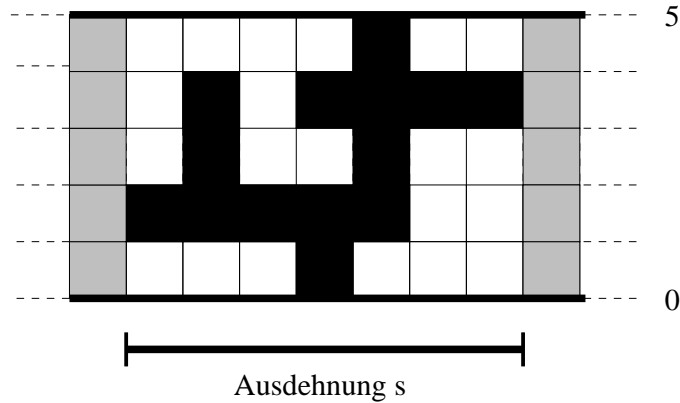
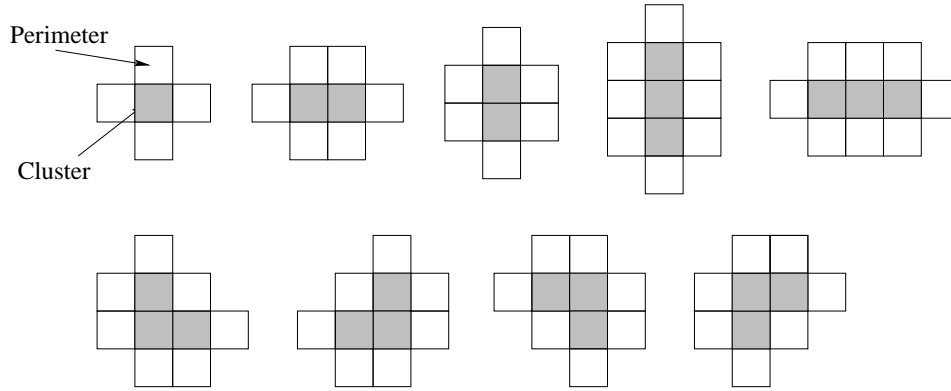


Abbildung 1.9: Cluster mit Ausdehnung  $s$  auf einem Gitterstreifen der Höhe  $l = 5$ ; die Verbindungen von oben nach unten aus unbesetzten Gitterplätzen sind in grau dargestellt.

### 1.2.2 Clusterzahlen in zwei Dimensionen

Während in einer Dimension ein Cluster nur durch seine Länge eindeutig beschrieben werden konnte, können in zwei Dimensionen aus  $s$  Vertices i. A. viele verschiedene Cluster

Abbildung 1.10: Cluster des Quadratgitters bis zur Masse  $s = 3$ .

gebildet werden. Damit ein bestimmter Cluster auftritt, müssen alle Vertices, die zu ihm gehören, besetzt und die umgebenden Vertices unbesetzt sein. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein bestimmter Cluster auftritt, hängt also von seiner Masse  $s$  und der Länge seines "Perimeters"  $t$  ab und ist durch  $p^s(1-p)^t$  gegeben. Cluster des Quadratgitters bis zur Masse  $s = 3$  sind in Abb. 1.10 gezeigt. Die erwartete Zahl der Cluster der Größe  $s$  pro Vertex ist mit  $q = 1 - p$  für  $s = 1, 2, 3$

$$n_1(p) = pq^4, \quad (1.9)$$

$$n_2(p) = 2p^2q^6, \quad (1.10)$$

$$n_3(p) = 2p^3q^8 + 4p^3q^7, \quad (1.11)$$

und allgemein

$$n_s(p) = \sum_t g_{st} p^s q^t = p^s D_s(p). \quad (1.12)$$

Hierbei sind  $g_{st}$  die Zahlen der Cluster der Masse  $s$  und Umfangslänge  $t$ .  $D_s(p) = \sum_t g_{st} q^t$  sind die sogenannten Perimeterpolynome. Die Zahlen  $g_{st}$  sind für verschiedene Gitter bis  $s$  in der Größenordnung von 20 mit Computern abgezählt worden. Bond-Perkolation kann auf dem Überdeckungsgitter ganz analog als site-Perkolation behandelt werden.

Man kann die Cluster erzeugen, indem man, ausgehend von einem einzigen besetzten Vertex, sukzessive am Perimeter weitere Vertices besetzt. Dieser Prozess ähnelt der Vermehrung eines Zellhaufens durch Zellteilung. Daher werden diese Cluster oft **lattice animals** oder **Gittertiere** genannt.

Ein bestimmter besetzter Vertex kann jeder der  $s$  Vertices eines Clusters der Masse  $s$  sein und ist daher mit Wahrscheinlichkeit  $sn_s(p)$  Teil eines solchen Clusters. Unterhalb von  $p_c$  gehört jeder besetzte Vertex zu einem endlichen Cluster, und da jeder Vertex mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt ist, gilt

$$p = \sum_s sn_s(p) \quad \text{für} \quad p < p_c. \quad (1.13)$$

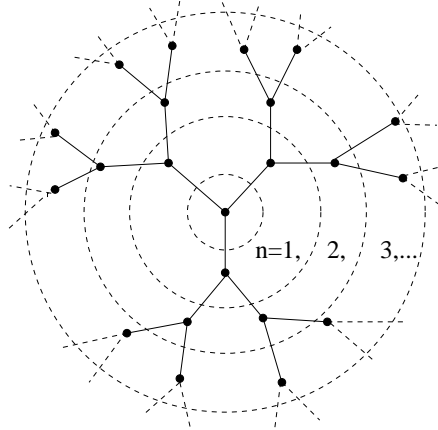


Abbildung 1.11: Ein kleiner Ausschnitt eines Bethe-Gitters mit  $z = 3$ . Das Gitter lässt sich in Schalen  $n = 1, 2, 3, \dots$  um den Ursprung zerlegen.

In der perkolierenden Phase ist ein besetzter Vertex mit Wahrscheinlichkeit  $P_\infty(p)$  Teil des unendlichen Cluster, und daher gilt

$$p = \sum_s s n_s(p) + P_\infty(p). \quad (1.14)$$

Die mittlere Größe der endlichen Cluster erhält man in Analogie zum eindimensionalen Fall durch

$$S_{endl}(p) = \frac{1}{p} \sum_s s^2 n_s(p). \quad (1.15)$$

Clusterzahlen in höheren Dimensionen werden ganz analog zu denen in zwei Dimensionen definiert.

### 1.2.3 Perkolaton auf dem Bethe-Gitter

Auf dem Bethe-Gitter lässt sich das Perkolationsproblem geschlossen lösen. Das Bethe-Gitter hat keine geschlossenen Schleifen, und zwischen zwei Vertices existiert **genau** eine Kette von Vertices, die beide Vertices verbindet. Die eindimensionale Kette ist ein spezielles Bethe-Gitters.

Von einem Vertex des Bethe-Gitters gehen  $z$  Verbindungen zu  $z$  anderen Vertices, von diesen  $z-1$  weitere Verbindungen zu neuen Vertices usw. (siehe Abb. 1.11). Von jedem Vertex gehen also  $z$  Äste aus und der einzige gemeinsame Vertex dieser Äste ist der Ursprungsvertex. Dieser Vertex hat  $z$  nächste Nachbarn,  $z(z-1)$  übernächste Nachbarn und  $z(z-1)^{n-1}$  Vertices, die  $n$  Schritte entfernt sind. Wir betrachten wiederum site-Perkolaton und besetzen Vertices mit Wahrscheinlichkeit  $p$ . Da zwei Vertices durch **genau** eine Kette von Vertices miteinander verbunden sind, ist die Wahrscheinlichkeit, dass zwei  $n$  Schritte entfernte Vertices besetzt und verbunden sind durch  $p^{n+1}$  gegeben. Es gibt gerade  $z(z-1)^{n-1}$   $n$  Schritte entfernte Vertices und ein willkürlich ausgezeichneter Ursprung ist im Mittel mit

$N_n = \frac{pz}{z-1}[p(z-1)]^n$  Vertices im Abstand  $n$  verbunden. Gilt  $p > \frac{1}{z-1}$ , ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Ursprung mit beliebig weit entfernten Vertices verbunden ist, größer 0; ist  $p < \frac{1}{z-1}$  verschwindet  $N_n$  exponentiell mit  $n$ . Die Perkolationsschwelle liegt also bei  $p_c = \frac{1}{z-1}$ . Die mittlere Clustergröße erhält man für  $p(z-1) < 1$  durch Summation der  $N_n$  über  $n$

$$\begin{aligned} S &= p + \frac{pz}{z-1} \sum_{n=1}^{\infty} [p(z-1)]^n = p + \frac{pz}{z-1} \left[ \frac{1}{1-p(z-1)} - 1 \right] \\ &= \frac{p(p+1)}{1-p(z-1)} = \frac{p_c p(1+p)}{p_c - p}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Die mittlere Clustergröße divergiert für  $p \rightarrow p_c$  wie  $S \sim \frac{1}{p_c - p}$ . Der kritische Exponent  $\gamma$  hat also den Wert 1. Auch die übrigen Exponenten können analog bestimmt werden, und man erhält  $\beta = 1$  und  $\nu = 1/2$ .

Die Zahl der Vertices, die weniger als  $N+1$  Schritte vom Ursprung entfernt sind, ist für  $z > 2$  gleich  $V = 1 + z \sum_{n=0}^{N-1} (z-1)^n = (z-1)^N$ . Die Zahl der Vertices, die genau  $N$  Schritte vom Ursprung entfernt sind, ist  $A = z(z-1)^{N-1}$ .  $V$  und  $A$  entsprechen dem Volumen und der Oberfläche einer Kugel mit Radius  $N$ . In üblichen  $d$ -dimensionalen Gittern verhält sich Kugeloberfläche zu Kugelvolumen wie  $A \sim V^{1-1/d}$ . Für große  $d$  sind Oberfläche und Volumen also fast proportional zueinander. Daher kann das Bethe-Gitter mit  $z > 2$  als Modell für Gitter hoher Dimension aufgefasst werden. Tatsächlich stimmen die kritischen Exponenten der Perkolation auf dem Bethe-Gitter mit denen auf Gittern mit  $d > 19$  überein. Vermutlich gilt diese Übereinstimmung sogar herab bis  $d = 6$ . Für  $z = 2$  wird der eindimensionale Fall reproduziert.

Bond-Perkolation wird ganz analog behandelt und man erhält die gleiche Perkolationsschwelle.

Die Euler-Charakteristik eines Baumgraphen ist (zur Euler-Charakteristik siehe Kapitel 2) die Differenz der Zahl der Vertices und Kanten. Betrachtet man die Vertices und Kanten innerhalb von  $N$  Schalen um den Ursprung, kann die mittlere Euler-Charakteristik des Graphens in diesem Beobachtungsfenster bestimmt werden. Bei der site-Perkolation werden Vertices mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt und eine Kante zwischen zwei Vertices ist mit Wahrscheinlichkeit  $p^2$  vorhanden. Entsprechend sind bei bond-Perkolation alle Vertices besetzt, und Kanten sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  vorhanden. Beide Fälle unterscheiden sich also nur durch einen Faktor  $p$ . Für die Euler-Charakteristik bei site-Perkolation ergibt sich

$$\chi_N^{site}(p) = p \left[ 1 + z \sum_{n=1}^N (z-1)^{n-1} \right] - p^2 \left[ z \sum_{n=1}^{N+1} (z-1)^{n-1} \right]. \quad (1.17)$$

Hierbei wurden alle Kanten, die aus dem Beobachtungsfenster hinausführen, mitgezählt. Die Nullstelle  $p_0$  konvergiert für  $N \rightarrow \infty$  gegen  $\frac{1}{z-1}$ . Das gleiche Resultat gilt im Fall der bond-Perkolation. Wie bei Perkolation in einer Dimension, stimmt  $p_0$  mit  $p_c$  auf dem Bethe-Gitter überein.

## 1.3 Perkolationsschwellen

Nachdem Perkolation in groben Zügen vorgestellt wurde, wird im Folgenden Bekanntes zu Perkolationsschwellen zusammengetragen.

### 1.3.1 Rigorose Ungleichungen

Im Allgemeinen sind für Perkolationsschwellen nur sehr grobe Ungleichungen bekannt. Nichttriviale, allgemein gültige Ungleichungen sind  $p_c^{site} \geq p_c^{bond}$  und  $p_c^{bond} \geq \frac{1}{\mu} \geq \frac{1}{z-1}$ , wobei  $\mu$  die Konnektivitätszahl und  $z$  die Koordinationszahl des betrachteten Gitters ist. Die Konnektivitätszahl ist durch  $\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln N_{SAW}^n}{n}$  definiert, wobei  $N_{SAW}^n$  die Zahl der selbstvermeidenden Wege der Länge  $n$  auf dem betrachteten Gitter ist. In zwei Dimensionen folgt aus der matching-Eigenschaft (siehe unten) eine obere Schranke an  $p_c^{site}$ . Da Gitter der Dimension  $d$  perkolieren, wenn  $(d-1)$ -dimensionale Untergitter perkolieren, können Perkolationsschwellen mit  $d$  höchstens abnehmen, sind aber echt größer als 0. Für alle Gitter mit  $d \geq 2$  gilt also  $0 < p_c^{bond} \leq p_c^{site} < 1$ . Auf allen Gittern in  $d \geq 2$  existiert daher eine nicht perkolierende Phase  $p < p_c$  und einen Bereich  $p > p_c$ , in dem ein unendlicher Cluster existiert. Auf einige Gitter, deren Perkolationsschwellen exakt bekannt sind, wird im Kapitel 1.3.2 genauer eingegangen. Für site-Perkolation auf dem Quadrat-, dice- und Sechseckgitter, sowie für bond-Perkolation auf dem Kagomégitter existieren rigorose obere und untere Schranken für die Perkolationsschwellen. Diese Schranken und die zugehörigen Referenzen sind Referenz [14] entnommen.

$$0.5416 \leq p_c^{sq-site} \leq 0.6795 \quad \text{Wierman [40], Men'shikov und Pelikh [24]} \quad (1.18)$$

$$p_c^{hex-bond} \leq p_c^{hex-site} \leq 0.8079 \quad \text{Luczak und Wiermann [17]} \quad (1.19)$$

$$0.5182 \leq p_c^{kag-bond} \leq 0.5335 \quad \text{Wierman [39]} \quad (1.20)$$

$$0.520 \leq p_c^{dice-site} \leq 0.7937 \quad \text{Luczak und Wiermann [17]} \quad (1.21)$$

Um diese Schranken herzuleiten, ist erheblicher mathematischer Aufwand nötig. Darüberhinaus sind wenig rigorose Resultate über Perkolationsschwellen bekannt.

### 1.3.2 Dualität und matching – exakte Perkolationsschwellen

In zwei Dimensionen sind einige Perkolationsschwellen exakt bekannt. Die exakte Bestimmung der Perkolationsschwellen beruht auf der Tatsache, dass es zu jedem zweidimensionalen Gitter ein sog. *duales Gitter* gibt, und die Perkolationsschwellen dieser beiden Gittern miteinander in Verbindung gebracht werden können.

Ein planarer Graph  $G$  lässt sich in die Ebene einbetten, ohne dass sich zwei Kanten schneiden (für eine Definition dieser Begriffe siehe 2.4 oder [7]). Der Graph zerschneidet die Ebene in endliche Gebiete. Setzt man in jedes dieser endlichen Gebiete und in das Gebiet außerhalb des Graphens einen Vertex und verbindet Vertices, deren Gebiete sich an einer Kante von  $G$  berühren, erhält man den dualen Graphen  $G^*$  (siehe Abb. 1.12). Die Dualitätstransformation stiftet eine eins-zu-eins-Korrespondenz zwischen den Kanten des Graphen und

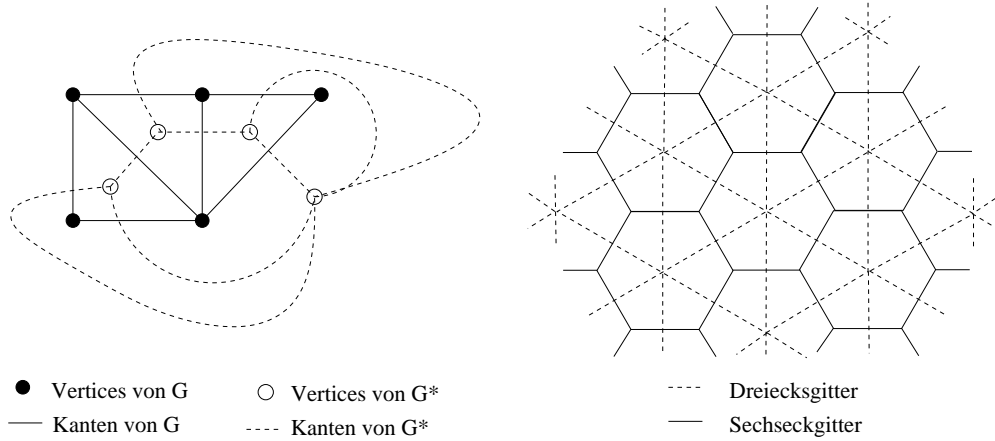


Abbildung 1.12: Links: Jede Kante des Graphen  $G$  wird von einer Kante des dualen Graphen  $G^*$  geschnitten. Rechts: Das Dreiecks- und Sechseckgitter bilden ein Paar dualer Gitter.

denen des dualen Graphens. Zweidimensionale Gitter sind periodisch fortgesetzte Graphen und zu jedem Gitter  $\mathcal{G}$  kann ein duales Gitter  $\mathcal{G}^*$  konstruiert werden. Wir interessieren uns für Paare dualer Gitter. Jede Kante in  $\mathcal{G}^*$  schneidet genau eine Kante in  $\mathcal{G}$  und die Kantenmengen  $E$  und  $E^*$  von  $\mathcal{G}$  und  $\mathcal{G}^*$  können identifiziert werden. Ihre Vertexmengen  $V$  und  $V^*$  sind aber i. A. unterschiedlich.

Wir betrachten nun bond-Perkolation auf  $\mathcal{G}$  und besetzen einen Teil der Kanten  $E' \subset E$  von  $\mathcal{G}$ . Es entsteht ein Subgraph  $G$  mit Vertexmenge  $V$  und Kantenmenge  $E'$ . Da jede Kante aus  $\mathcal{G}$  eine Kante aus  $\mathcal{G}^*$  schneidet, betrachten wir nun den Subgraph  $G^*$  von  $\mathcal{G}^*$  mit Vertexmenge  $V^*$  und Kantenmenge  $E^{*'} = E \setminus E'$ . Die Komponenten von  $G$  bzw.  $G^*$  sind Cluster auf den Gittern  $\mathcal{G}$  bzw.  $\mathcal{G}^*$ . Jeder endliche Cluster auf  $\mathcal{G}$  ist von einem Cluster auf  $\mathcal{G}^*$  umschlossen, denn alle unbesetzten Kanten am Rand eines Clusters werden von besetzten dualen Kanten geschnitten. Umgekehrt gilt dasselbe (siehe Abb. 1.13). Betrachtet man einen großen rechteckigen Ausschnitt des Gitters, so existiert ein Cluster auf  $\mathcal{G}$ , der den linken und rechten Rand des Rechtecks verbindet, genau dann, wenn kein solcher Cluster auf  $\mathcal{G}^*$  den oberen und unteren Rand verbindet. Besetzt man Kanten von  $\mathcal{G}$  mit Wahrscheinlichkeit  $p$ , so entsteht ein komplementäres Perkulationsproblem mit Besetzungswahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  auf  $\mathcal{G}^*$ . Für die Perkulationschwellen gilt

$$p_c^{\text{bond}}(\mathcal{G}) + p_c^{\text{bond}}(\mathcal{G}^*) = 1. \quad (1.22)$$

Das Quadratgitter ist “selbstdual” und  $p_c = \frac{1}{2}$  (siehe Abb. 1.13). Das Dreiecks- und das Sechseckgitter sind ein duales Paar und können durch die sogenannte Stern-Dreiecks-Transformation ineinander überführt werden. Dadurch erhält man für  $p_c$  eine zusätzliche Gleichung und die Lösung  $p_c^{\text{Dreieck}} = 1 - p_c^{\text{Sechseck}} = 2 \sin(\pi/18)$ . Diese Überlegungen gehen auf Sykes und Essam [32] zurück, sind aber nicht im mathematischen Sinne rigoros. Wiernan [38] hat eine verallgemeinerte Stern-Dreieckstransformation auf das bowtie-Gitter angewendet. Die bond-Perkolationsschwelle  $p_c$  ist die Lösung von  $1 - p - 6p + 6p^3 - p^5 = 0$  und hat den numerischen Wert  $p_c = 0.404518 \dots$

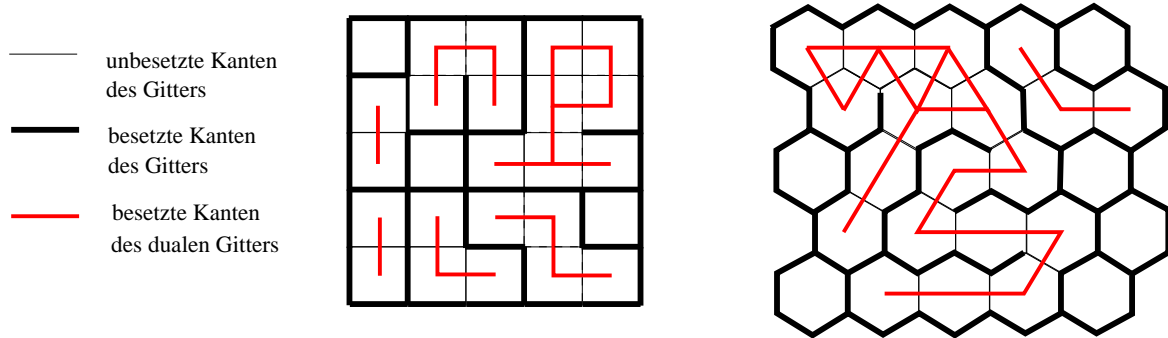


Abbildung 1.13: Komplementäre Besetzung der Kanten eines Paares dualer Gitter am Beispiel des selbstdualen Quadratgitters und des Dreiecks- und Sechseckgitters.

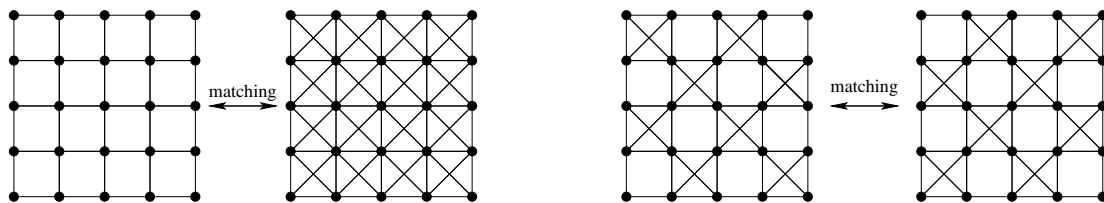


Abbildung 1.14: Links: Ein Vertex des Quadratgitters hat vier nächste Nachbarn, einer des matching-Gitters acht. Rechts: Die Gitter sind selfmatching. Sie sind das Überdeckungsgitter des Quadratgitters.

Jedem bond-Perkulationsproblem entspricht ein site-Perkulationsproblem auf dem Überdeckungsgitter (siehe Abb. 1.3). Also sollte sich die Dualitäts-Eigenschaft auf die site-Perkulation übertragen lassen. Dies ist in der Tat möglich, allerdings muss der Gitterbegriff auf nichtplanare Gitter, sog. “dekorierte Mosaik”, verallgemeinert werden. Man geht von einem planaren Gitter, im folgenden *Mosaik* genannt, aus und ergänzt bei einem Teil der Plaketten alle diagonalen Verbindungen. Eine solche Plakette heißt *dekoriert* und das resultierende, im Allgemeinen nicht mehr planare, Gitter *dekoriertes Mosaik*. Das matching-Gitter  $\mathcal{G}^+$  zu einem dekorierten Mosaik  $\mathcal{G}$  erhält man, indem das Mosaik komplementär dekoriert wird, d.h. die Plaketten die in  $\mathcal{G}$  nicht dekoriert waren, werden in  $\mathcal{G}^+$  dekoriert und umgekehrt (siehe Abb. 1.14).  $\mathcal{G} = (V, E)$  und  $\mathcal{G}^+ = (V, E^+)$  haben die gleiche Vertexmenge, aber i. A. unterschiedliche Kantenmengen. Die Kanten des Mosaiks sind in  $E$  und  $E^+$  enthalten. Die Graphen  $G$  und  $G^+$  mit Vertexmengen  $I \subset V$  und  $I^+ = V \setminus I$  und Kantenmengen  $K = \{x, y \in I | xy \in E\}$  und  $K^+ = \{x, y \in I^+ | xy \in E^+\}$  haben die entsprechende Dualitätseigenschaft: Jede endliche Komponente von  $G$  ist in einem geschlossenen Weg in  $G^+$  enthalten; dies gilt in analoger Weise umgekehrt (siehe Abb. 1.15). Die site-Perkolationsschwellen zweier matching-Gitter ergänzen sich zu 1. Aus der matching-Eigenschaft kann man einfach eine nichttriviale obere Schranke an die site-Perkolationsschwelle gewinnen, denn  $p_c^{site}(\mathcal{G}) = 1 - p_c^{site}(\mathcal{G}^+) \leq 1 - \frac{1}{\mu^+} \leq 1 - \frac{1}{z^+-1} < 1$ . Das Dreiecksgitter ist selfmatching, denn alle Ecken eines Dreiecks sind Nachbarn, und es gibt keine Verbindungen, die ergänzt werden könnten. Daher ist die site-Perkolationsschwelle

des Dreiecksgitters  $p_c = \frac{1}{2}$ . Im matching-Gitter eines planaren Gitters sind alle Plaketten dekoriert und daher alle Vertices auf dem Rand einer Plakette nächste Nachbarn (siehe linker Teil in Abb. 1.14). Ein planares Gitter ist immer ein Subgraph seines matching-Gitters und hat daher eine höhere Perkolationsschwelle als sein matching-Gitter. Daher ist  $p_c^{site} \geq \frac{1}{2}$  für alle planaren Gitter. Das Kagomé-Gitter ist das Überdeckungsgitter des Sechseckgitters, und es gilt  $p_c^{site-Kagome} = p_c^{bond-Sechseck}$ .

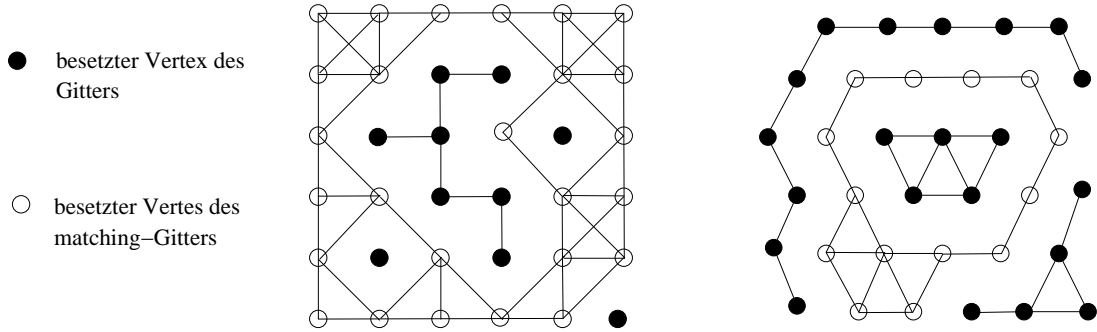


Abbildung 1.15: Komplementär besetzte Paare von matching-Gittern am Beispiel des Quadrat- und Dreiecksgitters.

### 1.3.3 Empirische Formeln für Perkolationsschwellen

In Literatur über Perkolation sind des öfteren empirische Formeln für Perkolationsschwellen in Abhängigkeit von Koordinationszahl  $z$  und Dimension  $d$  vorgestellt worden. Für bond-Perkolation gilt in zwei Dimensionen als grobe Näherung  $p_c \approx \frac{2}{z}$ , für hoch-dimensionale Gitter  $p_c \approx \frac{1}{z-1}$ . Andere Formeln enthalten eine Reihe von Fitparametern und sagen  $p_c$  als Funktion von  $d$  und  $z$  voraus. Tatsächlich variieren Perkolationsschwellen auf Gittern der gleichen Dimension und gleicher Koordinationszahl beträchtlich, so dass eine Vorhersage von Perkolationsschwellen allein aus  $d$  und  $z$  nicht sinnvoll erscheint.

Scher und Zallen [29] beobachteten einen Zusammenhang zwischen site-Perkolationsschwellen und der Packungsdichte  $f$  für zwei- und dreidimensionale Gitter. Die Packungsdichte ist der Anteil des Raums (Ebene), der bedeckt ist, wenn auf jeden Vertex des Gitters eine Kugel (Kreisscheibe) mit Radius der halben Kantenlänge sitzt. Für das Quadrat-, Dreiecks-, Sechseck- und Kagomé-Gitter fanden Scher und Zallen  $f p_c \sim 0.44$ ; in drei Dimensionen für das sc-, bcc- und fcc-Gitter  $f p_c \sim 0.15$ . Suding und Ziff [31] haben diesen Zusammenhang auf alle archimedischen Gitter (siehe Abschnitt 1.4.1) ausgedehnt. Dazu konstruieren sie aus Gittereigenschaften ein generalisiertes  $f$  und schlagen ein quadratisches Polynom in  $f$  als empirische Formel für  $p_c$  vor. Für beide Formeln ist ein Fit an bekannte Perkolationsschwellen nötig. Daher hängen die Vorhersagen der Formeln von den für den Fit verwendeten Perkolationsschwellen ab. Eine Methode, Perkolationsschwellen ohne die Notwendigkeit eines Fits an bekannte Schwellen vorhersagen zu können, ist daher wünschenswert. Eine solche Methode ist von Balberg *et al.* [34] für Kontinuumsperkolation



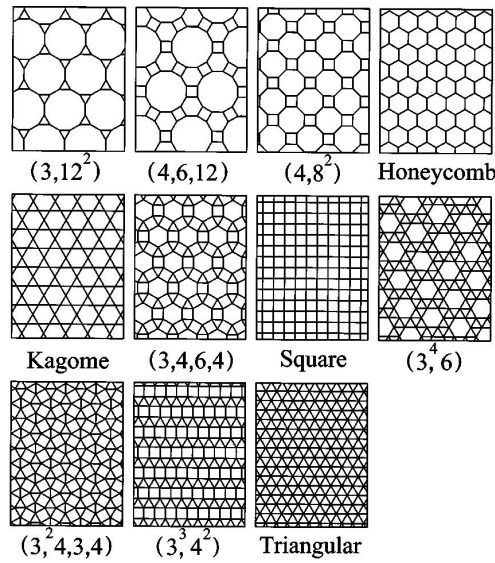


Abbildung 1.16: Die elf archimedischen Gitter. Die Zahlenfolgen unter den Gitterausschnitten sind die Vertexkonfigurationen der Gitter, die keine gebräuchlichen Namen haben (siehe Text). Die Abbildung wurde aus [31] übernommen.

vorgeschlagen worden. Aus der Bedingung, dass die mittlere Zahl der Nachbarn der Konstituenten einen bestimmten Wert übersteigt, wird ein Perkulationskriterium abgeleitet. Eine andere Möglichkeit Vorhersagen von Perkulationsschwellen zu machen, bietet die mittlere Euler-Charakteristik der Perkulationskonfigurationen.

## 1.4 Euler-Charakteristik und Perkolation

Wie eingangs erwähnt, war zu Beginn dieser Arbeit für eine Reihe von site-Perkulationsproblemen empirisch bekannt, dass die Nullstelle der mittleren Euler-Charakteristik in der Nähe der Perkulationsschwelle liegt [36]. Für Kontinuumsperkolation wurde über die Beziehung zwischen Euler-Charakteristik und Perkolation erstmals in Ref. [22] berichtet. Die prominentesten Beispiele dieses Befundes sollen hier als Ausgangsbasis vorgestellt werden. Die Mittelwerte der Euler-Charakteristik sind für Konfigurationen, die in einem Perkulationsproblem mit Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  entstehen, Polynome in  $p$ . Wie man diese Polynome berechnet, wird im Abschnitt 2.5 dargelegt.

### 1.4.1 Zwei Dimensionen - archimedische Gitter

Es gibt genau elf zweidimensionale Gitter [10], die nur aus regelmäßigen Polygonen der gleichen Kantenlänge bestehen, und deren Vertices alle äquivalent sind. Diese Gitter heißen archimedische Gitter und sind in Abbildung 1.16 dargestellt. Da die Umgebungen aller Vertices bis auf eine Drehung identisch sind, lassen sich die Gitter durch die Folge

$(n_1, \dots, n_z)$  der Eckenzahlen der Polygone, die einen Vertex im Uhrzeigersinn umgeben, charakterisieren. Folgen  $a_i$  gleiche Polygone aufeinander, so wird kurz  $n_i^{a_i}$  geschrieben. Im Dreiecksgitter umgeben jeden Vertex sechs Dreiecke und die Vertexkonfiguration ist  $(3^6)$ . Analog sind die Vertexkonfigurationen des Quadrat-, des Sechseck- und des Kagomégiters,  $(4^4)$ ,  $(6^3)$  bzw.  $(3, 6, 3, 6)$ . Für die übrigen Gitter siehe Abb. 1.16.

Die Euler-Charakteristik einer zweidimensionalen Figur ist die Differenz der Zahl der Komponenten der Figur und der Zahl der Löcher in diesen Komponenten. Die mittlere Euler-Charakteristik  $\chi(p)$  von Perkulationskonfigurationen auf Gittern ist also die mittlere Zahl der Cluster, abzüglich der mittleren Zahl der Löcher in diesen Clustern. Die mittlere Euler-Charakteristik des Quadratgitters ist links in Abbildung 1.17 dargestellt. Die mittleren Euler-Charakteristiken aller archimedischen Gitter sind bekannt [36], und haben eine Nullstelle  $p_0$  zwischen 0 und 1. Auch die site-Perkolationsschwellen  $p_c$  aller archimedischen Gitter [31] sind bekannt. Die Nullstelle  $p_0$  liegt bei allen archimedischen Gittern knapp über  $p_c$ . Darüberhinaus liegt der Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristik knapp unter  $p_c$ , und das arithmetische Mittel aus Nullstelle und Wendepunkt liefert eine exzellente Approximation von  $p_c$ . Diese Befunde sind in Tabelle 1.1 und Abbildung 1.18 zusammengetragen.

Vertexkonfiguration	$p_0$	$p_0^{(2)}$	$\frac{p_0 + p_0^{(2)}}{2}$	$p_c$ [31]
$3, 12^2$	0.8395	0.7631	0.80131	0.8079
$4, 6, 12$	0.7833	0.7012	0.74227	0.7478
$4, 8^2$	0.7689	0.6935	0.73120	0.7292
$6^3$ Sechseckg.	0.7413	0.6687	0.70501	0.6970
$3, 6, 3, 6$ Kagomé.	0.6756	0.6231	0.64936	0.6527
$3, 4, 6, 4$	0.6468	0.5994	0.62311	0.6218
$4^4$ Quadratg.	0.6180	0.5774	0.59769	0.5927
$3^4, 6$	0.5913	0.5625	0.57686	0.5750
$3^2, 4, 3, 4$	0.5616	0.5408	0.55119	0.5508
$3^3, 4^2$	0.5616	0.5408	0.55119	0.5502
$3^6$ Dreiecksg.	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Tabelle 1.1: Euler-Charakteristik und site-Perkolation auf archimedischen Gittern: Die Nullstellen  $p_0$  und die Wendepunkte  $p_0^{(2)}$  der mittleren Euler-Charakteristik archimedischer Gitter sind obere bzw. untere Schranken für die site-Perkolationsschwellen  $p_c$ . Das arithmetische Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  ist eine exzellente Approximation von  $p_c$ .

### 1.4.2 Dreidimensionale Gitter

Die Euler-Charakteristik einer dreidimensionalen Figur ist die Zahl der Komponenten, minus der Zahl der Henkel, plus der Zahl der Einschlüsse der Figur. Für Perkulationskonfigurationen auf Gittern lässt sich eine mittlere Euler-Charakteristik  $\chi(p)$  berechnen. In drei

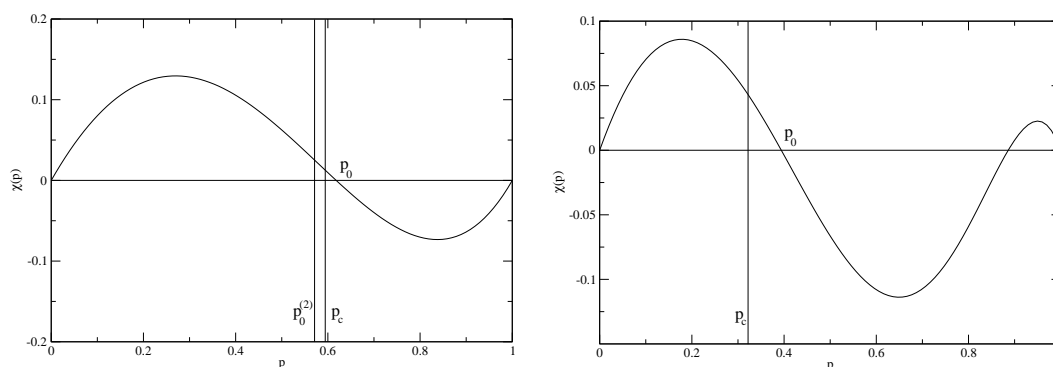


Abbildung 1.17: Die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex  $\chi(p)$  des zweidimensionalen Quadratgitters (links) und des dreidimensionalen einfach kubischen Gitters (rechts). Die Nullstelle  $p_0$  von  $\chi(p)$ , die Perkolationschwelle  $p_c$  der Gitter, sowie im zweidimensionalen Fall der Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  von  $\chi(p)$  sind jeweils markiert.

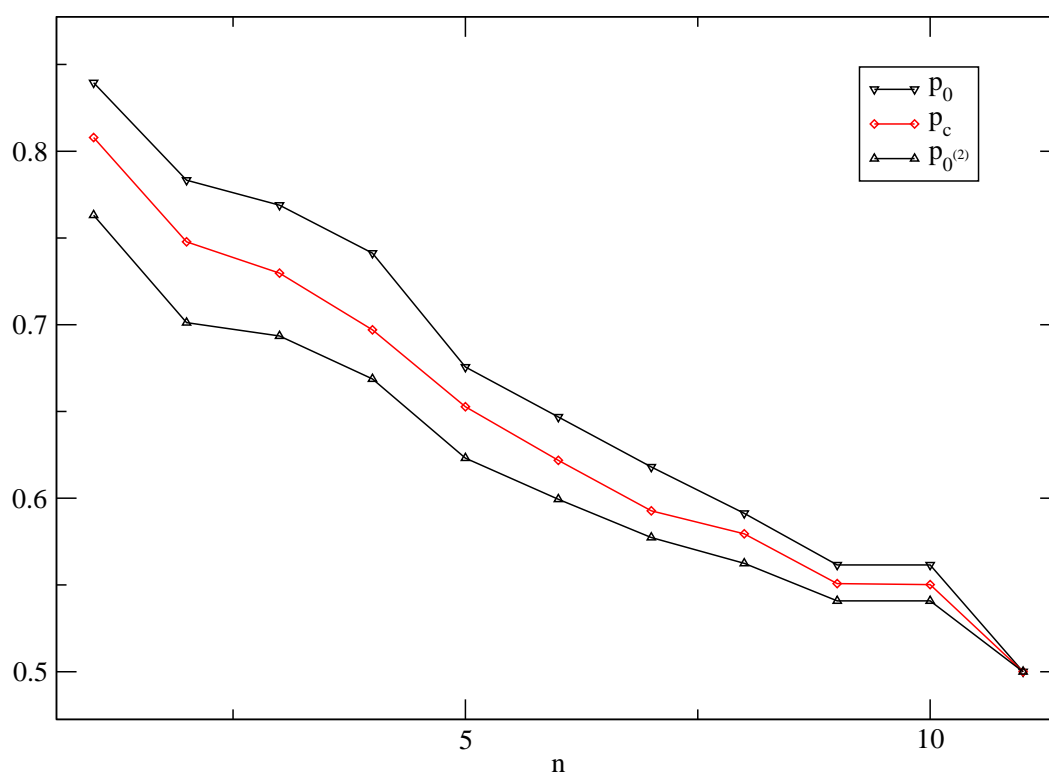


Abbildung 1.18: Die site-Perkolationschwelle  $p_c$  archimedischer Gitter liegen zwischen der Nullstelle  $p_0$  und dem Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der mittleren Euler-Charakteristik.

Gitter	# Gitternachbarn	$p_0$	$p_c$
sc	6	0.397	0.3114(4)
sc	26	0.114	0.097
bcc	14	0.211	0.175
fcc	12	0.237	0.1994(2)

Tabelle 1.2: Dreidimensionale Gitter: Nullstellen  $p_0$  der Euler-Charakteristik verglichen mit den Perkolationsschwellen  $p_c$ . Die Werte der Perkolationsschwellen des sc-Gitters mit 6 und des fcc-Gitter mit 12 Nachbarn stammen aus [18], die übrigen aus [6]. Letztere sind vermutlich sehr ungenau.

Dimensionen hat  $\chi(p)$  zwei Nullstellen zwischen 0 und 1. Die mittlere Euler-Charakteristik ist für kleine  $p$  (isolierte Cluster überwiegen) und für  $p$  nahe 1 (Einschlüsse überwiegen) positiv. Zwischen diesen beiden Bereichen ist  $\chi(p)$  negativ. Die mittlere Euler-Charakteristik des einfach kubischen Gitters ist rechts in Abbildung 1.17 dargestellt. Die kleinere Nullstelle der Euler-Charakteristik liegt beim einfach-kubischen (sc-) Gitter mit sechs und 26 Nachbarn, beim fcc- mit 12 und beim bcc-Gitter mit 14 Nachbarn über der Perkolationsschwelle (siehe Tabelle 1.2). Der erste Wendepunkt von  $\chi(p)$  liegt bei diesen Gittern über der Perkolationsschwelle und liefert leider keine untere Schranke.

### 1.4.3 Hyperkubische Gitter

Durch eine Rekursion lässt sich die mittlere Euler-Charakteristik hyperkubischer Gitter beliebiger Dimension  $d$  ausrechnen (siehe Mecke [21] oder Jung [15]). Aus

$$\chi^d(p) = \sum_{i=0}^d (-1)^i \binom{d}{i} p^{2^i} = p - dp^2 + \frac{d(d-1)}{2} p^4 - \dots \quad (1.23)$$

erhält man für große  $d$   $p_0 \approx \frac{1}{d} = \frac{2}{z}$ . Mit steigender Dimension des Gitters sollte sich die Perkolationsschwelle der des Bethe-Gitters  $p_c = \frac{1}{z-1}$  annähern. Daher gilt für Perkolationsschwellen hoch-dimensionaler hyperkubischer Gitter  $p_0 \approx 2p_c$ .

### 1.4.4 Kontinuumsperkolation

Mit Methoden der Integralgeometrie ([22] und [21]) kann die mittlere Euler-Charakteristik des Booleschen Kornmodells exakt bestimmt werden. Im Booleschen Kornmodell werden Punkte nach einem Poissonprozess mit Punktdichte  $\rho$  verteilt und an diese Punkte unabhängig voneinander konvexe Körper angeheftet. Die mittlere Euler-Charakteristik hängt neben der Punktdichte  $\rho$  auch von geometrischen Eigenschaften der Körper ab. In zwei Dimensionen geht das Verhältnis von Umfang  $u$  und Fläche  $f$  der Körper in die Euler-Charakteristik ein, und mit  $I = \frac{u^2}{4\pi f}$  erhält man für die Euler-Charakteristik pro Fläche

$$\chi_2(\eta) = \eta(1 - I\eta)e^{-\eta}. \quad (1.24)$$

Hier ist  $\eta$  das Produkt aus  $\rho$  und der Fläche der Körper. In drei Dimensionen hängt  $\chi$  vom Verhältnis der Oberfläche  $f$  und der mittleren integralen Krümmung  $h$  zum Volumen  $v$  ab. Mit  $I_1 = \frac{fh}{12\pi v}$ ,  $I_2 = \frac{f^3}{36\pi v^2}$  und  $\eta = \rho v$  ist die Euler-Charakteristik pro Volumen

$$\chi_3(\eta) = \eta(1 - 3I_1\eta + \frac{3\pi^2}{32}I_2\eta^2)e^{-\eta}. \quad (1.25)$$

Die Perkolationsschwellen  $\eta_c$  des Booleschen Kornmodells monodisperser Kugeln ist in zwei und drei Dimensionen numerisch bekannt und die Nullstelle  $\eta_0$  von  $\chi_d(\eta)$  liegt zwei Dimensionen knapp unter und in drei Dimensionen knapp über  $\eta_c$ .

Auf Kontinuumsperkolation und hyperkubische Gitter wird im Folgenden nicht mehr eingegangen. Sie werden hier nur der Vollständigkeit halber beschrieben. In dieser Arbeit werden die empirischen Beobachtungen, dass

- **die Perkolationsschwellen zweidimensionaler Gitter zwischen der Nullstelle und dem Wendepunkt der mittleren Euler-Charakteristik liegen,**
- **die Nullstelle der mittleren Euler-Charakteristik dreidimensionaler Gitter über deren Perkolationsschwelle liegt,**

untersucht. Im folgenden Kapitel wird zunächst die Euler-Charakteristik genauer betrachtet.



# Kapitel 2

## Euler-Charakteristik

Für die Anzahl der Ecken  $e$ , die der Kanten  $k$  und die der Flächen  $f$  eines Würfels gilt  $e - k + f = 2$ . Teilt man eine Fläche des Würfels, entstehen neue Ecken oder Kanten, die den Beitrag der zusätzlichen Fläche wegheben, und es gilt weiterhin  $e - k + f = 2$ . Der Eulersche Polyedersatz besagt, dass diese Beziehung für alle konvexen Polyeder  $P$  gilt [35]. Für eine Figur  $F$ , die nur aus Flächen, Kanten und Ecken besteht, definiert man die Euler-Charakteristik durch

$$\chi(F) := e - f + k. \quad (2.1)$$

Die Euler-Charakteristik ist unabhängig von der Zerlegung und daher eine topologische Invariante von  $F$ . Deformiert man  $F$ , bleibt  $\chi(F)$  konstant. Es gibt eine Reihe von Möglichkeiten, die Euler-Charakteristik einer gegebenen Figur auszurechnen. Im ersten Teil des Kapitels werden die Facetten von  $\chi$ , die für diese Arbeit relevant sind, vorgestellt. Der zweite Teil beschäftigt sich mit Methoden, die Euler-Charakteristik von Gitterclustern auszurechnen.

### 2.1 Euler-Charakteristik auf dem Konvexring

Die Euler-Charakteristik wurde von Hadwinger [12] axiomatisch für alle endlichen Vereinigungen und Durchschnitte konvexer Körper eingeführt. Ein  $d$ -dimensionaler konvexer Körper ist eine kompakte, d.h. beschränkte und abgeschlossene, konvexe Teilmenge des  $\mathbb{R}^d$ , die in keiner nieder-dimensionalen affinen Hyperebene enthalten ist. Man definiert für alle konvexen Körper  $A$  die Euler-Charakteristik durch  $\chi(A) := 1$  und für die leere Menge durch  $\chi(\emptyset) := 0$ . Da der Durchschnitt zweier konvexer Körper wiederum ein konvexer Körper ist, kann man die Euler-Charakteristik mit der Definition

$$\chi(A \cup B) := \chi(A) + \chi(B) - \chi(A \cap B) \quad (2.2)$$

auf Vereinigungen von konvexen Körpern, die im Allgemeinen nicht konvex sind, ausgedehnt werden. Die Menge aller endlichen Vereinigungen und Durchschnitte konvexer Körper ist unter weiteren Vereinigungen und Schnitten abgeschlossen und bildet den Konvexring  $\mathcal{K}$ . Durch (2.2) ist  $\chi$  auf dem gesamten Konvexring definiert. Die so definierte

Euler-Charakteristik ist immer eine ganze Zahl und bleibt deshalb bei kontinuierlichen Deformationen der Körper konstant. Der Rand  $\partial A$  eines  $d$ -dimensionalen konvexen Körpers  $A$  ist homotop zu einer  $(d-1)$ -Sphäre und es gilt  $\chi(\partial A) = 0$  falls  $d$  gerade und  $\chi(\partial A) = 2$  falls  $d$  ungerade ist.

Für eine Vereinigung von konvexen Körpern  $X = \cup_i A_i$  folgt durch Induktion aus (2.2)

$$\chi(X) = \chi\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i \chi(A_i) - \sum_{i < j} \chi(A_i \cap A_j) + \sum_{i < j < k} \chi(A_i \cap A_j \cap A_k) - \cdots \quad (2.3)$$

Am Beispiel des Randes  $\partial W$  eines Würfels  $W$  soll die axiomatische Definition der Euler-Charakteristik erläutert werden. Der Rand eines Würfels ist die Vereinigung seiner sechs Flächen  $\cup_{i=1}^6 F_i$ . Wendet man Gleichung (2.3) auf  $\partial W$  an, so können die einzelnen Summen den Flächen, Kanten und Ecken zugeordnet werden. Die erste Summe ist die Anzahl der Flächen  $f$ , denn  $\chi(F_i)$  ist 1. Der Durchschnitt zweier Flächen ist entweder leer oder eine Kante, deren Euler-Charakteristik 1 ist. Daher ist die zweite Summe gleich der Zahl der Kanten. Entsprechend ist der Durchschnitt dreier Flächen entweder eine Ecke oder leer, und die dritte Summe ist gleich der Zahl der Ecken. Der Durchschnitt von mehr als drei Flächen ist leer. Für den Rand eines Würfels stimmt die Euler-Charakteristik auf dem Konvexring also mit  $\chi(\partial W) = e - k + f$  überein. Die Berechnung der Euler-Charakteristik mit Gleichung (2.3) wird aber sehr aufwendig, wenn viele der  $A_i$  einen nichtleeren Durchschnitt haben.

Die Euler-Charakteristik einer beliebigen Figur, die eine Zerlegung in konvexe Zellen (Ecken, Kanten, Flächen, Polyeder und deren höherdimensionale Analoga) zulässt, ist die alternierende Summe  $\sum_{k=0}^d (-1)^k \lambda_k$  der Anzahl  $k$ -dimensionaler Zellen  $\lambda_k$  [35]. Es ist zweckmäßig,

die Figur als disjunkte Vereinigung der Zellen ohne ihren Rand zu betrachten und für konvexe  $k$ -dimensionale Zellen ohne Rand  $\chi(\tilde{K}) = (-1)^k$  mit  $\tilde{K} = K \setminus \partial K$  zu definieren. Die Euler-Charakteristik ist dann einfach die Summe der Beiträge der randlosen Zellen. Randlose  $k$ -dimensionale Zellen sind offene Teilmengen einer  $k$ -dimensionalen Hyperebene.

## 2.2 Euler-Charakteristik und Gauß'sche Krümmung

Falls ein Körper einen hinreichend glatten Rand hat, stiftet ein verallgemeinertes Gauß-Bonnet-Theorem einen Zusammenhang zwischen der topologischen Invariante  $\chi$  und dem Oberflächenintegral der Gauß'schen Krümmung.

Die Oberfläche  $\partial X$  eines hinreichend glatten  $d$ -dimensionalen Gebiets  $X$  ist eine kompakte, orientierbare,  $(d-1)$ -dimensionale Mannigfaltigkeit ohne Rand (der Rand eines Randes ist  $\emptyset$ ) in  $\mathbb{R}^d$ . Die Orientierung wird durch den nach außen gerichteten Normalenvektor  $\mathbf{n}(x)$  gegeben. Die Gauß'sche Krümmung  $\kappa(x)$  ist die Jacobi-Determinante der Gaußabbildung  $g : \partial X \rightarrow S^{d-1}$  mit  $g(x) = \mathbf{n}(x)$ . Für ein kompaktes glattes Gebiet  $X$  im  $\mathbb{R}^d$  gilt, dass der Grad der Gaußabbildung auf  $\partial X$  gleich der Euler-Charakteristik von  $X$  ist (siehe das Buch von Bredon [2], Abschnitt VI, Theorem 12.11).

$$\chi(X) = \deg(g) = \frac{1}{\omega_{d-1}} \int_{\partial X} \kappa(x) d\mathcal{O}, \quad (2.4)$$



wobei  $\omega_{d-1}$  die Oberfläche der Einheitssphäre  $\mathbb{S}^{d-1}$  und  $\deg(g)$  der Grad der Gaußabbildung  $g$  ist. Der Grad einer Abbildung gibt, grob gesagt, an, wie oft das Bild der Abbildung die Sphäre  $S^{d-1}$  überdeckt.

Ist  $d$  ungerade, gilt für  $\partial X$  das klassische Gauß-Bonnet-Theorem

$$\chi(\partial X) = \frac{2}{\omega_{d-1}} \int_{\partial X} \kappa(x) d\mathcal{O} \quad (2.5)$$

und damit  $\chi(\partial X) = 2\chi(X)$ . Für gerade  $d$  ist  $\chi(\partial X) = 0$ .

Für spätere Anwendungen ist es sinnvoll die Euler-Charakteristik auch für Körper, die ihren Rand nicht enthalten, zu definieren, wie dies für konvexe Zellen schon angedeutet wurde. Dies geschieht unter Ausnützung der Additivität von  $\chi$  durch

$$\chi(X \setminus \partial X) := \chi(X) - \chi(\partial X) = (-1)^{d+1} \chi(X). \quad (2.6)$$

Eine solche Definition der Euler-Charakteristik für offene Mengen kann problematisch sein, führt bei umsichtiger Anwendung aber auf keine Schwierigkeiten.

Der Zusammenhang zwischen integraler Oberflächenkrümmung und der Euler-Charakteristik kann auch über den Steinerschen Satz aus der Integralgeometrie erhalten werden. Für konvexe Körper lässt sich das Parallelvolumen durch Integrale über elementarsymmetrische Funktionen der Hauptkrümmungen ausgedrücken. Über den Steinerschen Satz werden die Minkowski-Funktionale, darunter die Euler-Charakteristik, mit den Krümmungintegralen durch Koeffizientenvergleich identifiziert. Durch die Additivität lassen sich die so gewonnenen Beziehungen auf den Konvexring ausdehnen (siehe [28] oder [21]).

Die Oberflächenkrümmung eines Polyeders im  $\mathbb{R}^3$  ist in den Ecken ‐konzentriert‐. Den Normalenvektoren der eine Ecke umgebenden Flächen entsprechen Punkte auf der Sphäre. Verbindet man diese Punkte mit Großkreisen, entspricht die eingeschlossene Fläche der Gaußschen Krümmung dieser Ecke. Abhängig vom Umlaufsinn und der Umlaufzahl wird der Beitrag negativ oder positiv und mit unterschiedlicher Multiplizität gezählt. Summation über die Beiträge aller Ecken liefert das Gauß-Bonnet-Theorem für Polyeder in drei Dimensionen (siehe Banchoff [1]).

## 2.3 Morsetheorie

Auf einem  $d$ -dimensionalen Körper  $X$ , der im  $\mathbb{R}^d$  eingebettet ist, lässt sich durch den Abstand  $r(x)$  eines Punktes  $x \in X$  von einer Hyperebene  $H$  eine Höhenfunktion definieren. Hat der Körper einen hinreichend glatten Rand, so ist  $h(x) = r(x)|_{x \in \partial X}$  in geeigneter Parametrisierung zweimal stetig differenzierbar.  $h(x)$  hat mindestens zwei kritische Punkte, in denen  $\nabla h$  verschwindet. In drei Dimensionen entsprechen diesen kritischen Punkten die Minima, Maxima und Sattelpunkte. Wenn die Hessematrix der Höhenfunktion  $(H_{ij}) = \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x_i \partial x_j} \right)$  an den kritischen Punkten nicht singular ist, heisst  $h(x)$  Morsefunktion. Die Morsezahl  $m_\lambda$  ist die Anzahl derjenigen kritischen Punkte, deren Hessematrix  $\lambda$  negative Eigenwerte hat. Nach dem Morsetheorem [26] gilt, dass die alternierende Summe

$\sum_{\lambda=0}^{d-1} (-1)^\lambda m_\lambda$  gleich der alternierenden Summe der Betti-Zahlen von  $\partial X$  und damit gleich der Euler-Charakteristik  $\chi(\partial X)$  ist.

Auch das Morsetheorem kann, ganz analog zum Gauß-Bonnet-Theorem, auf Polyeder in drei Dimensionen verallgemeinert werden. Die kritischen Punkte sind gerade die Ecken des Polyeders. Man wählt einen Vektor  $\mathbf{n}$ , der auf keiner Fläche oder Kante des Polyeders senkrecht steht. Um den Index einer Ecke  $e$  zu bestimmen, betrachtet man einen kleinen Kreis um  $e$ , der in einer Ebene mit Normalenvektor  $\mathbf{n}$  liegt. Die Zahl  $c(e)$  der Schnittpunkte des Kreises mit dem Polyeder liefert über  $i(e) = 1 - \frac{c(e)}{2}$  den Index der Ecke. Summation der Indices aller Ecken ergibt  $\chi$  (siehe Banchoff [1]).

### 2.3.1 Schnittrekursion

Die Schnittrekursion ist ein eng mit der Morsetheorie verwandtes Verfahren, die Euler-Charakteristik auszurechnen. Sei ein Körper  $X$  mit Rand  $\partial X$  gegeben. Statt einer Höhenfunktion  $h_{\mathbf{n}}$  auf  $\partial X$  betrachtet man eine Schar von Hyperebenen  $E_r$  mit Normalenvektor  $\mathbf{n}$  und Abstand  $r$  vom Ursprung. Die Euler-Charakteristik des Schnitts von  $E_r$  mit  $X$  ändert sich mit  $r$  nur, wenn ein kritischer Punkt der entsprechenden Höhenfunktion  $h_{\mathbf{n}}$  auf  $\partial X$  in  $E_r$  liegt. Die Änderung von  $\chi(E_r \cap X)$  ist abhängig vom Index des kritischen Punktes. Die Euler-Charakteristik  $\chi(X)$  ergibt sich durch Summation über die Änderungen von  $\chi(E_r \cap X)$  an allen Werte  $r_c$ , an denen kritische Punkte von  $h_{\mathbf{n}}$  liegen:

$$\chi(X) = \sum_{r_c} \chi(E_{r_c} \cap X) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(E_{r_c + \epsilon} \cap X). \quad (2.7)$$

Dadurch kann die Berechnung der Euler-Charakteristik rekursiv auf Schnitte in immer kleineren Dimensionen zurückgeführt werden. Eine Herleitung für  $X$  aus dem Konvexring ist in [11] gegeben. Für ein-, zwei- und dreidimensionale Systeme ist das Verfahren leicht einzusehen und soll hier kurz vorgeführt werden.

In einer Dimension ist  $X$  ein abgeschlossenes Intervall  $[a, b]$  der reellen Zahlen. Die Endpunkte des Intervalls sind die kritischen Punkte, und eine Hyperebene besteht aus einem Punkt. Die Schnittrekursion (siehe Abb. 2.1) liefert das triviale Ergebnis  $\chi(X) = 1$ . Die Euler-Charakteristik einer eindimensionalen Figur ist daher die Zahl der Komponenten der Figur.

In zwei Dimensionen sind kritische Punkte von  $h_{\mathbf{n}}$  nach oben oder unten ausgerichtete

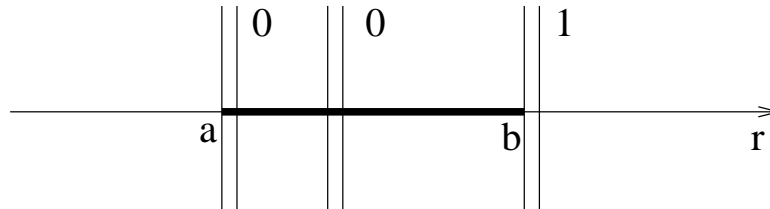


Abbildung 2.1: Schnittrekursion in einer Dimension. Nur der Punkt  $r = b$  liefert einen Beitrag.

Kuppen oder Mulden (siehe Abb. 2.2). Bei nach unten ausgerichteten Mulden oder Kuppen ändert sich die  $\chi(E_r \cap X)$  nicht, bei nach oben ausgerichteten Kuppen ist  $\chi(E_{r_c} \cap X) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(E_{r_c+\epsilon} \cap X) = 1$  und bei nach oben ausgerichteten Mulden ist  $\chi(E_{r_c} \cap X) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(E_{r_c+\epsilon} \cap X) = -1$ . Für den äußeren Rand ergibt sich dadurch ein Beitrag  $+1$ , für alle inneren Ränder  $-1$ . In zwei Dimensionen ist  $\chi(X)$  also die Zahl der Komponenten von  $X$ , abzüglich der Zahl der Löcher in diesen Komponenten.

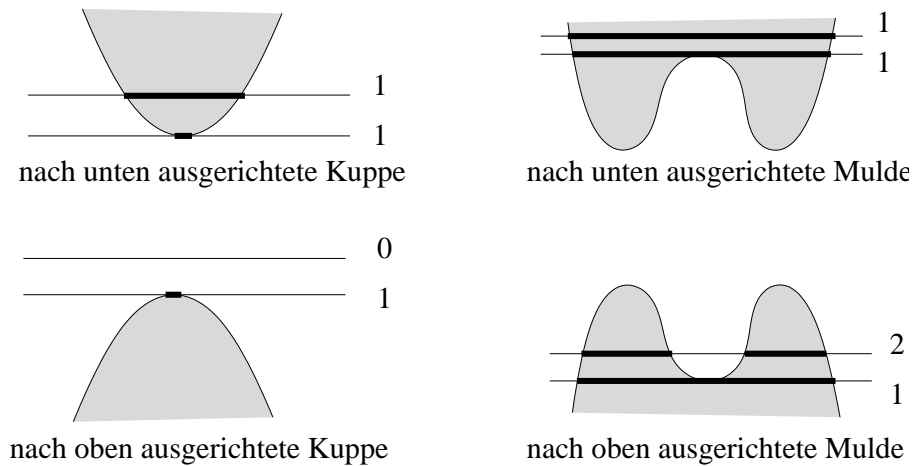


Abbildung 2.2: Schnittrückursion in zwei Dimensionen.

In drei Dimensionen muss zwischen Maxima, Minima und Sattelpunkten unterschieden werden. Man überlegt sich einfach, dass Maxima und Minima in bestimmten Orientierungen einen Beitrag  $+1$  liefern, während Sattelpunkte  $-1$  beitrugen. Die Euler-Charakteristik in drei Dimensionen ist daher die Zahl der Komponenten, abzüglich der Zahl der Tunnel oder Henkel, plus der Zahl der Einschlüsse.

Die Punkte, an denen sich  $\chi(E_r \cap X)$  ändert, lassen sich auch ohne eine differenzierbare Höhenfunktion angeben, und ein glatter Rand von  $K$  ist für die Anwendbarkeit der Schnittrückursion nicht notwendig. Deshalb ist die Schnittrückursion für die Anwendung auf Gittern besonders geeignet.

## 2.4 Euler-Charakteristik in der Graphentheorie

Hier sollen einige Begriffe der Graphentheorie erwähnt werden, auf die im weiteren Verlauf zurückgegriffen wird. Eine umfangreiche Sammlung von Definitionen der Begriffe der Graphentheorie ist in [7] zu finden.

Ein *Graph*  $G$  besteht aus einer Vertexmenge  $V$  und einer Kantenmenge  $E$ , die ungeordnete Paare von Vertices enthält. Jedes Element  $xy \in E$  ist und entspricht einer Verbindung der Vertices  $x, y \in V$ . Ein *Subgraph*  $G'$  besteht aus einer Teilmenge der Vertices  $V' \subset V$  und einer Teilmenge der Kanten  $E' \subset E$  von  $G$ , wobei  $E'$  nur Paare von Vertices enthalten darf, die beide in  $V'$  sind. Ein Graph heisst zusammenhängend, wenn es zu je zwei Vertices  $x, y \in V$  eine Folge von Kanten  $xz_1, z_1z_2, \dots, z_ny$  gibt, die  $x$  und  $y$  verbindet.

Ein zusammenhängender maximaler Subgraph heißt Komponente von  $G$ . Mit der Zahl der Komponenten  $n(G)$ , der Zahl der Vertices  $|V|$  und der Zahl der Kanten  $|E|$  wird die *zyklomatische Zahl*  $z(G)$  eines Graphen  $G$  durch

$$z(G) := |E| - |V| + n(G) \quad (2.8)$$

definiert. Ein Graph heißt *planar*, wenn es möglich ist, ihn in die Ebene zu zeichnen, ohne dass sich zwei Kanten schneiden. Ein in die Ebene eingebetteter planarer Graph zerschneidet die Ebene in endliche Gebiete. Diese endlichen Gebiete entsprechen den Flächen einer ebenen Figur aus Flächen, Kanten und Ecken. Da die Euler-Charakteristik einer ebenen Figur aus  $n$  Komponenten den Wert  $n$  hat, folgt aus dem Eulerschen Satz, dass die Zahl der endlichen Gebiete gleich der zyklomatischen Zahl  $z(G)$  ist [7]. Wenn  $G$  der Graph eines zweidimensionalen planaren Gitters ist, nennen wir die endlichen Gebiete *Plaketten* des Gitters.

Ein Graph heißt *bipartit*, wenn die Vertexmenge  $V$  die disjunkte Vereinigung zweier Mengen  $V_1$  und  $V_2$  ist, so dass jede Kante  $v_1 v_2 \in E$  einen Vertex aus  $v_1 \in V_1$  mit einem Vertex  $v_2 \in V_2$  verbindet.

## 2.5 Euler-Charakteristik auf Gittern

In dieser Arbeit wird die mittlere Euler-Charakteristik von diversen Perkulationskonfigurationen auf Gittern berechnet. Um eine sinnvolle Definition der Euler-Charakteristik für Perkulationskonfigurationen zu erhalten, muss das geometrische Objekt, das mit einem Gittercluster identifiziert werden soll, festgelegt werden. Jeder Cluster, der alle Gitterpunkte innerhalb einer konvexen Hülle enthält, sollte Euler-Charakteristik 1 haben; Löcher sollten nur in Verbindung mit unbesetzten Vertices auftreten. Man muss daher zu jedem Vertex eine Zelle finden, so dass die Vereinigung aller Zellen raumfüllend ist, und die durch Vereinigung mancher Zellen entstehenden Figuren die Topologie der entsprechenden Gittercluster haben.

### 2.5.1 Zweidimensionale Gitter

In zwei Dimensionen wird natürlicherweise die Vereinigung der dualen Plaketten der besetzten Vertices mit den Gitterclustern identifiziert. Die dualen Plaketten zweier benachbarter Vertices teilen eine gemeinsame Kante und sind dadurch verbunden. Aber auch alle dualen Plaketten der Vertices auf dem Rand einer Gitterplakette haben den dualen Vertex dieser Plakette gemein (siehe Abb. 2.3). Im Allgemeinen sind diese Vertices aber nicht benachbart, und die Muster, die entstehen, wenn duale Plaketten besetzt werden, haben nicht die Gittertopologie. Diese Zusammenhangsverhältnisse entsprechen einem Gitter, bei dem alle Vertices auf dem Rand einer Plakette miteinander verbunden sind. Ein solches Gitter heißt vollständig dekoriertes Gitter. In aller Regel wird Perkulation aber auf undekorierten Gittern behandelt. Die Euler-Charakteristik des undekorierten Gitters erhält man über den Umweg, statt den besetzten die unbesetzten Vertices mit dualen Plaketten zu belegen,

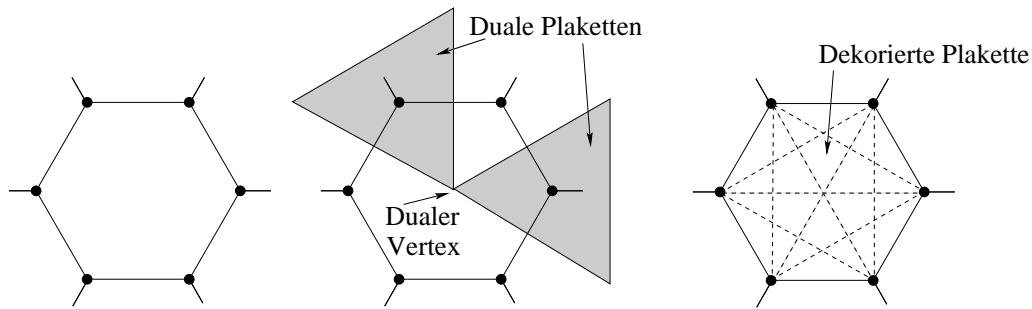


Abbildung 2.3: Links ist eine Plakette des Sechseckgitters gezeigt. In der Mitte sind zwei duale Plaketten eingezeichnet, deren Vertices nicht benachbart sind. Diese Plaketten berühren sich am dualen Vertex des Sechsecks. Rechts ist das dekorierte Sechseck mit allen diagonalen Verbindungen dargestellt.

und die Euler-Charakteristik des unbelegten Komplements zu berechnen (siehe Abb. 2.4). Man berechnet zuerst  $\chi(\bar{X})$  des Musters  $\bar{X}$ , das von den Plaketten auf unbesetzten Vertices gebildet wird. Die Vereinigung von  $\bar{X}$  mit seinem Komplement  $\check{X}$  ist die komplette Ebene, und die Summe der Euler-Charakteristiken von  $\bar{X}$  und  $\check{X}$  ist 1 [35]. Die Euler-Charakteristik der offenen Menge  $\check{X}$  ist daher  $\chi(\check{X}) = 1 - \chi(\bar{X})$ . Wir wollen aber mit abgeschlossenen Mengen arbeiten und müssen daher  $\check{X}$  mit einem geeigneten Abschluss vereinigen. Der Rand  $\partial\bar{X}$  von  $\bar{X}$  ist ungeeignet, da er aus Kurven besteht, die sich selbst schneiden. Die Kurven würden verschiedene Komponenten des Komplements miteinander verbinden und dadurch seine Zusammenhangsverhältnisse verändern. Durch Modifikation der punktförmigen Überlappungen der Plaketten in  $\bar{X}$ , können solche Kurven aber vermieden werden, ohne  $\chi(\bar{X})$  zu verändern (siehe Abb. 2.5). Nachdem diese Modifikationen an  $\bar{X}$  (und an  $\check{X}$ ) durchgeführt worden sind, besteht der Rand  $\partial\bar{X}$  nur noch aus geschlossenen einfachen Kurven, deren Euler-Charakteristik verschwindet. Die Euler-Charakteristik von  $X = \check{X} \cup \partial\bar{X}$  ist also  $\chi(X) = \chi(\check{X}) = 1 - \chi(\bar{X})$ .

Um die mittlere Euler-Charakteristik der Cluster, die durch Besetzten der Vertices eines undekorierten Gitters mit Wahrscheinlichkeit  $p$  entstehen, zu berechnen, setzt man auf die

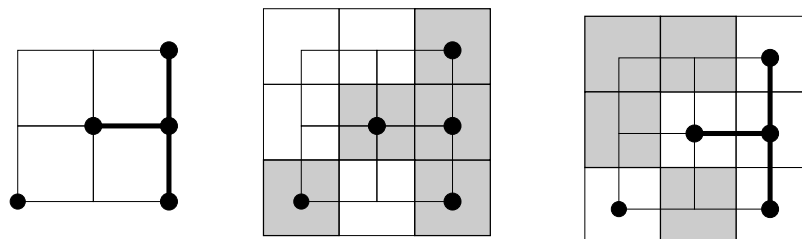


Abbildung 2.4: Links sind zwei Cluster auf dem Quadratgitter dargestellt. Setzt man auf jeden besetzten Vertex ein duales Quadrat (Mitte) entsteht eine zusammenhängende Figur. Besetzt man stattdessen die unbesetzten Vertices (rechts), zerfällt das Komplement in Komponenten, die den Clustern entsprechen.

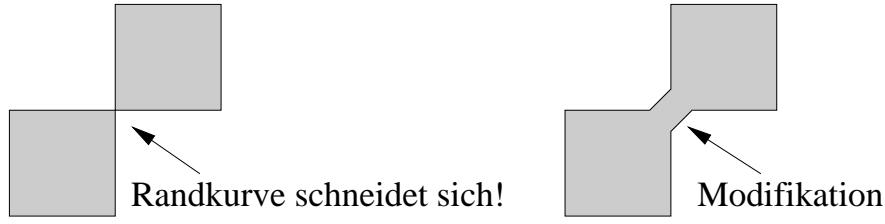


Abbildung 2.5: Notwendige Modifikation am Beispiel des Quadratgitters.

Vertices eines Gitterausschnitts mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  duale Plaketten und bestimmt die mittlere Euler-Charakteristik  $\langle \chi(\bar{X}) \rangle_q$  dieser Muster  $\bar{X}$ . Die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex ist  $\bar{\chi}(q) := \frac{1}{|V|} \langle \chi(\bar{X}) \rangle_q$ , wobei  $|V|$  die Zahl der Vertices im betrachteten Gitterausschnitt ist. Randterme verschwinden im Limes großer Gitterausschnitte [15]. Für die Euler-Charakteristik des undekorierten Gitters erhält man  $\chi(p) = -\bar{\chi}(q)$ ; der Term  $\frac{1}{|V|}$  verschwindet für  $|V| \rightarrow \infty$ .  $\chi(p)$  und  $\bar{\chi}(q)$  sind die Euler-Charakteristiken eines komplementär besetzten Paares von matching-Gittern (siehe Abb. 2.6). Da die mittlere Euler-Charakteristik zweidimensionaler Gitter zwischen 0 und 1 nur eine Nullstelle hat [36], ist die Nullstelle des self-matching Dreiecksgitters  $p_0 = \frac{1}{2}$  und fällt mit der Perkolationschwelle zusammen. Die matching-Eigenschaft  $\chi(p) = -\bar{\chi}(q)$  gilt nicht nur für planare Gitter, sondern auch für beliebige dekorierte Mosaiken (siehe Abschnitt 2.5.1). Für jedes self-matching Gitter gilt damit  $p_0 = p_c = \frac{1}{2}$ . Wenn im Folgenden von der Euler-Charakteristik eines Gitters die Rede ist, sei die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex der Cluster verstanden, die beim Besetzen der Gittervertices mit Wahrscheinlichkeit  $p$  entstehen.

Am Beispiel des Quadratgitters mit Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  soll hier die Berechnung von  $\chi(p)$  mit den unterschiedlichen Methoden vorgeführt werden. Alle Gitterplätze werden mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  mit einem dualen Quadrat belegt. Wir berechnen also  $\bar{\chi}(q)$  des mit Wahrscheinlichkeit  $q$  besetzten matching-Gitters und erhalten durch  $\chi(p) = -\bar{\chi}(1 - p)$  die Euler-Charakteristik des Quadratgitters. Die Berechnung kann mit der Schnittrekursion oder durch Berechnung der Beiträge disjunkter randloser Zellen erfolgen.

Die **Schnittrekursion** ist mit jeder beliebig ausgerichteten Geradenschar  $E_r$  möglich. Die Euler-Charakteristiken der Schnitte mit den Geraden bezeichnen wir mit  $\chi^1(q)$ . Zunächst wählen wir eine Schar  $E_x$  parallel zu einer der Gitterrichtungen. Das Schnittmuster der Geraden mit den belegten Quadraten kann sich nur ändern, wenn die Gerade von einer Reihe Quadrate in die nächste wechselt (siehe Abb. 2.7). Die kritischen Werte von  $x$  liegen daher dort, wo duale Quadrate sich berühren.

Ein Segment der Geraden, also eine Kante des dualen Gitters, ist an kritischen Werten von  $x = x_c$  belegt, wenn mindestens eines der angrenzenden Quadrate belegt ist. Die Zahl der Komponenten des Schnittmusters ist gleich der Zahl der belegten Segmente, auf die ein leeres Segment folgt. Die mittlere Euler-Charakteristik einer Gerade bei  $x = x_c$ , normiert auf die Länge, ist also  $\chi_{x_c}^1(q) = (1 - (1 - q)^2)(1 - q)^2$ . Entsprechend ist für eine Gerade bei

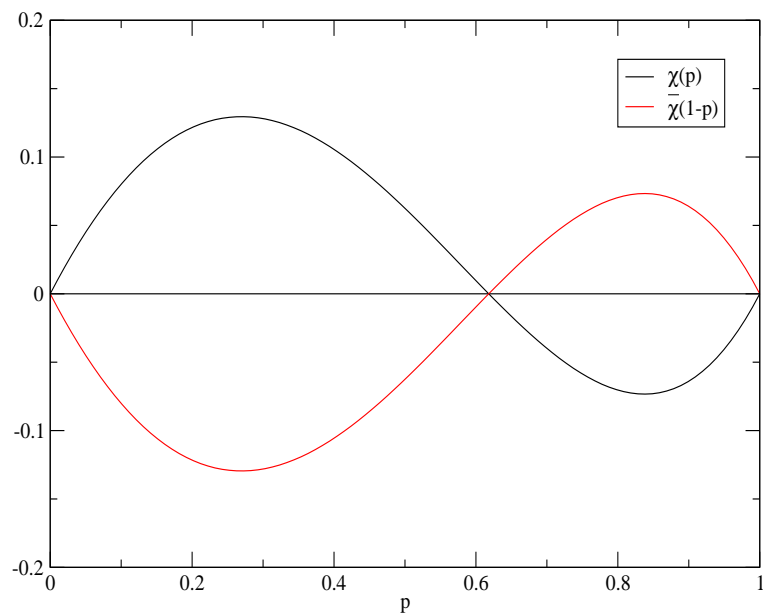


Abbildung 2.6: Mittlere Euler-Charakteristik des Quadratgitters und seines komplementär besetzten matching-Gitters. Siehe Gleichung (2.9).

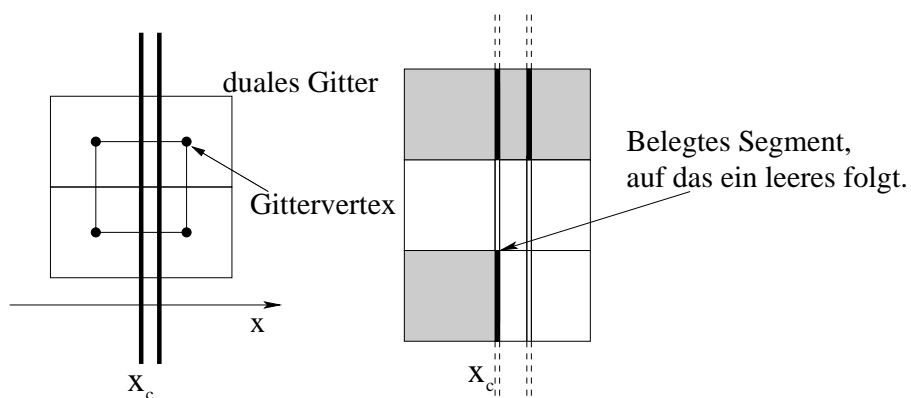


Abbildung 2.7: Schnittrekursion beim Quadratgitter. Kritische Werte von  $x$  liegen dort, wo sich duale Quadrate berühren. Im rechten Teil der Abbildung sind verschiedene Anordnungen und die resultierenden Schnittmuster auf den Geraden gezeigt.

unkritischem  $x$  die Euler-Charakteristik gleich  $\chi_x^1 = q(1 - q)$ . Die Differenz ergibt

$$\bar{\chi}(q) = (1 - (1 - q)^2)(1 - q)^2 - (1 - q)q = q - 4q^2 + 4q^3 - q^4, \quad (2.9)$$

und daher ist die mittlere Euler-Charakteristik des Quadratgitters  $\chi(p) = -\bar{\chi}(1 - p) = p - 2p^2 + p^4$ .

Nun betrachten wir eine Schar von Geraden  $E_r$ , die zu keiner dualen Gitterkante parallel sind. Die Vertices des dualen Gitters entsprechen den kritischen Punkten und wir berechnen die erwartete Änderung von  $\chi_{r_c}^1(q)$  in einer Umgebung des Vertex. In Abb. 2.8 sind die einzigen beiden Konfigurationen gezeigt, bei denen sich  $\chi_{r_c}^1(q)$  beim Überstreichen des Vertex in Pfeilrichtung ändert. Im ersten Fall beträgt die Änderung  $-1$ , und diese Konfiguration hat die Wahrscheinlichkeit  $qp^3$ . Im zweiten Fall ist die Änderung  $+1$ , und die Konfiguration hat Wahrscheinlichkeit  $q^2p$ . Es ergibt sich

$$\bar{\chi}(q) = q(1 - q)^3 - q^2(1 - q) = q - 4q^2 + 4q^3 - q^4 \quad (2.10)$$

und damit  $\chi(p) = -\bar{\chi}(1 - p) = p - 2p^2 + p^4$ . Bei Verwendung dieser Geradenschar sieht man sehr gut, wie der Erwartungswert der Euler-Charakteristik durch lokale Beiträge der einzelnen Vertices zustande kommt, und wie sich unterschiedlichen Zusammenhangsverhältnisse des planaren und vollständig dekorierten Gitters auf die Euler-Charakteristik auswirken.

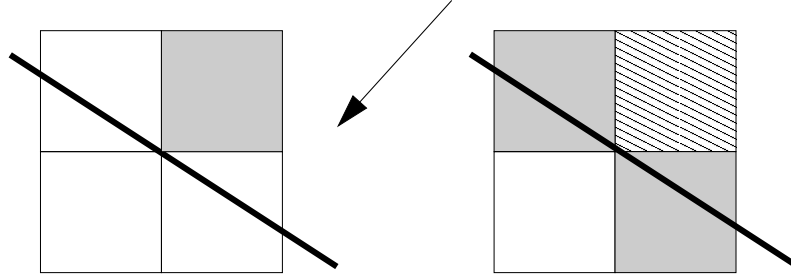


Abbildung 2.8: Die beiden Konfigurationen des Quadratgitters, die zur Schnittrekursion mit den eingezeichneten Geraden in Pfeilrichtung beitragen. Grau gezeichnete Quadrate sind besetzt, weiße unbesetzt. Die linke Konfiguration hat Wahrscheinlichkeit  $q(1 - q)^3$  und trägt  $+1$  bei, die rechte hat Wahrscheinlichkeit  $q^2(1 - q)$  und trägt  $-1$  bei. Der Zustand des schraffierten Quadrates ist für die Änderung von  $\chi_{r_c}^1(q)$  unerheblich.

Eine andere, häufig zweckmäßigere, Methode, die Mittelwerte auszurechnen, besteht darin, das duale Gitter in **disjunkte Zellen** zu zerlegen und die erwartete Anzahl derjenigen Zellen zu bestimmen, die durch Belegen mit dualen Plaketten bedeckt werden [16]. Die disjunkten Zellen sind die Plaketten ohne Rand, die Kanten ohne Endpunkte und die Vertices des dualen Gitters.

- Plaketten sind mit Wahrscheinlichkeit  $q$  belegt und auf ihre Gesamtzahl  $|V|$  wird normiert.



- Duale Kanten sind bedeckt, wenn mindestens eine der angrenzenden Plaketten belegt ist; die Wahrscheinlichkeit dafür ist  $(1 - (1 - q)^2) = 1 - p^2$ . Jede duale Kante entspricht einer Kante des ursprünglichen Gitters. Daher ist die Zahl der dualen Kanten pro dualer Plakette gleich der Zahl der Kanten pro Vertex. Sie beträgt  $\frac{z}{2}$ , denn jede Kante endet an 2 Vertices, und von jedem Vertex gehen  $z$  Kanten aus.
- Ein dualer Vertex ist in allen  $n$  umgebenden dualen Plaketten enthalten und daher mit Wahrscheinlichkeit  $(1 - (1 - q)^n) = 1 - p^n$  präsent.  $n$  ist die Kantenzahl der Plakette des ursprünglichen Gitters, in der der duale Vertex sitzt.

Für das Quadratgitter ist  $z = 4$  und die Zahl der Quadrate ist gleich der Zahl der Vertices. Man erhält wie oben

$$\bar{\chi}(q) = q - 2(1 - (1 - q)^2) + (1 - (1 - q)^4) = q - 4q^2 + 4q^3 - q^4 \quad (2.11)$$

und damit  $\chi(p) = p - 2p^2 + p^4$ .

Die mittlere Koordinationszahl eines Gitters ist über den Euler'schen Satz durch die Zahl der Plaketten bestimmt, und alle Kanten sind bei Besetzung der dualen Plaketten mit der gleichen Wahrscheinlichkeit  $1 - p^2$  vorhanden. Daher hängt die mittlere Euler-Charakteristik eines planaren zweidimensionalen Gitter ausschließlich von der Anzahl seiner Plaketten und deren Kantenzahl ab.

### Gittertiere

In zwei Dimensionen ist die Euler-Charakteristik einer Gitterkonfiguration die Differenz der Anzahl der Cluster und der Anzahl der Löcher in diesen Clustern. Nach Konstruktion ist jedes Loch ein Cluster des komplementär besetzten matching-Gitters. Die Zahl der Cluster pro Vertex auf dem mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzten Gitter ist  $n(p)$ ; die Zahl Cluster pro Vertex des mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  besetzten matching-Gitter ist  $n^*(q)$ . Die mittlere Euler-Charakteristik des Gitters ist also die Differenz von  $n(p)$  und  $n^*(q)$ . Im Abschnitt 1.2.2 wurde die Zahl der Cluster pro Vertex durch eine Summe über alle möglichen endlichen Cluster, die sog. Gittertiere oder lattice animals, ausgedrückt. Mit den Anzahlen der möglichen Cluster  $g_{st}$  bzw.  $g_{st}^*$  der Masse  $s$  und Umfang  $t$  auf den beiden Gittern erhält man

$$n(p) = \sum_{s,t} g_{st} p^s q^t \quad \text{und} \quad n^*(q) = \sum_{s,t} g_{st}^* q^s p^t. \quad (2.12)$$

Der unendliche Cluster spielt hier keine Rolle, denn der Beitrag eines einzigen Clusters zur Zahl der Cluster pro Vertex verschwindet. Die mittlere Euler-Charakteristik ist damit

$$\chi(p) = \sum_{s,t} (g_{st} p^s q^t - g_{st}^* q^s p^t). \quad (2.13)$$

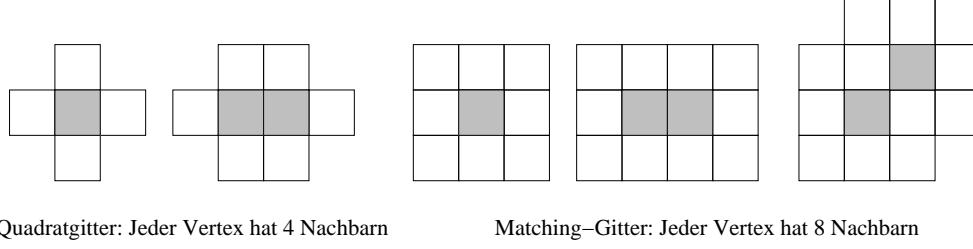


Abbildung 2.9: Gittertiere bis zur Größe  $s = 2$  auf dem Quadratgitter (links) und auf dem matching-Gitter (rechts) mit  $t = 4$  und  $t = 6$  bzw.  $t = 8$ ,  $t = 10$  und  $t = 12$ . Es ist jeweils nur eine Orientierung der Gittertiere dargestellt.

Die ersten Cluster, die zu diesen Reihen beitragen, sind für den Fall des Quadratgitters in Abbildung 2.9 dargestellt. Die  $\chi(p)$  ist also die Differenz zweier unendlicher Polynome. Andererseits lässt sich  $\chi(p)$  lokal ausrechnen und ist ein Polynom endlicher (kleiner) Ordnung. Die Terme in Gl. (2.13) müssen sich also bis auf einige wenige wegheben [32]. Die Zahl  $g_{st}$  steigt mit  $s$  und  $t$  schnell an, und wurde für das Quadratgitter bis  $s = 22$  und  $t = 46$  von Mertens [25] mit Hilfe von Computern abgezählt. Auf dem Quadratgitter kommen die Terme, die zu  $\chi(p)$  beitragen, ausschließlich von  $n(p)$ , da  $n^*(q)$  als Polynom in  $p$  erst mit  $p^8$  beginnt:

$$\begin{aligned}\chi(p) &= pq^4 + 2p^2q^6 + p^3(4q^6 + 2q^7) + p^4(9q^8 + 8q^9 + 2q^{10}) + \dots \\ &\quad - qp^8 - q^2(2p^{10} + 2p^{12}) - \dots \\ &= p - 2p^2 + p^4.\end{aligned}\tag{2.14}$$

### Euler-Charakteristik dekorierte Mosaik

Fortuin und Kastelyn haben 1972 in einer Serie von Arbeiten [8] das Random-Cluster-Modell vorgestellt und gezeigt, dass bond-Perkolation dem Limes  $\lambda \rightarrow 1$  eines Potts-Modells, dessen Spins  $\lambda$  verschiedene Zustände annehmen können, entspricht. Essam [5] hat diese Korrespondenz durch Einführung von Wechselwirkungen, an denen mehrere Spins teilnehmen, auf site-Perkolation erweitert. Die Dualität der Hoch- und Tieftemperaturzustandssumme zweidimensionaler Pottsmodelle entspricht im Limes  $\lambda \rightarrow 1$  der matching-Eigenschaft der site-Perkolation. Das matching-Polynom, das Essam einführt, ist die mittlere Euler-Charakteristik des assoziierten Perkulationsproblems. Der Wechselwirkungsgraph des Pottsmodells aus [5] lässt sich für jedes dekorierte Mosaik konstruieren, so dass die mittlere Euler-Charakteristik eines site-Perkulationsproblems auf beliebig dekorierten Mosaiken berechnet werden kann. Die folgende Konstruktion ist so zu verstehen, dass sie zunächst auf einem endlichen Gitterausschnitt durchgeführt wird. Anschließend muss der Limes zu unendlichen Gittern in geeigneter Weise durchgeführt werden [5].

Der Wechselwirkungsgraph setzt sich aus Spinvertices  $s \in S$  und Wechselwirkungsvertices  $i \in I$  zusammen. Um den Wechselwirkungsgraph eines Perkulationsproblems auf einem dekorierten Mosaik zu erhalten, werden Spins auf alle Kanten und in alle dekorierten Plaketten des Mosaiks gesetzt. Die Wechselwirkungsvertices sitzen auf den Ecken des Mosaiks

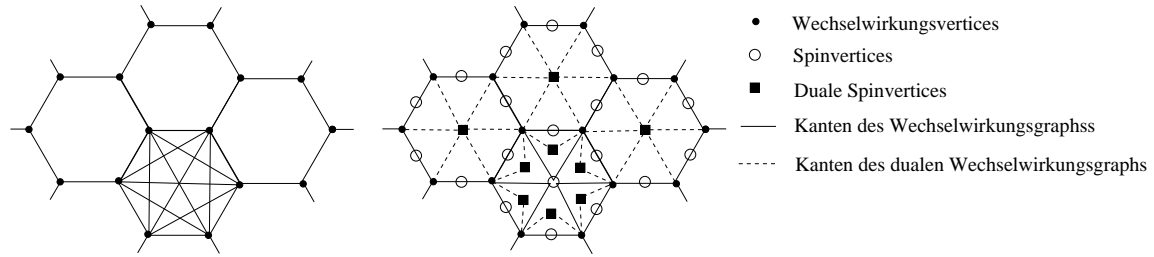


Abbildung 2.10: Ausschnitt aus einem dekorierten Mosaik (links) und die resultierenden Wechselwirkungsgraphen (rechts).

(siehe Abb. 2.10). Ein Wechselwirkungsvertex  $i$  vermittelt eine Wechselwirkung zwischen allen Spins auf den Kanten und in den Plaketten, die diesen Vertex umgeben. Jeder Wechselwirkungsvertex  $i$  wird mit allen Spinvertices verbunden, die in  $i$  wechselwirken. Dadurch entsteht ein bipartiter, planarer und zusammenhängender Graph  $G$ . Zu diesem Graphen wird ein dualer Wechselwirkungsgraph  $G^*$  konstruiert, dessen Vertexmenge aus dualen Spinvertices  $s^* \in S^*$  und den Wechselwirkungsvertices  $i \in I$  besteht. Die dualen Spinvertices  $s^* \in S^*$  werden in alle Plaketten von  $G$  gesetzt, und jeder Wechselwirkungsvertices wird mit allen umgebenden dualen Spins verbunden (siehe Abb. 2.10).

Wir betrachten nun den Subgraph  $G = (V, E)$  mit Vertexmenge  $V = S \cup I'$ ,  $I' \subset I$ , und den Subgraph  $G^* = (V^*, E^*)$  mit Vertexmenge  $V^* = S^* \cup I \setminus I'$ . Die Kantenmengen der Subgraphen bestehen aus allen Kanten, deren Endvertices beide in  $V$  bzw.  $V^*$  sind. Bettet man beide Graphen in die Ebene ein, ist jede endliche Komponente von  $G$  in einer Plakette von  $G^*$  enthalten; gleiches gilt umgekehrt [5]. Die Differenz der Komponenten  $n(G)$  und  $n^*(G^*)$  von  $G$  bzw.  $G^*$  ist nach dem Euler'schen Satz

$$n(G) - n^*(G^*) = |V| - |E| - 1 \quad (2.15)$$

Der Term  $-1$  entspricht der unendlichen Komponente. Wählt man Vertices  $I'$  aus  $I$  mit Wahrscheinlichkeit  $p$  aus und mittelt über alle Konfigurationen, erhält man die mittlere Euler-Charakteristik. Komponenten, die nur aus isolierten Spins bestehen, entsprechen keinen Clustern oder Löchern des Perkulationsproblems auf dem dekorierten Mosaik und müssen daher noch abgezogen werden (Summen über  $S$  und  $S^*$  in Gl. (2.16)). Das Resultat ist das matching-Polynom [5] oder die mittlere Euler-Charakteristik:

$$\chi(p) = |S| + \sum_{i \in I} p - \sum_{i \in I} z_i p - 1 - \sum_{s \in S} (1-p)^{z_s} + \sum_{s^* \in S^*} p^{z_{s^*}}. \quad (2.16)$$

$z_v$  ist die Koordinationszahl des Vertex  $v$ . Um  $\chi(p)$  zu normieren, muss noch durch  $|I|$  geteilt werden. Da  $G$  ein zusammenhängender Graph ist, gilt nach dem Euler'schen Satz  $v - e + f = |S| + |I| - \sum_{i \in I} z_i + |S^*| = 2$  (die unendliche Plakette mitgezählt) und damit die matching-Relation  $\chi(p) = -\chi^*(1-p)$  für beliebige komplementär dekorierte Mosaik. Für planare und vollständig dekorierte Gitter stimmen die mit Gleichung (2.16) berechneten Euler-Charakteristiken mit den Ergebnissen, die mit den anderen Methoden erhalten

werden, überein. Man überzeugt sich leicht, dass die einzelnen Terme aus (2.16) in diesen Fällen den Beiträgen der Plaketten, Kanten und Ecken entsprechen.

### 2.5.2 Dreidimensionale Gitter

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, dass die Vereinigung dualer Zellen eines zweidimensionalen Gitters die topologischen Eigenschaften des vollständig dekorierten Gitters hat. Das Komplement hat die Zusammenhangsverhältnisse des undekorierten Gitters.

Entsprechendes gilt unter bestimmten Voraussetzungen für dreidimensionale Gitter. Wir betrachten ein Gitter und raumfüllende Zellen um die Vertices, z.B. Würfel um die Vertices des einfach-kubischen Gitters (sc-Gitter). Die Vereinigung dieser Zellen hat die topologischen Eigenschaften eines Gitters, dessen Vertices miteinander verbunden sind, wenn ihre Zellen einen nichtleeren Durchschnitt haben. Beim sc-Gitter sind das alle Würfel, die eine Ecke, Kante oder Fläche teilen, und jeder Vertex hätte 26 Nachbarn. Vertices des Gitter haben aber in der Regel sehr viel weniger Nachbarn; das sc-Gitter beispielsweise nur sechs. Wenn die und nur die Zellen, deren Vertices Gitternachbarn sind, einen Durchschnitt haben der nur in diesen beiden Zellen enthalten ist, hat das Komplement die topologischen Eigenschaften des Gitters. Das sc-Gitter erfüllt diese Voraussetzung, denn Kanten sind in vier und Ecken in acht Würfeln enthalten, während die Flächen nur zu zwei Würfeln gehören und den Gitterkanten entsprechen.

Um zu einem Vertex eine Zelle zu konstruieren, betrachtet man die Ebenen senkrecht auf der Mitte der Verbindungslinien zu den nächsten, übernächsten, usw. Gitternachbarn. Jede dieser Ebenen definiert einen Halbraum, der den Vertex enthält. Die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) eines Gittervertex ist der Durchschnitt aller so konstruierten Halbräume. Die WSZ der Bravais-Gitter sind raumfüllend. Wenn jede Fläche der WSZ einer Gitterkante entspricht und die WSZ raumfüllend sind, sind die WSZ geeignet, um die Euler-Charakteristik zu bestimmen. Bei manchen Gittern, z.B. dem bcc-Gitter, haben die WSZ aber mehr Flächen als Gitternachbarn.

Für Gitter, die keine Bravaisgitter sind, oder deren WSZ zu viele Flächen haben, kann man dennoch geeignete raumfüllende Zellen finden. Diese sind aber häufig nicht konvex. Der Durchschnitt zweier Gitternachbarn besteht dann aus verschiedenen Flächenstücken, inklusive den zwischen diesen Stücken liegenden Kanten (siehe Abb. B.1).

Ob der Durchschnitt der Gitternachbarn eben ist oder nicht, spielt keine Rolle; wichtig ist nur, dass der Durchschnitt der Zellen zweier Gitternachbarn, abgesehen von den Randkanten, nur in diesen Zellen enthalten ist, und dass der Durchschnitt aller übrigen Zellen in mehr als zwei Zellen enthalten ist. Dadurch wird gewährleistet, dass unbesetzte Zellen, die keine Gitternachbarn sind, durch besetzte Zellen getrennt werden, und dass eben dies bei Gitternachbarn nicht geschieht.

Hat man geeignete Zellen gefunden, werden die Zellen, die unbesetzten Vertices entsprechen, ausgewählt, und die Euler-Charakteristik der entstehenden Figur  $\bar{X}$  ausgerechnet. Die Euler-Charakteristik des Komplements  $\check{X}$  ist  $\chi(\check{X}) = -\chi(\bar{X}) + \mathcal{O}(1)$ ;  $\check{X}$  ist aber eine offene Menge. Damit der Rand  $\partial\bar{X}$  ein geeigneter Abschluss von  $\check{X}$  ist, muss im dreidimensionalen Fall  $\bar{X}$  überall dort modifiziert werden, wo Zellen nur an Ecken oder

Kanten überlappen. Die Euler-Charakteristik  $\chi(\bar{X})$  bleibt bei diesen Modifikationen unverändert. Die Euler-Charakteristik des Randes nach der Modifikation ist nach Gleichung (2.6)  $\chi(\partial\bar{X}) = 2\chi(\bar{X})$ . Damit erhält man für der Euler-Charakteristik der Vereinigung  $X$  von  $\check{X}$  (entsprechend modifiziert) mit  $\partial\bar{X}$

$$\chi(X) = \chi(\check{X}) + \chi(\partial\bar{X}) = -\chi(\bar{X}) + 2\chi(\bar{X}) + \mathcal{O}(1) = \chi(\bar{X}) + \mathcal{O}(1) \quad (2.17)$$

Uns interessiert hier die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex  $\chi(p)$  der Muster, die bei site-Perkolation mit Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  entstehen. Die Euler-Charakteristik  $\chi(p)$  ist gleich der des Komplements  $\bar{\chi}(1-p)$ . Wie in zwei Dimensionen verschwinden mögliche Randterme im Limes großer Gitter [15]. Am Beispiel des sc-Gitter werden zwei Methoden,  $\chi(p)$  zu berechnen, vorgestellt.

Die mittlere Euler-Charakteristik des sc-Gitters lässt sich einfach mit der **Schnittrekursion** und einem Satz von Ebenen, die parallel zu den Gitterebenen sind, bestimmen. Das Schnittmuster der Ebene mit den besetzten Würfeln, ist ein Muster aus Quadraten eines Quadratgitters. Die Muster ändern sich, wenn die Ebene von einer Schicht Würfel in die nächste wandert. Zwischen zwei Schichten von Würfeln sind die Quadrate des Schnittmusters belegt, wenn mindestens einer der angrenzenden Würfel besetzt ist. Das Schnittmuster hat daher die Euler-Charakteristik eines mit Wahrscheinlichkeit  $1 - (1-q)^2$  besetzten, vollständig dekorierten Quadratgitters  $\bar{\chi}^{Qu}(1 - (1-q)^2)$ . Schnittmuster der Ebenen, die nicht zwischen zwei Schichten von Würfeln liegen sind entsprechend mit Wahrscheinlichkeit  $q$  belegt und haben Euler-Charakteristik  $\bar{\chi}^{Qu}(q)$ . Ihre Differenz ist die Euler-Charakteristik des einfach-kubischen Gitters

$$\begin{aligned} \chi(p) &= \bar{\chi}(1-p) = \bar{\chi}^{Qu}(1-p^2) - \bar{\chi}^{Qu}(1-p) \\ &= p - 3p^2 + 3p^4 - p^8. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Wenn ein Gitter keine einfache Schichtstruktur vorgibt, ist es zweckmäßiger  $\bar{\chi}(q)$  aus den Beiträgen **disjunkter Zellen** zu berechnen [16]. Dazu müssen die Wahrscheinlichkeiten, dass die unterschiedlichen Zellen zur Figur gehören, wenn abgeschlossene Würfel mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  ausgewählt werden, bestimmt werden.

- **Würfel** sind mit Wahrscheinlichkeit  $q$  vorhanden. Jeder besetzte Würfel trägt  $-1$  bei.
- Damit eine **Fläche** zur Anordnung gehört, muss mindestens einer der angrenzenden Würfel besetzt sein. Jede Fläche ist also mit Wahrscheinlichkeit  $1 - (1-q)^2 = 1 - p^2$  vorhanden. Ein Würfel hat sechs Flächen, die je zu zwei Würfeln gehören. Es gibt daher drei Flächen pro Würfel, die  $+1$  beitragen, wenn mindestens einer der angrenzenden Würfel besetzt ist.
- Eine **Kante** ist Teil von vier Würfeln und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1-p^4$  präsent. Ein Würfel hat zwölf Kanten, die aber je in vier Würfeln enthalten sind, und folglich gibt es drei Kanten pro Würfel. Eine Kante trägt  $-1$  zur Euler-Charakteristik bei.

- Die **Ecke** eines Würfels ist auch Ecke von sieben anderen Würfeln und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^8$  vorhanden. Pro Würfel gibt es eine Ecke, die, wenn sie Teil der Anordnung ist,  $+1$  beiträgt.

Summation der Beiträge liefert  $\bar{\chi}(q)$  und damit auch  $\chi(p)$ :

$$\chi(p) = \bar{\chi}(1 - p) = -(1 - p) + 3(1 - p^2) - 3(1 - p^4) + 1 - p^8 = p - 3p^2 + 3p^4 - p^8. \quad (2.19)$$

Die Wahl der Zellen zur Berechnung der Euler-Charakteristik eines Gitters ist im Allgemeinen nicht eindeutig. Daher werden zur Unterscheidung unterschiedlicher Euler-Charakteristiken neben dem Namen des Gitters auch die Zahl  $z$  der Flächen einer Zelle, d.h. die Zahl der Gitternachbarn eines Vertex, und die Zahl  $\bar{z}$  der Zellen, mit denen eine gegebene Zelle einen nichtleeren Durchschnitt hat, angegeben. Die Zahl  $\bar{z}$  ist die Koordinationszahl eines Gitters, dessen Vertices verbunden sind, wenn die zugehörigen Zellen einen nichtleeren Durchschnitt haben. Dieses Gitter ist das Analogon eines vollständig dekorierten Gitters in zwei Dimensionen. Anders als in zwei Dimensionen hängt es aber von der Wahl der Zellen ab.

Ein Vertex des sc-Gitters hat sechs Nachbarn, und ein Würfel teilt mit 26 Würfeln eine Fläche, Kante oder Ecke. Für die mittlere Euler-Charakteristik des sc-Gitter schreiben wir somit  $\chi_{6-26}^{sc}(p)$ .

Die Berechnung der Euler-Charakteristik anderer Gitter und Gitter höherer Dimensionen geht analog, ist aber häufig um vieles aufwendiger.

# Kapitel 3

## Stochastische Geometrie gemischter Perkolation

Im vorangehenden Kapitel wurden Methoden vorgestellt, mit denen die Euler-Charakteristik von site-Perkulationsprozessen auf Gittern berechnet werden kann. Wenn aber statt der reinen site-Perkolation gemischte Perkolation betrachtet wird, versagen diese Ansätze. Als gemischte Perkulationsprozesse bezeichnen wir solche, die nicht reine site- oder bond-Perkulationsprozesse sind. Zu gemischten Perkulationsprozessen gehört nicht nur bond-site-Perkolation, sondern auch Prozesse, bei denen höherdimensionale Zellen, z.B. Plaketten eines zweidimensionalen Gitters, mit gewissen Wahrscheinlichkeiten “besetzt” werden. Vertices auf dem Rand einer solchen besetzten Zelle gelten dann als verbunden. Besetzen der Plaketten eines zweidimensionalen Gitter entspricht der Dekoration (siehe 2.5) der Plaketten.

Im Laufe der Arbeit habe ich eine Methode entwickelt, mit der geometrische Größen wie die Euler-Charakteristik oder die Oberfläche der Cluster, wie sie bei gemischten Perkulationsprozessen entstehen, berechnet werden können.

### 3.1 Gemischte Perkolation in zwei Dimensionen

Wir betrachten ein zweidimensionales planares Gitter, dessen Vertices mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$  und dessen Kanten mit Wahrscheinlichkeit  $p_b$  besetzt sind. Alle Vertices auf dem Rand einer Plakette sind mit Wahrscheinlichkeit  $p_f$  verbunden, d.h. die Plakette ist mit Wahrscheinlichkeit  $p_f$  dekoriert. Für die dadurch entstehenden Gitterkonfigurationen definieren wir Cluster und berechnen deren geometrische Eigenschaften. Eine mögliche Konfiguration auf einem Ausschnitt des Quadratgitters ist links in Abbildung 3.1 dargestellt. Bevor die geometrischen Größen einer solchen Konfiguration ausgerechnet werden können, müssen die geometrischen Objekte, die den Clustern der Konfiguration entsprechen sollen, festgelegt werden. In unserem Modell treten Cluster nur in Verbindung mit besetzten Vertices auf, und besetzte Kanten oder dekorierte Plaketten, die nur von unbesetzten Vertices umgeben sind, bilden keine Cluster. Für Anwendungen, in denen Kanten

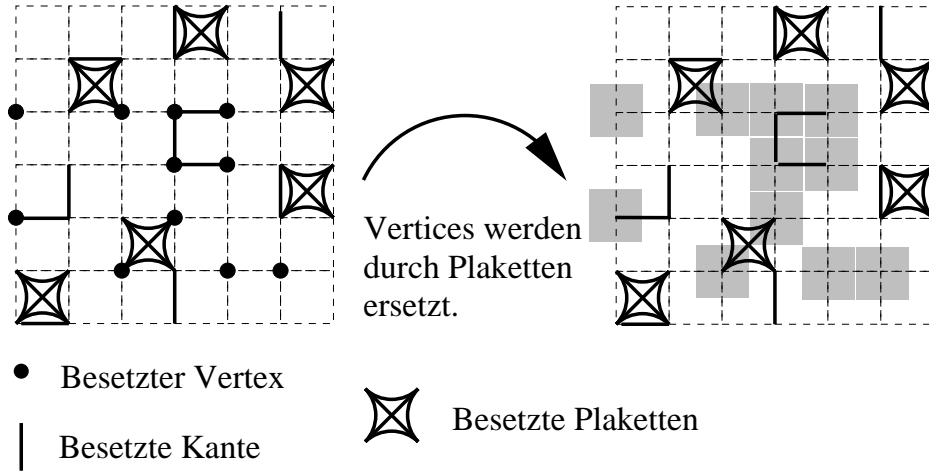


Abbildung 3.1: Links ist eine mögliche Konfiguration eines gemischten Perkulationsprozesses auf dem Quadratgitter dargestellt. Die Konfiguration enthält auch isolierte Kanten, die keine Cluster bilden. Im ersten Schritt werden auf besetzte Vertices offene duale Quadrate gesetzt (rechts). Damit aus diesen Quadraten Figuren entstehen, die den Gitterclustern entsprechen, müssen sie an den Kanten und Ecken in geeigneter Weise zusammengefügt werden.

und Plaketten Konstituenten verbinden, wie z.B. die Gelbildung aus Monomeren, ist diese Definition sinnvoll. Ob in anderen Anwendungen reine bond-Cluster nötig sind, vermag ich nicht zu sagen. In der Graphentheorie versteht man unter dem Löschen eines Vertex die Entfernung des Vertex und aller Kanten, die an diesem Vertex enden. Es treten also nie isolierte Kanten auf, in Übereinstimmung mit den hier konstruierten Clustern. Die Forderung, dass Cluster nur in Verbindung mit besetzten Vertices auftreten, führt dazu, dass die Konstruktion der geometrischen Objekte, die den Clustern entsprechen sollen, bei den Vertices begonnen werden muss, dann an den Kanten fortgesetzt wird, und dass zum Schluss die Beiträge der Plaketten hinzugefügt werden.

Die Figur, die den Gitterclustern entsprechen soll, wird aus den offenen dualen Plaketten, den randlosen dualen Kanten und den dualen Vertices konstruiert. Jeder Vertex des ursprünglichen Gitters gehört zu einer dualen Plakette, jede Kante zu einer dualen Kante und jede Plakette zu einem dualen Vertex. Die Konfiguration des ursprünglichen Gitters beschreiben wir, indem wir jedem Vertex  $v$ , jeder Kante  $k$  und jeder Plakette  $f$  eine Variable  $\sigma(v)$ ,  $\sigma(k)$  bzw.  $\sigma(f)$  zuweisen, die jeweils die Werte 0 und 1 annehmen kann. Ist  $\sigma = 1$ , ist der entsprechende Teil des Gitters besetzt. Um die Figuren auf dem dualen Gitter zu beschreiben, führen wir zu jeder dualen Plakette, jeder dualen Kante und jedem dualen Vertex eine weitere Variable  $\lambda(c)$  ein, wobei  $c$  die entsprechende Zelle des ursprünglichen Gitters bezeichnet.

Wir geben die  $\sigma$ 's auf dem ursprünglichen Gitter vor, und konstruieren aus den offenen dualen Zellen eine Figur, die den Gitterclustern entspricht. Jede Plakette des dualen Gitters gehört zur Figur, wenn der Vertex  $v$  des ursprünglichen Gitters besetzt ist, d.h.  $\lambda(v) = \sigma(v)$ .



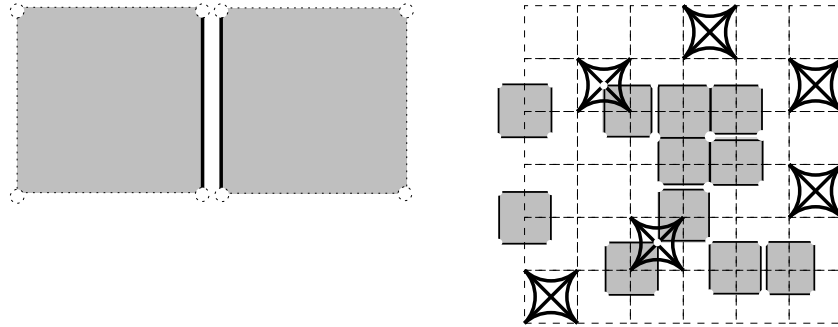


Abbildung 3.2: Der zweite Schritt. Links: Zwei besetzte Plaketten, die etwas auseinandergerückt sind, und mit je einer Kopie der Kante als Randstück versehen werden. Diese Kante hat  $\lambda = 2$ . Alle anderen Randstücke sind noch nicht vorhanden. Rechts ist die Figur aus Abb. 3.1 gezeigt, die um alle Kanten entsprechend der im Text beschriebenen Prozedur erweitert wurde. Die Ecken der besetzten Plaketten fehlen noch.

Dieser Schritt ist in Abb. 3.1 für einen Ausschnitt des Quadratgitters illustriert. Die geometrische Figur  $F$  besteht nach diesem Schritt aus allen offenen Plaketten mit  $\lambda(v) = 1$ .  $F$  wird in den folgenden Schritten an Kanten und Ecken modifiziert, damit die Figur am Ende abgeschlossen ist, und ihre Komponenten den Gitterclustern entsprechen.

**Kanten:** Wir betrachten nun eine Kante  $k$ . Im Fall  $\sigma(k) = 1$ , wird die duale Kante von  $k$  zu  $F$  hinzugefügt, vorausgesetzt mindestens eine der angrenzenden Plaketten ist besetzt. Wenn  $\sigma(k) = 0$  ist, und keine der benachbarten dualen Plaketten ist besetzt, wird die duale Kante von  $k$  in  $F$  nicht benötigt. Ist nur eine der beiden angrenzenden dualen Plaketten besetzt, wird  $k$  als Randzelle dieser Plakette zu  $F$  hinzugefügt. Wenn beide angrenzenden dualen Plaketten besetzt sind, müssen diese Plaketten infinitesimal auseinandergerückt und je eine Kopie der dualen Kante von  $k$  an beide Plaketten angefügt werden (siehe Abb. 3.2). Die duale Kante  $\bar{k}$  ist dann zweimal in  $F$  enthalten. Wir definieren  $\lambda(k)$  als die Anzahl der in  $F$  vorhandenen Kopien von  $\bar{k}$ . Seien  $v_1(k)$  und  $v_2(k)$  die Vertices des ursprünglichen Gitters, zwischen denen  $k$  liegt. Dann ist

$$\lambda(k) := \begin{cases} \lambda(v_1(k)) + \lambda(v_2(k)) & \text{falls } \sigma(k) = 0, \\ 1 - [1 - \lambda(v_1(k))] [1 - \lambda(v_2(k))] & \text{falls } \sigma(k) = 1. \end{cases} \quad (3.1)$$

Wenn diese Prozedur an allen Kanten durchgeführt worden ist, besteht  $F$  aus offenen Plaketten und Kanten ohne Randpunkte. Die Ecken der besetzten Plaketten fehlen noch. Die Figur  $F$  der Konfiguration aus Abbildung 3.1 ist rechts in Abbildung 3.2 in diesem Zustand gezeigt.

**Ecken:** Wenn eine Plakette  $f$  des Gitters dekoriert ist, d.h.  $\sigma(f) = 1$  ist, sind alle Vertices auf dem Rand der Plakette miteinander verbunden. Die dualen Plaketten der Vertices auf dem Rand von  $f$  überlappen alle am dualen Vertex  $\bar{f}$  von  $f$ . Wird  $\bar{f}$  zu  $F$  hinzugefügt,

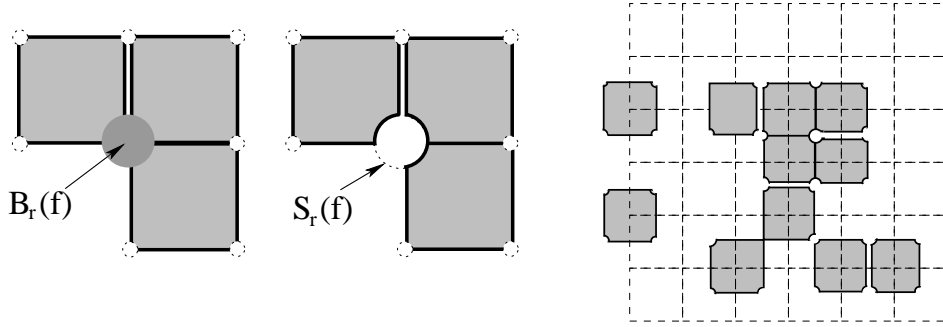


Abbildung 3.3: Der dritte Schritt: Damit die dualen Plaketten von Vertices auf dem Rand einer undekorierten Plakette  $f$  des ursprünglichen Gitters nicht zusammenhängen, die Figur aber dennoch abgeschlossen ist, wird eine offene Kreisscheibe  $B_r(f)$ , zentriert an der dualen Ecke  $\bar{f}$ , entfernt. Die neu entstandenen Randstücke sind der Durchschnitt  $\Lambda_r(f) = S_r(f) \cap F$  des Kreises  $S_r(f)$  mit  $F$ .  $\Lambda_r(f)$  hängt nicht nur von den  $\bar{f}$  umgebenden Plaketten ab, sondern auch davon, ob diese verbunden sind oder nicht. Die Euler-Charakteristik  $\chi(\Lambda_r)$  ist im dargestellten Fall zwei. Rechts ist die Figur aus Abb. 3.1 dargestellt, nachdem sie an allen Kanten und Ecken modifiziert worden ist.

werden daher die geforderten Zusammenhangsverhältnisse erzeugt. Sei nun  $f$  eine Plakette mit  $\sigma(f) = 0$ . Um die gewünschten Zusammenhangsverhältnisse zu erzeugen, entfernen wir aus  $F$  eine kleine, um die duale Ecke  $\bar{f}$  der Plakette  $f$  zentrierte, offene Kreisscheibe  $B_r(f)$  mit Radius  $r$  (siehe links in Abb. 3.3). Die neue Figur  $F'_r(f)$  ist dann

$$F'_r(f) = F \setminus B_r(f). \quad (3.2)$$

Sei nun  $S_r(f)$  ein Kreisring mit Mittelpunkt bei  $\bar{f}$  und Radius  $r$ . Die neu entstandenen Randstücke sind der Durchschnitt von  $S_r(f)$  mit  $F$  (siehe Abb. 3.3). Den Durchschnitt bezeichnen wir mit  $\Lambda_r(f) := S_r(f) \cap F$ .

Im Limes  $r \rightarrow 0$  werden die Beiträge der dualen Plaketten und Kanten zu Fläche, Umfang und Euler-Charakteristik nicht verändert. Die Randstücke  $\Lambda_r(f)$  tragen für  $r \rightarrow 0$  nur zur skalenunabhängigen Euler-Charakteristik bei. Das neue, durch die Modifikation veränderte,  $F$  ist

$$F = \lim_{r \rightarrow 0} F'_r(f), \quad (3.3)$$

und der Beitrag einer Ecke zur Euler-Charakteristik von  $F$  ist  $\chi(\Lambda_r(f))$ . Seien nun  $v_i(f)$  und  $k_i(f)$  die Kanten und Plaketten, die die Ecke umgeben. Für jede Ecke  $f$  definieren wir

$$\lambda(f) := \begin{cases} \chi(\Lambda_r(f)) & \text{falls } \sigma(f) = 0, \\ 1 - \prod_{i=1}^n [1 - \lambda(v_i(f))] & \text{falls } \sigma(f) = 1. \end{cases} \quad (3.4)$$

$\Lambda_r(f)$  ist eine Vereinigung von Kreissegmenten. Jeder Schnitt des Kreises mit einer besetzten Plakette ist ein offenes Kreissegment. Der Schnitt des Kreises mit den  $\lambda(k_i(f))$ -fach vorhandenen Kanten  $k_i(f)$  sind Punkte, die den Abschluss der offenen Kreissegmente bilden.

Daher ist

$$\lambda(f) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda(k_i(f)) - \sum_{i=1}^n \lambda(v_i(f)) & \text{falls } \sigma(f) = 0, \\ 1 - \prod_{i=1}^n [1 - \lambda(v_i(f))] & \text{falls } \sigma(f) = 1. \end{cases} \quad (3.5)$$

Diese Prozedur muss für jede Plakette  $f$  durchgeführt werden. Die Figur, die zur Gitterkonfiguration aus Abbildung 3.1 gehört, ist rechts in Abbildung 3.3 dargestellt.

Sind alle Modifikationen und Ergänzungen durchgeführt, erhält man für die Euler-Charakteristik der Figur  $F$ :

$$\chi(F) = \sum_f \lambda(f) - \sum_k \lambda(k) + \sum_v \lambda(v). \quad (3.6)$$

Entsprechend können auch Umfang und Fläche durch die Summe der Beiträge aller Zellen, jeweils multipliziert mit  $\lambda$ , ausgerechnet werden.

Ist  $\sigma(f)$  einer Plakette  $f$  gleich 0 und sind alle Vertices und Kanten auf dem Rand von  $f$  besetzt, entsteht durch die Modifikation ein Loch. Soll dies vermieden werden, muss  $\sigma(f)$  in diesem Fall gleich 1 gesetzt werden.

Die Erwartungswerte der  $\lambda$ 's werden für unterschiedliche Perkulationskonfigurationen am Ende dieses Kapitels ausgerechnet. Alle bisher berechneten Euler-Charakteristiken lassen sich durch geeignete Wahl der  $\sigma$ 's erhalten.

## 3.2 Gemischte Perkolation in drei Dimensionen

Ein dreidimensionales Gitter lässt sich, anders als die planares Gitter, im Allgemeinen nicht in Zellen zerlegen. Daher betrachten wir ohne Bezug auf ein Gitter eine Tessellation des dreidimensionalen Raumes. Eine Tessellation ist eine Anordnung von nicht überlappenden Polyedern, so dass ihre Vereinigung den gesamten  $\mathbb{R}^3$  bedeckt [37]. Die Polyeder bestehen aus ihrem dreidimensionalen Inneren und 0- bis 2-dimensionalen Randzellen. Mit  $C_k$  bezeichnen wir die Menge der  $k$ -dimensionalen, randlosen Zellen. Die Polyeder werden besetzt, und besetzte Polyeder können über gemeinsame Randzellen miteinander verbunden sein.

Wir weisen jedem  $c_k \in C_k$ ,  $k \in \{0, \dots, 3\}$ , eine Variable  $\sigma(c_k) \in \{0, 1\}$  zu. Für ein Polyeder  $c_3$  bedeutet  $\sigma(c_3) = 1$ , dass  $c_3$  besetzt ist. Für  $c_k$ ,  $k < 3$ , bedeutet  $\sigma(c_k) = 1$ , dass alle Polyeder, deren Rand die Zelle  $c_k$  enthält, über  $c_k$  verbunden sind. Wenn  $\sigma(c_k) = 0$  ist sollen diese Polyeder nicht über  $c_k$  verbunden sein. Die  $\sigma$ -Variablen erfüllen also die gleiche Funktion wie im zweidimensionalen Fall aus Kapitel 3.1, werden aber anstatt mit Bestandteilen des Gitters, mit Zellen der Tessellation indiziert.

Wir konstruieren nun zu einem gegebenen Satz von  $\sigma$ 's ein geometrisches Objekt, das die geforderten Zusammenhangsverhältnisse hat. Zu jeder Zelle  $c_k$  wird eine weitere Variable  $\lambda(c_k)$  eingeführt, die die Beiträge der Zelle zur Figur beschreibt. Als Resultat erhalten wir

die Minkowski-Funktionale  $W_\nu(F)$  der so gewonnenen Figur  $F$ . Die Minkowski-Funktionale sind ein vollständiger Satz stetiger, additiver, geometrischer Größen (siehe [21]). In drei Dimensionen entsprechen ihnen das Volumen, die Oberfläche, die integrale mittlere Krümmung und die Euler-Charakteristik. Wie sich herausstellen wird, sind die  $W_\nu(F)$  die Summe der  $W_\nu(c_k)$  der einzelnen Zellen  $c_k$ , jeweils multipliziert mit einer ganzen Zahl  $\lambda(c_k)$ . Der Multiplikator  $\lambda(c_k)$  lässt sich für  $k < 3$  immer aus den  $\lambda$ 's der  $c_k$  umgebenden, höherdimensionalen Zellen berechnen.

**Polyeder:** Alle besetzten Polyeder gehören zur Figur  $F$ . Für alle  $c_3 \in C_3$  ist  $\lambda(c_3) = \sigma(c_3)$ , und  $F$  besteht anfangs nur aus diesen offenen Polyedern. Für diese offenen Zellen wird, bei den Flächen beginnend, ein Rand konstruiert, so dass die resultierende Figur  $F$  die durch die  $\sigma$ 's vorgegebenen Zusammenhangsverhältnisse hat.

**Flächen:** Wenn für eine Fläche  $c_2$   $\sigma(c_2) = 1$  ist, und mindestens einer der beiden Polyeder  $c_3^1(c_2)$  und  $c_3^2(c_2)$ , die  $c_2$  als gemeinsame Randfläche haben, besetzt ist, wird  $c_2$  zu  $F$  hinzugefügt. Im Fall  $\sigma(c_2) = 0$  wird an die Polyeder, sofern sie besetzt sind, je eine Kopie der Fläche angefügt. Wenn beide Polyeder besetzt sind, muss der Spalt zwischen ihnen infinitesimal "verbreitert" werden. Analog zu den Kanten im zweidimensionalen Fall gilt für die  $\lambda(c_2)$  einer Fläche  $c_2$

$$\lambda(c_2) := \begin{cases} \lambda(c_3^1(c_2)) + \lambda(c_3^2(c_2)) & \text{falls } \sigma(c_2) = 0, \\ 1 - [1 - \lambda(c_3^1(c_2))] [1 - \lambda(c_3^2(c_2))] & \text{falls } \sigma(c_2) = 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

Diese Prozedur wird an allen Flächen durchgeführt.

**Kanten:** Eine Kante  $c_1$  wird zu  $F$  hinzugefügt, wenn  $\sigma(c_1) = 1$  ist und mindestens einer der Polyeder  $c_3^i(c_1)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , in deren Rand  $c_1$  ist, besetzt ist. Gegebenenfalls muss die Umgebung der Kante derart deformiert werden, dass das Hinzufügen der Kante alle umliegenden Polyeder und Flächen verbindet (siehe Abb. 3.5). Im Fall  $\sigma(c_1) = 0$  muss  $F$  entlang  $c_1$  modifiziert werden, denn  $c_1$  darf die Polyeder  $c_3^i(c_1)$  nicht verbinden.  $F$  muss aber entlang  $c_1$  abgeschlossen sein. Dazu betrachten wir die offene Kreisscheibe  $B_r(c_1)$  mit Radius  $r$ , die senkrecht auf  $c_1$  steht. Der Mittelpunkt von  $B_r(c_1)$  sei am Ursprung. Die Minkowskisumme der randlosen Zelle  $c_1$  mit  $B_r(c_1)$  wird aus  $F$  entfernt. Die Minkowskisumme  $B_r(c_1) \uplus c_1$  ist die Menge, die entsteht, wenn der Mittelpunkt von  $B_r(c_1)$  an jeden Punkt von  $c_1$  angeheftet wird (siehe Abb. 3.4 und [21]). Die Menge  $F'_r(c_k) := F \setminus (B_r(c_k) \uplus c_k)$  ist entlang  $c_1$  abgeschlossen, und die umliegenden Polyeder hängen nicht über  $c_1$  zusammen (siehe Abb. 3.5).

Um  $W_\nu(F'_r(c_k))$  zu berechnen, betrachten wir den Kreisring  $S_r(c_1)$ . Die Vereinigung von  $S_r(c_1)$  mit der offenen Kreisscheibe  $B_r(c_1)$  ist die abgeschlossene Kreisscheibe  $\bar{B}_r(c_1)$ . Mit  $S_r(c_1)$  und  $\bar{B}_r(c_1)$  lässt sich  $F'_r(c_1)$  als disjunkte Vereinigung der modifizierten Figur  $F$  mit den neuen Randstücken schreiben:

$$F'_r(c_1) = (F \setminus (\bar{B}_r(c_1) \uplus c_1)) \cup (F \cap (S_r(c_1) \uplus c_1)). \quad (3.8)$$

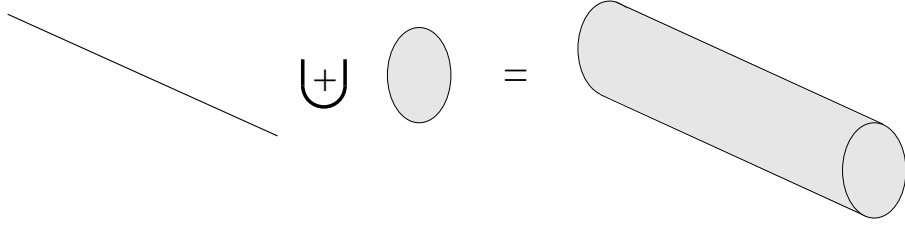


Abbildung 3.4: Minkowskisumme einer Kante mit einer Kreisscheibe.

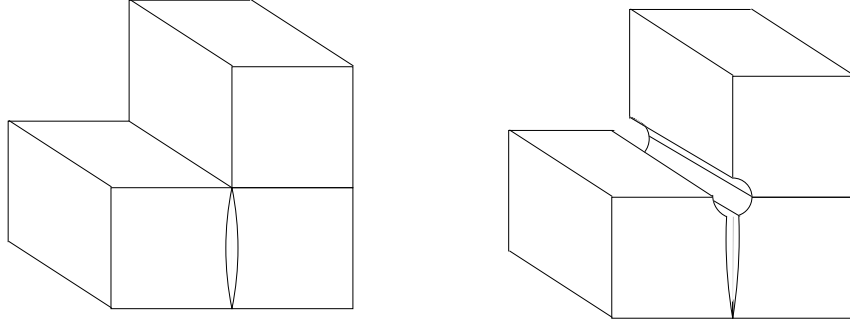


Abbildung 3.5: Links sind drei Würfel dargestellt, deren gemeinsame Kante  $c_1$   $\sigma(c_1) = 1$  hat. Die beiden unteren Würfel sind nicht über eine Fläche verbunden, aber an der Kante  $c_1$ . Rechts sind die gleichen Würfel mit  $\sigma(c_1) = 0$  gezeigt. Der Durchschnitt eines hinreichend kleinen Kreises, angeheftet an die Kante, mit der Umgebung, ist in jedem Punkt der Kante gleich. Nur an den Randbereichen der Kante gilt das i. A. nicht. Diese Bereiche verschwinden aber mit dem Radius des Kreises.

Wegen der Additivität der Minkowski-Funktionale gilt

$$W_\nu(F'_r(c_1)) = W_\nu(F \setminus (\bar{B}_r(c_1) \uplus c_1)) + W_\nu(F \cap (S_r(c_1) \uplus c_1)). \quad (3.9)$$

Wegen der Stetigkeit der Minkowski-Funktionale gilt im Limes  $r \rightarrow 0$  für den ersten Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.9)  $W_\nu(F \setminus (\bar{B}_r(c_1) \uplus c_1)) \rightarrow W_\nu(F \setminus c_1) = W_\nu(F)$ . Die Beiträge der Polyeder und Flächen werden durch die Modifikation im Limes  $r \rightarrow 0$  also nicht verändert, und alle zusätzlichen Beiträge kommen von den neuentstandenen Randstücken entlang  $c_1$ .

Im Limes  $r \rightarrow 0$  ist  $F \cap (S_r(c_1) \uplus x)$  mit  $x \in c_1$  für alle  $x$  gleich (abgesehen von einer Translation, siehe Abb. 3.5), und es gibt ein  $\Lambda_r(c_1)$ , so dass  $F \cap (S_r(c_1) \uplus c_1) = \Lambda_r(c_1) \uplus c_1$  gilt.  $\Lambda_r(c_1)$  ist die an den Ursprung verschobene Menge  $F \cap (S_r(c_1) \uplus x)$ . Da  $\Lambda_r(c_1)$  und  $c_1$  in komplementären, orthogonalen Unterräumen liegen, ist die Formel 51, Kapitel 6 aus [12] anwendbar, und man erhält für den zweiten Term in Gleichung (3.9)

$$W_\nu(c_1 \uplus \Lambda_r(c_1)) = \frac{\omega_\nu}{\binom{d}{\nu}} \sum_{\mu=0}^{\nu} \binom{k}{\mu} \binom{d-k}{\nu-\mu} \frac{W'_\mu(c_1) W'_{\nu-\mu}(\Lambda_r(c_1))}{\omega_\mu \omega_{\nu-\mu}}. \quad (3.10)$$

Im Limes  $r \rightarrow 0$  verschwinden alle skalenabhängigen  $W'_{\nu-\mu}(\Lambda_r(c_1))$  und obige Formel vereinfacht sich zu

$$\lim_{r \rightarrow 0} W_\nu(c_1 \uplus \Lambda_r(c_1)) = W_\nu(c_1) \chi(\Lambda(c_1)). \quad (3.11)$$

Damit wird aus Gleichung (3.9) im Limes  $r \rightarrow 0$

$$\lim_{r \rightarrow 0} W_\nu(F'_r(c_1)) = W_\nu(F) + W_\nu(c_1) \chi(\Lambda(c_1)). \quad (3.12)$$

Die Euler-Charakteristik  $\chi(\Lambda_r(c_1))$  ist unabhängig vom Radius  $r$ , der daher weggelassen wird. Die Beiträge der Modifikation zu den Minkowski-Funktionalen sind also die Minkowski-Funktionalen der Zelle  $c_1$ , multipliziert mit der ganzen Zahl  $\chi(\Lambda(c_1))$ . Die Multiplizität der Kante  $c_1$  wird durch

$$\lambda(c_1) := \begin{cases} \chi(\Lambda(c_1)) & \text{falls } \sigma(c_1) = 0, \\ 1 - \prod_{i=1}^n [1 - \lambda(c_3^i(c_1))] & \text{falls } \sigma(c_1) = 1, \end{cases} \quad (3.13)$$

definiert.  $\Lambda(c_1)$  ist der Durchschnitt eines Kreisrings mit den besetzten Polyedern  $c_3^i(c_1)$  und den zwischen ihnen liegenden  $\lambda(c_2^1(c_1))$ -fach vorhandenen Flächen  $c_2^i(c_1)$ .  $\Lambda(c_1)$  liegt in einer Ebene senkrecht auf  $c_1$ , und die entstehenden Schnittmuster sind Kreissegmente, analog zu dem Schnitt eines Kreises mit den dualen Plaketten und Kanten, die eine duale Ecke des zweidimensionalen Gitters umgeben (siehe Abb. 3.3). Jeder Schnitt mit einem besetzten Polyeder ist ein offenes Kreissegment, und die Schnitte mit den Flächen liefern je  $\lambda(c_2^i(c_1))$  Punkte. Die Euler-Charakteristik von  $\Lambda(c_1)$  ist daher

$$\chi(\Lambda(c_1)) = \sum_{i=1}^n \lambda(c_2^i(c_1)) - \sum_{i=1}^n \lambda(c_3^i(c_1)). \quad (3.14)$$

Die Figur  $F$  wird jetzt durch  $\lim_{r \rightarrow 0} F'_r(c_k)$  ersetzt, und die Prozedur nacheinander an allen Kanten durchgeführt.

**Ecken:** Eine Ecke  $c_0$  der Tessellation wird von Polyedern  $c_3^1(c_0), \dots, c_3^n(c_0)$ , Flächen  $c_2^1(c_0), \dots, c_2^m(c_0)$  und Kanten  $c_1^1(c_0), \dots, c_1^l(c_0)$  umgeben. Ist  $\sigma(c_0) = 1$  und mindestens einer der umgebenden Polyeder besetzt, wird  $c_0$  zu  $F$  hinzugefügt und verbindet die offenen Enden an der Ecke. Dazu ist gegebenenfalls eine Deformation der Umgebung der Ecke nötig. Falls  $\sigma(c_0) = 0$  ist, wird eine offene Kugel  $B_r(c_0)$  mit Radius  $r$ , zentriert bei  $c_0$ , aus  $F$  entfernt. Wie im Fall einer Kante werden die Beiträge der höherdimensionalen umgebenden Zellen zu den Minkowskifunktionalen im Limes  $r \rightarrow 0$  nicht verändert. Die neuen Randstücke sind der Schnitt einer Sphäre  $S_r(c_0)$  mit  $F$ . Die Randstücke  $\Lambda_r(c_0) = S_r(c_0) \cap F$  tragen im Limes  $r \rightarrow 0$  nur zur Euler-Charakteristik bei, und wir definieren  $\lambda(c_0)$  durch  $\chi(\Lambda_r(c_0))$ .  $\Lambda_r(c_0)$  besteht aus dem Schnitt von  $S_r(c_0)$  mit den umgebenden besetzten Polyedern, den dazwischenliegenden  $\lambda(c_2^i(c_0))$ -fach vorhandenen Flächen und den, gegebenenfalls modifizierten, Kanten. Jeder Schnitt mit einem besetzten Polyeder ist ein offenes Gebiet auf der Sphäre und liefert den Beitrag  $+1$ . Der Schnitt mit einer  $\lambda(c_2^i(c_0))$ -fach vorhandenen Fläche

sind  $\lambda(c_2^i(c_0))$  offene Geradenstücke, die  $-\lambda(c_2^i(c_0))$  zur Euler-Charakteristik beitragen. Der Schnitt der Sphäre mit einer Kante ist ein Punkt und trägt  $+1$  bei. Die Umgebung von Kanten mit  $\sigma(c_1^i(c_0)) = 0$  wurde aber modifiziert, und der Schnitt mit den durch die Modifikation entstandenen Randstücken ist gerade  $\lim_{r \rightarrow 0} \Lambda_r(c_1^i(c_0))$ . Die Kanten tragen also  $\lambda(c_1^i(c_0))$  zu Euler-Charakteristik bei. Damit ergibt sich:

$$\lambda(c_0) := \begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda(c_3^i(c_0)) - \sum_{i=1}^m \lambda(c_2^i(c_0)) + \sum_{i=1}^l \lambda(c_1^i(c_0)) & \text{falls } \sigma(c_0) = 0, \\ 1 - \prod_{i=1}^n [1 - \lambda(c_3^i(c_0))] & \text{falls } \sigma(c_0) = 1. \end{cases} \quad (3.15)$$

Nachdem  $F$  an allen Ecken auf diese Weise modifiziert wurde, ist  $F$  abgeschlossen und hat die geforderten Zusammenhangsverhältnisse.

Die Minkowski-Funktionale von  $F$  sind dann die Summe der Beiträge der einzelnen Zellen  $c$ , jeweils multipliziert mit der ganzen Zahl  $\lambda(c)$ :

$$W_\nu(F, \{\sigma\}) = \sum_c \lambda(c) W_\nu(c) \quad (3.16)$$

Wenn  $\sigma(c_k)$  einer  $k$ -Zelle  $c_k$  gleich null ist und alle umliegenden höherdimensionalen Zellen  $\sigma = 1$  haben, wird durch die Modifikation ein  $k$ -dimensionaler Tunnel erzeugt. Wenn solche Tunnel vermieden werden sollen, muss  $\sigma(c_k)$  in diesem Fall auf den Wert 1 gesetzt werden.

Die formale Behandlung der Modifikation an den Kanten lässt sich ohne weiteres auf die Flächen und Ecken übertragen. In entsprechender Weise kann der Formalismus auch auf  $d$ -dimensionale Tessellationen verallgemeinert werden. Da dies in dieser Arbeit nicht benötigt wird, beschränken wir uns auf zwei und drei Dimensionen.

### 3.3 Anwendung auf Perkulationskonfigurationen

#### 3.3.1 bond-site Perkolation

Bei bond-site-Perkolation werden Vertices eines Gitters mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$  und Kanten des Gitters mit Wahrscheinlichkeit  $p_b$  besetzt. Wir wenden nun den oben erarbeiteten Formalismus auf bond-site-Perkolation in drei Dimensionen an und betrachten dazu ein Gitter, zu dem Zellen existieren, deren Flächen den Gitterkanten entsprechen. Diese Zellen bilden die Tessellation aus dem vorhergehenden Abschnitt.

Jede dreidimensionale Zelle  $c_3$  wird mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$  besetzt, d.h. mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$  ist  $\sigma(c_3) = 1$ . Die Flächen entsprechen den Gitterkanten und  $\sigma$  jeder Fläche wird mit Wahrscheinlichkeit  $p_b$  auf den Wert 1 gesetzt. Die  $\sigma$ -Variablen der Kanten und Ecken haben den Wert 0, sofern nicht alle umliegenden 3-Zellen und Flächen  $\sigma = 1$  haben. Dadurch wird gewährleistet, dass entlang der Kanten und Ecken keine Tunnel bzw. Einschlüsse entstehen, wenn alle umliegenden 3-Zellen und Flächen besetzt sind. Um die

Erwartungswerte der  $W_\nu$  zu berechnen, müssen wir die Erwartungswerte  $\langle \lambda(c) \rangle_{p_s, p_b}$  aller Zellen kennen.

Der Erwartungswert  $\langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b}$  einer beliebigen 3-Zelle ist  $p_s$ . Der Erwartungswert  $\langle \lambda(c_2) \rangle_{p_s, p_b}$  einer Fläche  $c_2$  setzt sich aus einem Beitrag mit  $\sigma(c_2) = 1$  und einem mit  $\sigma(c_2) = 0$  zusammen. Im ersten Fall ist  $\lambda(c_2) = 1$ , wenn immer eine der angrenzenden 3-Zellen besetzt ist; im zweiten Fall ist  $\lambda(c_2)$  die Zahl der besetzten angrenzenden 3-Zellen. Für jede Fläche  $c_2$  gilt daher

$$\langle \lambda(c_2) \rangle_{p_s, p_b} = \langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} = (1 - (1 - p_s)^2)p_b + 2p_s(1 - p_b) = 2p_s - p_b p_s^2. \quad (3.17)$$

Eine Kante  $c_1$  umgeben die 3-Zellen  $c_3^1(c_1), \dots, c_3^n(c_1)$  und die Flächen  $c_2^1(c_1), \dots, c_2^n(c_1)$ . Auch bei Kanten müssen die Fälle  $\sigma(c_1) = 1$  und  $\sigma(c_1) = 0$  unterschieden werden. Der erste Fall tritt mit der Wahrscheinlichkeit  $p_s^n p_b^n$  ein. Im zweiten Fall müssen wir immer voraussetzen, dass nicht für alle  $i \in \{1, \dots, n\}$   $\sigma(c_3^i(c_1)) = \sigma(c_2^i(c_1)) = 1$  gilt. Daher sind die Beiträge der einzelnen Flächen und 3-Zellen zu  $\lambda(c_1)$  nicht mehr unabhängig und müssen einzeln abgezählt werden. Zum Abzählen aller möglichen Zustände der umgebenden 3-Zellen und Flächen und zur Berechnung der  $\lambda(c_1)$  habe ich ein Computerprogramm (siehe dazu Anhang A.5) geschrieben.

Eine Ecke  $c_0$  sei von den 3-Zellen  $c_3^1(c_0), \dots, c_3^m(c_0)$ , den Flächen  $c_2^1(c_0), \dots, c_2^n(c_0)$  und den Kanten  $c_1^1(c_0), \dots, c_1^l(c_0)$  umgeben. Wenn  $\sigma(c_3^i(c_0)) = 1$  für alle  $i \in \{1, \dots, m\}$  und  $\sigma(c_2^i(c_0)) = 1$  für alle  $i \in \{1, \dots, n\}$  gilt, ist  $\sigma(c_0) = 1$ . Anderfalls, muss  $\chi(\Lambda(c_0))$  berechnet werden. Hierzu werden wieder alle möglichen Zustände der umgebenden Zellen und Flächen abgezählt und jeweils  $\lambda(c_0)$  berechnet.

Da die Berechnung der  $\langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b}$ ,  $\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b}$  und  $\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b}$  in drei Dimensionen der Berechnung der  $\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b}$ ,  $\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b}$  bzw.  $\langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b}$  in zwei Dimensionen entspricht, kann bond-site-Perkolation auf zweidimensionalen Gittern völlig analog behandelt werden.

### Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem Quadratgitter

Um die Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem Quadratgitter zu erhalten, muss nur noch  $\langle \lambda(c_0) \rangle_{p_s, p_b}$  jeder dualen Ecke  $c_0$  bestimmt werden. Alle Ecken des Quadratgitters werden von vier Quadraten umgeben. Daher ist  $\langle \lambda(c_0) \rangle_{p_s, p_b}$  einer Ecke  $c_0$  für alle Ecken gleich  $\langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b}$ . Alle möglichen Konfigurationen der vier Quadrate und Kanten werden abgezählt, und die  $\lambda_0$  mit ihrer Wahrscheinlichkeit gewichtet und aufsummiert. Man erhält

$$\langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b} = 4p_s + p_b^4 p_s^4 - 4p_b p_s^2. \quad (3.18)$$

Die mittlere Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem Quadratgitter ist damit:

$$\boxed{\chi(p_s, p_b) = p_s - 2p_b p_s^2 + p_b^4 p_s^4.} \quad (3.19)$$



### Euler-Charakteristik der bond-site-Perkulation auf dem einfach kubischen Gitter

Die Zellen des einfach kubischen Gitters (sc-Gitter) sind Würfel. Da jede Kante von vier Würfeln umgeben ist, gilt für das sc-Gitter, analog zum zweidimensionalen Quadratgitter,

$$\langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b} = p_s, \quad (3.20)$$

$$\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} = 2p_s - p_b p_s^2, \quad (3.21)$$

$$\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b} = 4p_s + p_b^4 p_s^4 - 4p_b p_s^2. \quad (3.22)$$

Eine Würfecke ist von acht Würfeln, zwölf Flächen und sechs Kanten umgeben. Zu jeder möglichen Konfiguration muss  $\lambda_0$  aus den  $\lambda$ 's aller Würfel, Flächen und Kanten bestimmt werden. Die Summation aller Beiträge liefert

$$\langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b} = 8p_s - 12p_b p_s^2 + 6p_b^4 p_s^4 - p_b^{12} p_s^8. \quad (3.23)$$

Pro Würfel gibt es je drei Flächen und Kanten, sowie eine Ecke, und für die Euler-Charakteristik (siehe Abb. 3.6) erhält man

$$\begin{aligned} \chi(p_s, p_b) &= \langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b} - 3 \langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b} + 3 \langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} - \langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b} \\ &= p_s - 3p_s^2 p_b + 3p_s^4 p_b^4 - p_s^8 p_b^{12}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die mittleren Euler-Charakteristiken des Quadrat- (Gl. 3.19) und des sc-Gitters (Gl. 3.24) sind für  $p_s = 0$  konstant null, da ein Cluster mindestens einen besetzten Vertex enthalten muss, und daher für  $p_s = 0$  keine Cluster existieren (siehe Abb. 3.6). Für  $p_b = 0$  besteht die Anordnung aus isolierten abgeschlossenen Zellen und  $\chi(p_s, 0) = p_s$ . Der Fall  $p_b = 1$  wird die Euler-Charakteristik der site-Perkolation auf dem Quadrat- bzw. sc-Gitter reproduziert. Für  $p_s = 1$  ist  $\chi(p_s = 1, p_b)$  die Euler-Charakteristik des reinen bond-Perkulationsprozesses des Quadrat- bzw. sc-Gitters.

#### 3.3.2 Euler-Charakteristik des bcc-Gitters

Neben der Berechnung der Euler-Charakteristik von bond-site-Perkulationsprozessen eignet sich der vorgestellte Formalismus auch, um bei reinen site-Perkulationsproblemen bestimmte Nachbarschaftsverhältnisse zu erzwingen, wenn keine geeigneten Zellen mit den Nachbarschaftsverhältnissen des Gitters gefunden werden können. Am Beispiel der Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des bcc-Gitter soll eine solche Anwendung hier vorgeführt werden. Die WSZ des bcc-Gitters hat 14 Flächen, ein Gittervertex aber nur acht nächste Nachbarn. Um eine mittlere Euler-Charakteristik zu erhalten, die der 8-Nachbarschaft entspricht, können entweder komplizierte nicht konvexe Zellen (siehe Abb. B.1) gewählt werden, oder auf den Flächen der WSZ die  $\sigma$ 's entsprechend der 8-Nachbarschaft vorgegeben werden (siehe Abb. 3.7). Die sechseckigen Flächen entsprechen Gitternachbarschaften und haben  $\sigma = 1$ . Die

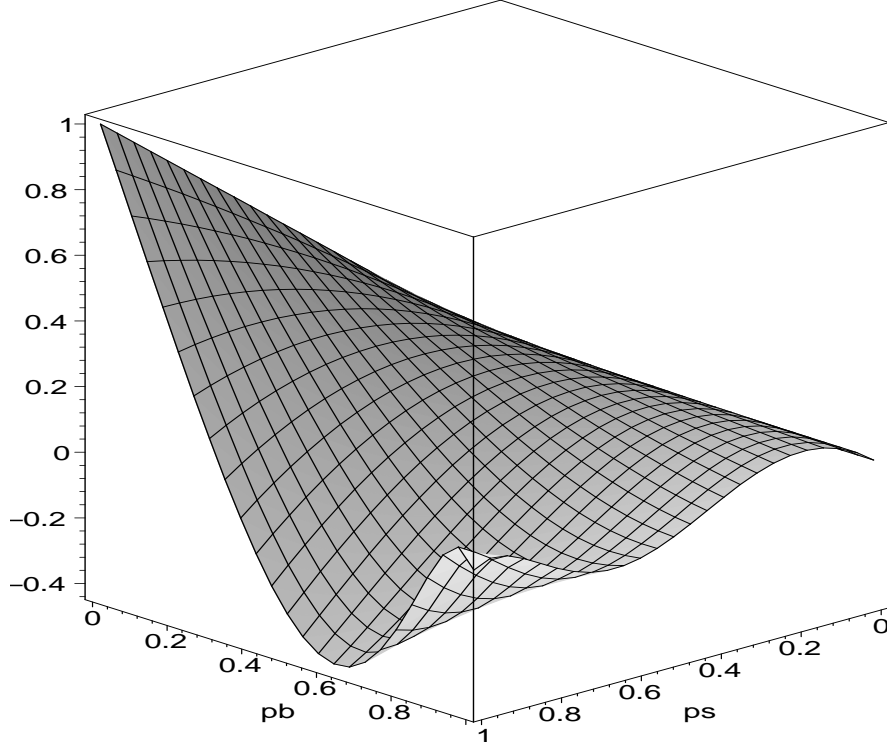


Abbildung 3.6: Euler-Charakteristik  $\chi(p_s, p_b)$  der bond-site-Perkolation auf dem sc-Gitter.

Quadrate entsprechen keinen Gitternachschaften und haben  $\sigma = 0$ , falls die beiden angrenzenden Zellen keinen gemeinsamen besetzten Gitternachbarn haben. Andernfalls ist  $\sigma = 1$ . WSZ werden mit Wahrscheinlichkeit  $p = 1 - q$  besetzt, und  $\langle \lambda_3 \rangle_p = p$ . Für Sechsecke gilt  $\langle \lambda_2^{hex} \rangle_p = 1 - q^2 = 2p - p^2$ . Für ein Quadrat ist  $\lambda_2^{sq} = 1$ , wenn genau eine der beiden angrenzenden WSZ besetzt ist. Wenn beide besetzt sind, ist  $\lambda_2^{sq} = 1$ , wenn mindestens einer der vier gemeinsamen Nachbarn besetzt ist, und andernfalls  $\lambda_2^{sq} = 2$ . Für den Erwartungswert erhält man

$$\langle \lambda_2^{sq} \rangle_p = 2pq + p^2(1 - q^4) + 2p^2q^4 = 2pq + p^2(1 + q^4). \quad (3.25)$$

Jede Kante  $c_1$  ist im Rand eines Quadrates und zweier Sechsecke enthalten. Sobald mindestens eine der umliegenden Zellen besetzt ist, ist die Kante vorhanden. Nur wenn das Quadrat  $\lambda = 2$  hat, ist  $\lambda(c_1) = 2$  und man erhält

$$\langle \lambda_1 \rangle_p = (1 - q^3) + p^2q^4. \quad (3.26)$$

Eine Ecke  $c_0$  gehört zu vier Zellen, von denen zwei Paare keine Gitternachbarn sind. Die Ecke ist vorhanden, wenn mindestens eine der vier Zellen besetzt ist.  $\lambda(c_0) = 2$ , wenn zwei WSZ besetzt sind, die keine nächsten Nachbarn sind, und gleichzeitig keine der vier gemeinsamen Gitternachbarn besetzt sind. Daher ist

$$\langle \lambda_0 \rangle_p = (1 - q^4) + 2p^2q^4. \quad (3.27)$$

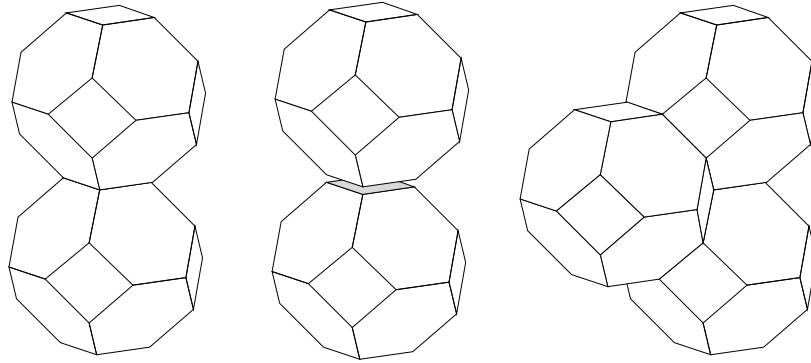


Abbildung 3.7: WSZ des bcc-Gitter gelten nur als benachbart, wenn sie nächste Nachbarn sind (sechseckige Flächen) oder einen gemeinsamen nächsten Nachbar haben: Zwei WSZ die sich an einem Quadrat berühren (links), werden getrennt (Mitte), solange sie keinen gemeinsamen nächsten Nachbar haben (rechts).

Es gibt pro Zelle acht Sechsecke und sechs Quadrate, die je zu zwei Zellen gehören, 36 Kanten, die zu drei Zellen gehören, und 24 Ecken, die zu vier Zellen gehören. Für die Euler-Charakteristik pro Zelle oder Gittervertex ergibt sich mit dieser Methode

$$\chi_{8-14}^{bcc}(p) = p - 4p^2 + 12p^4 - 12p^5 + 3p^6. \quad (3.28)$$

### 3.3.3 Weitere Anwendungsmöglichkeiten

Der vorgestellte Formalismus lässt sich auf jeden beliebigen Satz von  $\sigma$ -Variablen anwenden, und somit ist es möglich, geometrische Eigenschaften von Figuren zu berechnen, deren Konstituenten auf unterschiedlichste Weise zusammenhängen. Insbesondere ist es auch vorstellbar, wechselwirkende Modelle zu betrachten, und topologische Fluktuationen in Mikroemulsionen zu behandeln [15]. Topologischen Fluktuationen können sowohl Euler-Charakteristik, als auch integrale mittlere Krümmung und Oberfläche, verändern, und Beiträge zu den thermodynamischen Potentialen der Mikroemulsion liefern [16]. Dadurch wird sich das Phasendiagramm der Mikroemulsion verändern und unter Umständen zu neuen Phasen führen.



# Kapitel 4

## Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen

Nachdem wir in den vorangehenden Kapiteln Methoden vorgestellt haben, mit denen die mittlere Euler-Charakteristik für Perkulationsprozesse auf Gittern berechnet werden kann, werden im Folgenden die Euler-Charakteristiken einer Vielzahl zwei- und dreidimensionaler Gitter bestimmt. Die Resultate liefern weitere empirische Bestätigung für die in der Einleitung vorgestellten Beobachtungen. Darüberhinaus unterstützen Skalenargumente die Vermutung, dass für zweidimensionale Gitter die Nullstelle  $p_0$  der Euler-Charakteristik über der Perkolationsschwelle  $p_c$  liegt, falls  $p_c > \frac{1}{2}$  ist, und dass  $p_0 < p_c$  ist, falls  $p_c < \frac{1}{2}$  ist. Mit der in Kapitel 3 beschriebenen Methode kann die Euler-Charakteristik für bond-site-Perkolation berechnet werden, und die Beziehung zwischen der Nullstelle der Euler-Charakteristik und der Perkolationsschwelle auf bond-site-Perkolation erweitert werden.

### 4.1 Euler-Charakteristiken in zwei Dimensionen

Die Perkolationsschwelle  $p_c$  archimedischer Gitter (siehe Abschnitt 1.4.1) ist kleiner als die Nullstelle  $p_0$  und größer als der Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der mittleren Euler-Charakteristik. Das arithmetische Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  liefert eine exzellente Approximation von  $p_c$ . Die Ergebnisse der Untersuchung weiterer zweidimensionaler Gitter bestätigen dieses Verhalten; für  $p_c < \frac{1}{2}$  kehren sich beide Ungleichungen um und man findet  $p_0 < p_c < p_0^{(2)}$ . Allerdings gibt es auch Gitter, für die diese Ungleichungen nicht gelten. Auf diese Gitter wird im Kapitel 5 genauer eingegangen.

#### 4.1.1 Laves-Gitter

Laves-Gitter sind die dualen Gitter der archimedischen Gitter [10]. Da archimedische Gitter nur einen Vertextyp haben, sind alle Plaketten der Laves-Gitter gleich. Die Kantenzahl der Plaketten ist die Koordinationszahl  $z$  des archimedischen Gitters. Wie im Kapitel 2.5 beschrieben, betrachten wir die unabhängige Besetzung der Plaketten der archimedischen

Gitter mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$ . Im Folgenden beziehen sich die Begriffe Plaketten, Ecken und Kanten auf die archimedischen Gitter mit Vertexkonfiguration  $(n_1, \dots, n_z)$  (siehe Kapitel 1.4.1). Die Euler-Charakteristik lässt sich am einfachsten über die Beiträge disjunkter Zellen berechnen. Dazu bestimmen wir die erwartete Anzahl der offenen Plaketten, der randlosen Kanten und der Ecken, die bei Besetzung der Vertices mit abgeschlossenen Plaketten bedeckt werden.

- Die **Plaketten** sind mit Wahrscheinlichkeit  $q$  bedeckt.
- Jede **Ecke** ist von  $z$  Plaketten umgeben; diese Plaketten haben  $n_i$  Ecken,  $i = 1 \dots, z$ . Daher besteht zwischen der Zahl der Ecken  $E$  und der Zahl der Plaketten  $F$  die Beziehung  $F = E \sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}$ . Eine Ecke ist bedeckt, wenn mindestens eine der umgebenden Plaketten besetzt ist, und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - (1 - q)^z = 1 - p^z$  vorhanden. Die erwartete Anzahl der bedeckten Ecken pro Plakette ist  $\frac{1 - p^z}{\sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}}$ .
- Da jede **Kante** an zwei Ecken endet, und von jeder Ecke  $z$  Kanten ausgehen, gilt für die Zahl der Kanten  $K$  und Ecken  $E$  die Relation  $2K = zE$ . Eine Kante ist bedeckt, wenn mindestens eine der angrenzenden Zellen besetzt ist, und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - (1 - q)^2 = 1 - p^2$  vorhanden. Für die erwartete Anzahl der bedeckten Kanten pro Plakette erhält man  $\frac{z(1 - p^2)}{2 \sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}}$ .

Mit diesen Größen ist die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex

$$\bar{\chi}(q) = q - \frac{z}{2 \sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}} (1 - p^2) + \frac{1}{\sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}} (1 - p^z). \quad (4.1)$$

Die Euler-Charakteristik ist von der Reihenfolge, in der die Polygone um die Vertices angeordnet sind, unabhängig. Darüberhinaus gilt für einen planaren, zusammenhängenden Graphen nach dem Euler'schen Satz  $F - E + V = 1$ . Daraus erhält man

$$F \left( 1 - \frac{z}{2 \sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}} + \frac{1}{\sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i}} \right) = 1 \quad (4.2)$$

und weiter unter Vernachlässigung von Termen  $\sim 1/F$  die Beziehung  $\sum_{i=1}^z \frac{1}{n_i} = \frac{z}{2} - 1$ . Die Euler-Charakteristiken der dualen archimedischen Gitter hängen also nur von der Koordinationszahl  $z$  der archimedischen Gitter ab:

$$\bar{\chi}(q) = q - \frac{z}{z - 2} (1 - p^2) + \frac{2}{z - 2} (1 - p^z). \quad (4.3)$$

Die Euler-Charakteristik des Komplements ist

$$\boxed{\chi(p) = -\bar{\chi}(q) = p(1 - p) \left( 1 - \frac{2}{z - 2} \sum_{i=1}^{z-2} p^i \right)}. \quad (4.4)$$

Duales (archimedisches) Gitter	$\frac{\chi(p)}{p(1-p)}$	$p_0$	$p_0^{(2)}$	$\frac{p_0+p_0^{(2)}}{2}$	$p_c$
3, $12^2$	$1 - 2p$	1/2	1/2	1/2	1/2
4, 6, 12	$1 - 2p$	1/2	1/2	1/2	1/2
4, $8^2$	$1 - 2p$	1/2	1/2	1/2	1/2
$6^3$ , Sechseckgitter	$1 - 2p$	1/2	1/2	1/2	1/2
3, 6, 3, 6, Kagomégitter	$1 - p - p^2$	0.6180	0.5774	0.5977	0.5848(2)
3, 4, 6, 4	$1 - p - p^2$	0.6180	0.5774	0.5977	0.5824(2)
$4^4$ , Quadratgitter	$1 - p - p^2$	0.6180	0.5774	0.5977	0.5927
$3^4$ , 6	$1 - \frac{2(p+p^2+p^3)}{3}$	0.6914	0.6300	0.6607	0.6396(2)
$3^2$ , 4, 3, 4	$1 - \frac{2(p+p^2+p^3)}{3}$	0.6914	0.6300	0.6607	0.6500(2)
$3^3$ , $4^2$	$1 - \frac{2(p+p^2+p^3)}{3}$	0.6914	0.6300	0.6607	0.6476(2)
$3^6$ , Dreiecksgitter	$1 - \frac{p+p^2+p^3+p^4}{2}$	0.7413	0.6687	0.7050	0.6970(2)

Tabelle 4.1: Die mittleren Euler-Charakteristiken der Laves-Gitter: Die erste Spalte enthält die Vertexkonfigurationen der dualen archimedischen Gitter. Die zweite Spalte enthält die reduzierte Euler-Charakteristik  $\frac{\chi(p)}{p(1-p)}$  der Laves Gitter. In den folgenden Spalten sind die Nullstellen  $p_0$  und die Wendepunkte  $p_0^{(2)}$  von  $\chi(p)$ , sowie  $\frac{p_0+p_0^{(2)}}{2}$  angegeben. In der letzten Spalte stehen die site-Perkolationsschwellen  $p_c$  der Laves-Gitter. Die ersten vier Gitter bestehen nur aus Dreiecken; daher ist  $p_c = \frac{1}{2}$ . Die übrigen Perkolationsschwellen, abgesehen vom Quadratgitter, wurden in [19] numerisch bestimmt. Die Perkolationsschwelle des Quadratgitters stammt aus [31].

Die site-Perkolationsschwellen der Laves-Gitter sind, wo sie nicht exakt oder als archimedische Gitter bekannt sind, von van der Marck [19] numerisch bestimmt worden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Einen Plot der Daten findet man in Abbildung 4.3. Für Laves-Gitter gilt wie für archimedische Gitter  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$ . Die Korrelation von  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  mit  $p_c$  ist aber nicht so bemerkenswert gut wie bei den archimedischen Gittern. Die Euler-Charakteristik der Laves-Gitter hängt nur von der Kantenzahl der Plaketten des Gitters ab; die Perkolationsschwellen der Gitter, deren Plaketten gleich viele Kanten haben, sind aber i. A. unterschiedlich.

#### 4.1.2 2-uniforme Gitter

Es liegt nahe, als Verallgemeinerung der archimedischen Gitter mit einem Vertextyp, entsprechende Gitter mit zwei unterschiedlichen Vertextypen zu betrachten. 2-uniforme Gitter sind Gitter aus regelmäßigen Polygonen gleicher Kantenlänge und zwei verschiedenen Vertextypen (siehe [10]). Es gibt genau 20 verschiedene 2-uniforme Gitter (siehe Abbildungen im Abschnitt A.4.1). Diese Gitter lassen sich, analog zu den archimedischen Gittern, durch ihre Vertextypen charakterisieren. Jeder Vertextyp  $\nu$  wird durch die Folge  $(n_1, \dots, n_{z_\nu})_\nu$  der Kantenzahlen  $n_i$  der Polygone, die den Vertex umgeben, beschrieben. Darüberhinaus ist der Anteil  $s_\nu$  eines Vertextyps an der Gesamtzahl der Vertices zur Unterscheidung der

Gitter wichtig. Bis auf die Gitter 18 und 19 (siehe A.4.1) sind so alle Gitter eindeutig bezeichnet. Die Euler-Charakteristik eines Gitters ist durch  $(n_1, \dots, n_{z_\nu})_\nu$  und  $s_\nu$  vollständig festgelegt.

Um die Euler-Charakteristik zu berechnen, bestimmen wir die Zahlen der bedeckten Kanten und Ecken des dualen Gitters, wenn duale Plaketten mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  besetzt werden.

- Jedem Vertex entspricht eine duale **Plakette**, die mit Wahrscheinlichkeit  $q$  besetzt ist.
- Zu jeder Kante des 2-uniformen Gitters gibt es eine duale **Kante**. Die mittlere Koordinationszahl des 2-uniformen Gitters ist  $\bar{z} = s_1 z_1 + s_2 z_2$ . Daher ist die Zahl der Kanten pro dualer Plakette  $\frac{\bar{z}}{2}$ . Die Kanten sind mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^2$  bedeckt und die erwartete Anzahl bedeckter Kanten pro dualer Plakette ist  $\frac{\bar{z}(1-p^2)}{2}$ .
- Zu einem Vertex des Typs  $\nu$  des 2-uniformen Gitter “gehört”  $1/n_i(\nu)$  der ihn umgebenden Plaketten mit Kantenzahl  $n_i(\nu)$ ,  $i = 1, \dots, z_\nu$ . Jeder dieser Plaketten entspricht eine **Ecke** des dualen Gitter, die mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^{n_i(\nu)}$  bedeckt ist. Um die erwartete Anzahl der Ecken pro dualer Plakette zu bestimmen, muss man über beide Vertextypen und alle die Vertices umgebenden Plaketten summieren, und erhält  $\sum_{\nu=1,2} \sum_{i=1}^{z_\nu} \frac{s_\nu}{n_i(\nu)} (1 - p^{n_i(\nu)})$ .

Für die Euler-Charakteristik ergibt sich dann:

$$\bar{\chi}(q) = q - \frac{\bar{z}}{2}(1 - p^2) + \sum_{\nu=1,2} \sum_{i=1}^{z_\nu} \frac{s_\nu}{n_i(\nu)} (1 - p^{n_i(\nu)}). \quad (4.5)$$

Hiervon kann ein Faktor  $p(1 - p)$  abgespalten werden und man erhält

$$\boxed{\chi(p) = -\bar{\chi}(1 - p) = p(1 - p) \left( 1 - p \sum_{\nu=1,2} \sum_{i=1}^{z_\nu} \frac{s_\nu}{n_i(\nu)} \sum_{\mu=0}^{n_i(\nu)-3} p^\mu \right)}. \quad (4.6)$$

Die Euler-Charakteristiken der 20 Gitter sind in Tabelle 4.2 angegeben.

Die Beschränkung auf zwei Vertextypen ist unwesentlich, und die entsprechend verallgemeinerte Formel gilt für beliebige planare Gitter mit  $k$  Vertextypen (siehe auch [36]). Für einen Vertextyp können so die Euler-Charakteristiken der archimedischen Gitter berechnet werden.

Ich habe die Perkolationsschwellen der 2-uniformen Gitter numerisch mit einer Genauigkeit von  $2 * 10^{-4}$  bestimmt. Die verwendeten numerischen Methoden sind im Appendix A angegeben; Besonderheiten der Gitter und finite-size-scaling Plots sind in Abschnitt A.4.1 aufgeführt. Die Resultate sind zusammen mit den Nullstellen  $p_0$  und Wendepunkten  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristiken in Tabelle 4.3 aufgeführt. Ein Plot der Daten ist in Abbildung 4.3 zu finden. Für alle 2-uniformen Gitter gilt  $p_0^{(2)} < p_c < p_0$ . Darüberhinaus fällt das



Nr.	Vertexkonfiguration	$\frac{\chi(p)}{p(1-p)}$
1	$\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^4, 6)$	$\frac{p^4-5p^3}{12} + \frac{5p^2}{6} - \frac{5p}{2} + 1$
2	$\frac{1}{4}(3^6) + \frac{3}{2}(3^4, 6)$	$\frac{p^4-5p^3}{8} + \frac{5p^2-11p}{4} + 1$
3	$\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^3, 4^2)$	$\frac{p^2-9p}{4} + 1$
4	$\frac{1}{3}(3^6) + \frac{2}{3}(3^3, 4^2)$	$\frac{p^2-7p}{3} + 1$
5	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 3, 4)$	$\frac{3p^2-17p}{7} + 1$
6	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 12)$	$\frac{p^{10}-11p^9+55p^8-165p^7+330p^6}{7} - 33(p^5 - p^4) - \frac{165p^3+84p^2-38p}{7} + 1$
7	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 6)$	$\frac{2p^4-10p^3+20p^2-26p}{7} + 1$
8	$\frac{1}{2}(3^4, 6) + \frac{1}{2}(3^2, 6^2)$	$\frac{p^4-5p^3+10p^2-14p}{4} + 1$
9	$\frac{1}{3}(3^3, 4^2) + \frac{2}{3}(3^2, 4, 3, 4)$	$\frac{p^2-5p}{2} + 1$
10	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4)$	$\frac{p^2-5p}{2} + 1$
11	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$	$\frac{p^4-5p^3}{12} + \frac{4p^2}{3} - 3p + 1$
12	$\frac{2}{3}(3^3, 4^2) + \frac{1}{3}(4^4)$	$\frac{2p^2-8p}{3} + 1$
13	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(4^4)$	$\frac{3p^2-11p}{4} + 1$
14	$\frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$	$\frac{p^4-5p^3}{12} + \frac{4p^2}{3} - 3p + 1$
15	$\frac{2}{3}(3^2, 6^2) + \frac{1}{3}(3, 6, 3, 6)$	$\frac{p^4-5p^3+10p^2}{3} - 4p + 1$
16	$\frac{1}{2}(3, 4, 3, 12) + \frac{1}{2}(3, 12^2)$	$\frac{p^{10}-11p^9+55p^8-165p^7}{12} + \frac{330p^6-231(p^5-p^4)-165p^3+83p^2-31p}{4} + 1$
17	$\frac{2}{3}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{3}(3, 4, 6, 4)$	$\frac{p^4-5p^3+13p^2-21p}{6} + 1$
18	$\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$	$\frac{p^4-5p^3+12p^2-18p}{5} + 1$
19	$\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$	$\frac{p^4-5p^3+12p^2-18p}{5} + 1$
20	$\frac{1}{3}(3, 4, 6, 4) + \frac{2}{3}(4, 6, 12)$	$\frac{p^{10}-11p^9+55p^8}{18} + \frac{-55p^7+110p^6-154p^5+155p^4-115p^3+67p^2-35p}{6} + 1$

Tabelle 4.2: Die reduzierten mittleren Euler-Charakteristiken der 2-uniformen Gitter. Die Spalte “Nr.” enthält die in [10] angegebene Reihenfolge.

arithmetische Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  fast mit der Perkolationsschwelle zusammen. Größere Abweichungen der Perkolationsschwelle vom arithmetischen Mittel finden sich bei den Gittern 16, 20 und 6. Alle drei Gitter haben sehr hohe Perkolationsschwellen und eine ausgeprägte Substruktur. Diese Substrukturen können zusätzliche Löcher enthalten, ohne die Konnektivität zu beeinflussen. Dadurch wird die Nullstelle der Euler-Charakteristik relativ zur Perkolationsschwelle abgesenkt. Die Einflüsse von Substrukturen werden in Kapitel 5 weiter diskutiert.

Label	Nr.	Vertexkonfiguration	$p_0$	$p_0^{(2)}$	$\frac{p_0 + p_0^{(2)}}{2}$	$p_c$
1	16	$\frac{1}{2}(3, 4, 3, 12) + \frac{1}{2}(3, 12^2)$	0.790891	0.715906	0.75340	0.76803
2	20	$\frac{1}{3}(3, 4, 6, 4) + \frac{2}{3}(4, 6, 12)$	0.742377	0.666398	0.70440	0.71574
3	6	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 12)$	0.691763	0.623064	0.65741	0.68084
4	15	$\frac{2}{3}(3^2, 6^2) + \frac{1}{3}(3, 6, 3, 6)$	0.675609	0.623114	0.64936	0.64995
5	7	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 6)$	0.653171	0.607030	0.63010	0.63296
6	18	$\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$	0.652602	0.604055	0.62833	0.62866
7	19	$\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$	0.652602	0.604055	0.62833	0.62791
8	17	$\frac{2}{3}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{3}(3, 4, 6, 4)$	0.646814	0.599408	0.62311	0.6221
9	8	$\frac{1}{2}(3^4, 6) + \frac{1}{2}(3^2, 6^2)$	0.635369	0.594187	0.61478	0.6171
10	11	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$	0.605291	0.570528	0.58791	0.58853
11	14	$\frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$	0.605291	0.570528	0.58791	0.58828
12	13	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(4^4)$	0.590667	0.559817	0.57524	0.5720
13	12	$\frac{2}{3}(3^3, 4^2) + \frac{1}{3}(4^4)$	0.581139	0.553638	0.56740	0.5648
14	2	$\frac{1}{4}(3^6) + \frac{3}{2}(3^4, 6)$	0.568381	0.546238	0.55731	0.5607
15	10	$\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4)$	0.561553	0.540833	0.55119	0.5505
16	9	$\frac{1}{3}(3^3, 4^2) + \frac{2}{3}(3^2, 4, 3, 4)$	0.561553	0.540833	0.55119	0.5504
17	5	$\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 3, 4)$	0.552970	0.535183	0.54408	0.5440
18	1	$\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^4, 6)$	0.545333	0.530238	0.53779	0.54074
19	4	$\frac{1}{3}(3^6) + \frac{2}{3}(3^3, 4^2)$	0.541381	0.527525	0.53445	0.53418
20	3	$\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^3, 4^2)$	0.531129	0.520726	0.52593	0.52584

Tabelle 4.3: Euler-Charakteristik und site-Perkolation 2-uniformer Gitter: Für die Nullstelle  $p_0$  und den Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristik, sowie die site-Perkolationsschwelle  $p_c$  aller 2-uniformen Gitter gilt  $p_0^{(2)} < p_c < p_0$ . Das arithmetische Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  ist eine gute Approximation der Perkolationsschwelle. Die Perkolationsschwellen wurden numerisch bestimmt, ihre Genauigkeit liegt bei  $2 \cdot 10^{-4}$ . In der Spalte “Nr.” ist die in [10] angegebene Reihenfolge zu finden, “Label” bezeichnet die durch fallende Perkolationsschwellen gegebene Reihenfolge.

### 4.1.3 Bond-Perkolation

Bond-Perkolation lässt sich, wie in der Einleitung erläutert, durch Übergang zum Überdeckungsgitter als site-Perkolation formulieren.

Das Überdeckungsgitter  $G^{cov}$  entsteht, indem man auf jede Gitterkante des ursprünglichen Gitters  $G$  einen Vertex setzt, und diesen Vertex mit allen Vertices verbindet, dessen zugehörige Kanten an einem gemeinsamen Vertex von  $G$  enden. Überdeckungsgitter planarer zweidimensionaler Gitter sind im Allgemeinen dekorierte Mosaiken. Jede Plakette von  $G$  entspricht einer **undekorierten** Plakette von  $G^{cov}$ , die in die Plakette von  $G$  eingeschrieben ist (siehe Abb. 4.1 rechts). Jeder Vertex von  $G$  entspricht einer **dekorierten** Plakette von  $G^{cov}$  (siehe Abb. 4.1 links). Die Kantenzahl dieser Plaketten ist die Koordinationszahl  $\bar{z}$  des Vertex von  $G$ . Nur Gitter mit  $z \leq 3$  haben planare Überdeckungsgitter. Das Kagomé-Gitter ist das Überdeckungsgitter des Sechseckgitters.

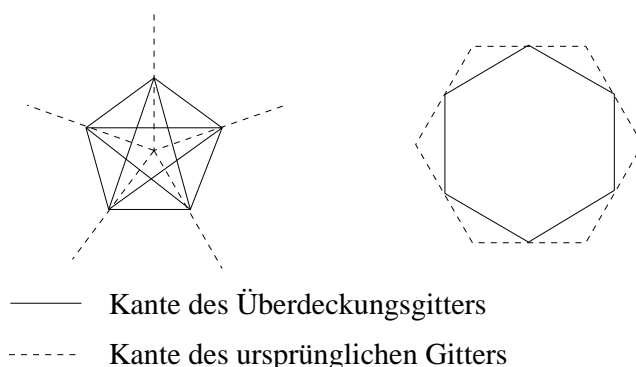


Abbildung 4.1: Links: Der Überdeckungsgraph eines Vertex mit Koordinationszahl  $\bar{z} = 5$  ist ein dekoriertes  $\bar{z}$ -Eck. Rechts: In jede Plakette des ursprünglichen Gitters wird eine undekorierte Plakette der gleichen Kantenzahl eingeschrieben.

Wir betrachten bond-Perkolation auf einem archimedischen Gitter mit Vertexkonfiguration  $(n_1, \dots, n_{\bar{z}})$  und wollen die Euler-Charakteristik des Überdeckungsgitters bestimmen. Die Euler-Charakteristiken der Überdeckungsgitter werden zweckmäßigerweise mit der im Kapitel 2.5.1 beschriebenen Methode für beliebige dekorierte Mosaiken ausgerechnet. Um die Euler-Charakteristik zu bestimmen, müssen wir die erwarteten Anzahlen der unterschiedlichen Vertextypen (siehe Abb. 4.2) kennen.

- Auf jeden Vertex von  $G^{cov}$ , d.h. auf jede Kante des archimedischen Gitters, wird ein Wechselwirkungsvertex  $i \in I$  gesetzt. Diese Vertices sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt.
- Auf jede Kante des undekorierten Mosaiks von  $G^{cov}$  werden Spinvertices  $s \in S'$  gesetzt; diese Vertices sind immer vorhanden, werden aber nur gezählt, wenn mindestens einer der benachbarten Vertices aus  $I$  besetzt ist. Das Mosaik hat Koordinationszahl 4, und der Beitrag der Vertices aus  $S'$  pro Wechselwirkungsvertex ist daher  $2(1 - (1 - p)^2) = 2(1 - q^2)$ .

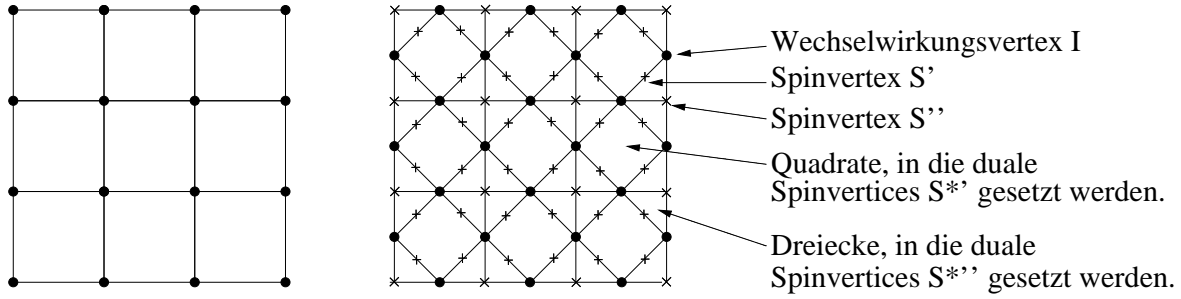


Abbildung 4.2: Links ist ein Ausschnitt des Quadratgitters zu sehen, rechts ist der Wechselwirkungsgraph des Überdeckungsgitters dieses Ausschnitts gezeigt. In alle Plaketten dieses Graphens, werden duale Spinvertices gesetzt.

- In jede dekorierte Plakette von  $G^{cov}$  wird ein Spinvertex  $s \in S''$  gesetzt und mit allen umgebenden Wechselwirkungsvertices verbunden. Die Kantenzahl dieser Plaketten ist die Koordinationszahl  $\bar{z}$  des archimedischen Gitters. Die Zahl dieser Plaketten verhält sich zu der Zahl der Wechselwirkungsvertices wie die Zahl der Vertices zu der Zahl der Kanten des archimedischen Gitters. Wiederum werden Spins  $s \in S''$  nur gezählt, wenn sie nicht isoliert sind. Der Beitrag der Vertices aus  $S''$  pro Wechselwirkungsvertex ist daher  $\frac{2}{\bar{z}}(1 - (1 - p)^{\bar{z}}) = \frac{2}{\bar{z}}(1 - q^{\bar{z}})$ . Die Spinmenge  $S$  aus Gleichung (2.16) ist die Vereinigung aus  $S'$  und  $S''$ .
- In jede undekorierte Plakette wird ein dualer Spin  $s^* \in S^{*'}$  gesetzt. Diese Plaketten entsprechen den Plaketten des archimedischen Gitters. Pro Vertex des archimedischen Gitters gibt es  $\frac{1}{n_i}$  Plaketten mit Kantenzahl  $n_i$ ,  $i = 1, \dots, \bar{z}$ ; pro Wechselwirkungsvertex gibt es  $\frac{2}{\bar{z}}$  Vertices des archimedischen Gitters und damit  $\frac{2}{\bar{z}n_i}$  duale Spins  $s^* \in S^{*'}$  pro Wechselwirkungsvertex, wiederum für  $i = 1, \dots, \bar{z}$ . Duale Spins werden gezählt, wenn sie nur von besetzten Wechselwirkungsvertices umgeben sind; Summation über alle  $i$  liefert den Beitrag  $\sum_{i=1}^{\bar{z}} \frac{2}{\bar{z}n_i} p^{n_i}$ .
- Auch in die Dreiecke, die entstehen, wenn Spins  $s \in S''$  mit den umliegenden Vertices aus  $I$  verbunden werden, müssen duale Spins  $s^* \in S^{*''}$  gesetzt werden. Es gibt  $\bar{z}$  dualer Spins  $s^*$  pro Spin  $s \in S''$  und damit zwei pro Wechselwirkungsvertex. Wenn beide Wechselwirkungsvertices auf den Ecken des Dreiecks besetzt sind, wird der Spin gezählt, und der Beitrag der dualen Spins aus  $S^{*''}$  ist  $2p^2$ .
- Das Mosaik hat Koordinationszahl 4; darüberhinaus ist jeder Vertex aus  $I$  mit zwei Vertices aus  $S''$  verbunden und hat daher Koordinationszahl 6.

Mit Gleichung (2.16) und den eben bestimmten Größen erhält man für die mittlere Euler-Charakteristik des Überdeckungsgitters eines archimedischen Gitters mit Vertexkonfigura-

Vertexkon.	$\frac{\chi_{cov}(p)}{p(1-p)}$	$p_0^{cov}$	$p_0^{(2)cov}$	$\frac{p_0^{cov} + p_0^{(2)cov}}{2}$	$p_c^{bond}$
$3, 12^2$	$1 - p - \frac{1}{9} \sum_{i=2}^{10} p^i$	0.7580	0.6863	0.7221	0.7406(2)
$4, 6, 12$	$1 - p - \frac{2p^2 + p^3 + p^4}{6} - \frac{1}{18} \sum_{i=5}^{10} p^i$	0.7054	0.6380	0.6717	0.6935(2)
$4, 8^2$	$1 - p - \frac{1}{3}p^2 - \frac{1}{6} \sum_{i=3}^6 p^i$	0.6964	0.6384	0.6674	0.6768(2)
$6^3$	$1 - p - \frac{1}{3}(p^2 + p^3 + p^4)$	0.6756	0.6231	0.6494	0.65270...
$3, 6, 3, 6$	$1 - 2p - \frac{1}{3}(p^2 + p^3 + p^4)$	0.5277	0.5178	0.5228	0.5244053(3)
$3, 4, 6, 4$	$1 - 2p - \frac{1}{6}p^2 - \frac{p^3 + p^4}{12}$	0.5134	0.5083	0.5109	0.5250(2)
$4^4$	$1 - 2p$	0.5	0.5	0.5	0.5
$3^4, 6$	$1 - 3p + \frac{1}{15}(23p^2 - 7p^3 - p^4)$	0.4069	0.4332	0.4200	0.4344(2)
$3^2, 4, 3, 4$	$1 - 3p + \frac{1}{5}(7p^2 - 2p^3)$	0.3992	0.4305	0.4148	0.4142(2)
$3^3, 4^2$	$1 - 3p + \frac{1}{5}(7p^2 - 2p^3)$	0.3992	0.4305	0.4148	0.4195(2)
$3^6$	$1 - 4p + \frac{1}{3}(10p^2 - 5p^3 + p^4)$	0.3244	0.3769	0.3506	0.34729...

Tabelle 4.4: Euler-Charakteristik und bond-Perkolation auf archimedischen Gittern: Die erste Spalte enthält die Vertexkonfiguration des archimedischen Gitters und die zweite die reduzierte mittlere Euler-Charakteristik des Überdeckungsgitters  $\frac{\chi_{cov}(p)}{p(1-p)}$ . Bei fast allen Gittern mit bond-Perkolationsschwelle  $p_c \geq \frac{1}{2}$  gilt für die Nullstelle  $p_0$  und den Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristik  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$ . Für Gitter mit  $p_c < \frac{1}{2}$  gilt  $p_0^{(2)} \geq p_c \geq p_0$ . Das Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  liegt nahe bei  $p_c$ . Die bond-Perkolationsschwellen des Dreiecks- ( $3^6$ ), Sechsecks- ( $6^3$ ) und Quadratgitters ( $4^4$ ) sind exakt bekannt, der Wert für das Kagomé-gitter ( $3, 6, 3, 6$ ) stammt aus [31], alle übrigen aus [19].

tion  $(n_1, \dots, n_{\bar{z}})$

$$\chi_{cov}(p) = p + 2(1 - q^2) + \frac{2}{\bar{z}}(1 - q^{\bar{z}}) + 2p^2 + \sum_{i=1}^{\bar{z}} \frac{2}{\bar{z}n_i} p^{n_i} - 6p. \quad (4.7)$$

Die Euler-Charakteristiken der Überdeckungsgitter aller archimedischen Gitter, die Nullstellen und Wendepunkte der Euler-Charakteristiken und die bond-Perkolationsschwellen der archimedischen Gitter sind in Tabelle 4.4 zusammengetragen. Die Perkolationsschwellen sind von van der Marck [19] mit Genauigkeit  $2 \cdot 10^{-4}$  bestimmt worden. Um die entsprechenden Werte für die Laves-Gitter zu erhalten, muss  $p$  durch  $1 - p$  ersetzt werden. Der Plot befindet sich wieder in Abbildung 4.3. Für bond-Perkolationsschwellen gilt, mit Ausnahme des  $(3, 4, 6, 4)$ -Gitters,  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$  falls  $p_c \geq \frac{1}{2}$  ist und  $p_0^{(2)} \geq p_c \geq p_0$  falls  $p_c \leq \frac{1}{2}$  ist.

#### 4.1.4 Irreguläre Gitter

Es gibt einige weitere Gitter, deren site-Perkolationsschwellen bekannt sind, die aber nicht in die oben behandelten Kategorien passen. Daher werden sie hier gesondert vorgestellt.

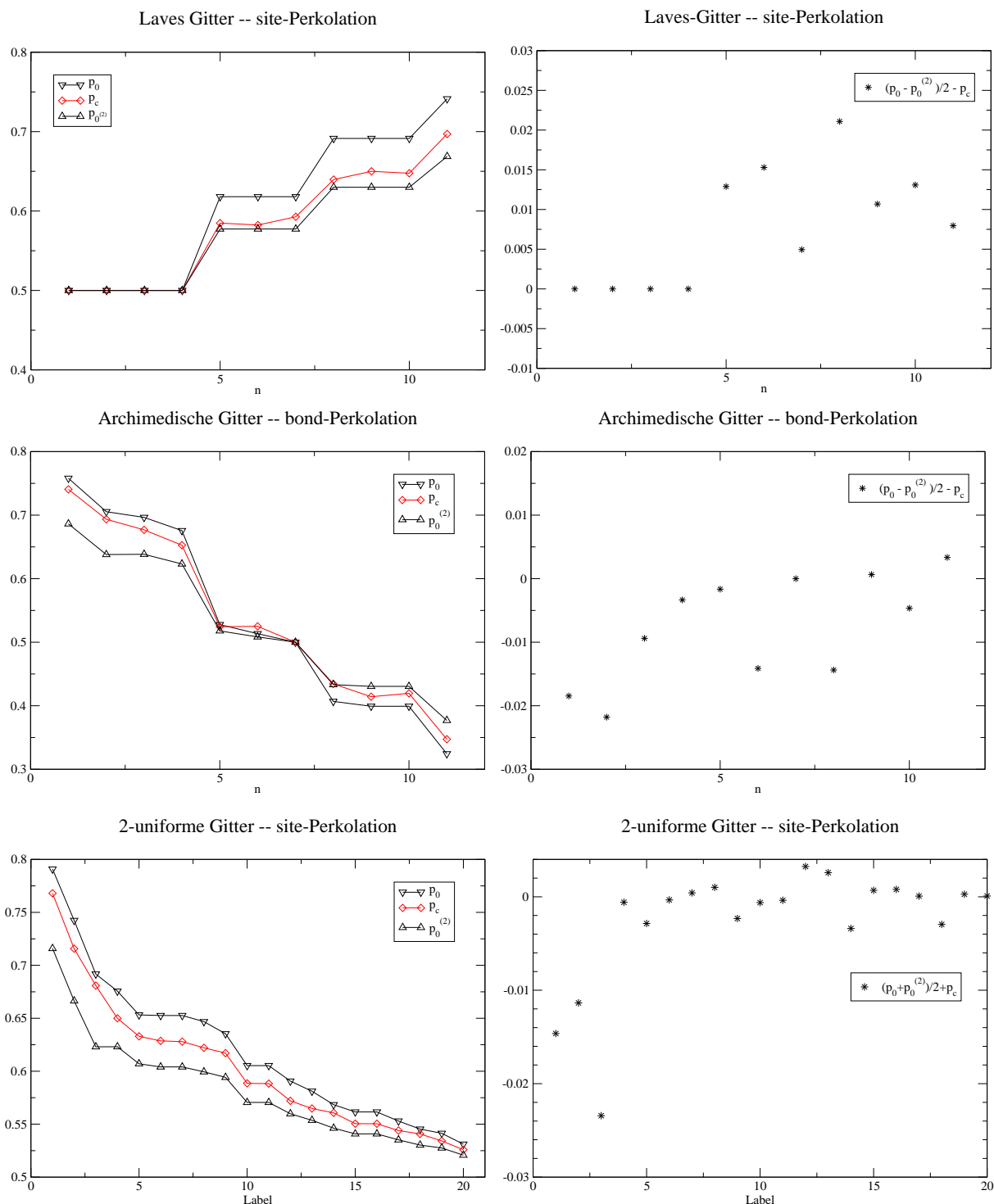


Abbildung 4.3: In den drei Grafiken auf der linken Seite sind die Nullstellen  $p_0$  und Wendepunkte  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristiken, sowie die Perkolationsschwellen  $p_c$  aller regelmäßigen Gitter aufgetragen. In den drei rechten Grafiken ist die Abweichung des arithmetischen Mittels aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  von  $p_c$  gezeigt. Die numerischen Werte sind in den Tabellen 4.4, 4.3 und 4.1 zu finden. Der Plot für site-Perkolation archimedischer Gitter ist in Abb. 1.18 zu finden.

Das Bowtie-Gitter hat Vertexkonfiguration  $[\frac{1}{2}(4, 3, 4, 3)_1 + \frac{1}{2}(4, 3^2, 4, 3^2)_2]$ ; sein duales Gitter  $[\frac{2}{3}(4, 6^2)_1 + \frac{1}{3}(4, 6, 4, 6)_2]$  (siehe Abb. 4.4). Für die Euler-Charakteristiken erhält man mit Gleichung (4.6)

$$\chi(p) = p(1-p) \left( 1 - \frac{3}{2}p - \frac{1}{2}p^2 \right) \quad (4.8)$$

$$\chi^{dual}(p) = p(1-p) \left( 1 - \frac{2p + 2p^2 + p^3 + p^4}{3} \right). \quad (4.9)$$

Das Penrose-Gitter ist ein nichtperiodisches Gitter, dessen Plaketten alle Vierecke sind [10]. Seine mittlere Euler-Charakteristik ist daher die gleiche wie beim Quadratgitter.

Auch für die zufälligen Delauny- und Voronoi-Gitter [37] lässt sich in zwei Dimensionen die mittlere Euler-Charakteristik bestimmen. Das Delauny-Gitter besteht nur aus Dreiecken und die Euler-Charakteristik ist  $\chi^{delauny}(p) = p(1-p)(1-2p)$ . Die Euler-Charakteristik des Voronoi-Gitters hängt von der Verteilung  $s_n$  der Plaketten mit Kantenzahl  $n$  ab, die aber nur approximativ bekannt ist. Der Mittelwert der Kantenzahl ist 6 und die Koordinationszahl fast sicher  $z = 3$ . Damit erhält man

$$\chi^{Voronoi}(p) = p - 1 + \frac{3}{2}(1-p^2) - \frac{1}{2} \sum_{n \geq 3} s_n(1-p^n). \quad (4.10)$$

Das Überdeckungsgitter des Voronoi-Gitters entspricht einem Kagomé-Gitter, in dem die Sechsecke durch unregelmäßige Polygone ersetzt sind. Die Kantenzahl der unregelmäßigen Polygone hat die Verteilung  $s_n$ , und die Euler-Charakteristik ist mit Gl. (4.7)

$$\chi^{Vor.cov.}(p) = p + 2(1-p^2) + \frac{2}{3}(1-p^3) - 6p + 2p^2 + \frac{2}{3} \sum_{n \geq 3} s_n p^n. \quad (4.11)$$

Die Werte der Perkolationsschwellen  $p_c$  der Gitter, sowie der Nullstellen  $p_0$  und Wendepunkte  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristiken sind in Tabelle 4.5 zusammengetragen. In allen Fällen gilt  $p_0 \geq p_c \geq p_0^{(2)}$ . Steven van der Marck [19] hat noch für eine Reihe weiterer Gitter Perkolationsschwellen bestimmt. Viele dieser Gitter enthalten aber Substrukturen und zeigen die Grenzen der Gültigkeit der Faustregel auf. Auf diese Gitter wird im nächsten Kapitel genauer eingegangen.

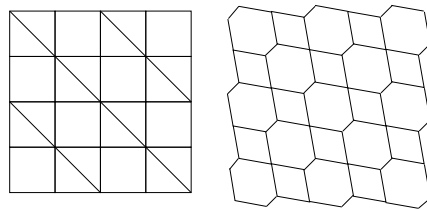


Abbildung 4.4: Bowtie- (links) und duales Bowtie-Gitter

Name	$p_0$	$p_0^{(2)}$	$\frac{p_0 + p_0^{(2)}}{2}$	$p_c$
bowtie	0.5616	0.5408	0.5512	0.5474(8)[18]
bowtie dual	0.7048	0.6411	0.6730	0.6653(6)[18]
Penrose	0.6180	0.5774	0.5977	0.5837(2)[42]
Delauny	1/2	1/2	1/2	1/2
Voronoi	0.7548	0.6787	0.7167	–
Voronoi bond	0.6855	0.6288	0.6572	0.6670(1)[13]

Tabelle 4.5: Perkolation und Euler-Charakteristik unregelmäßiger Gitter: Für die Nullstellen  $p_0$  und die Wendepunkte  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristiken und die Perkolationsschwellen  $p_c$  gilt  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$ . Das Mittel aus  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  ist nahe bei  $p_c$ . Abgesehen von der Zeile “Voronoi bond”, beziehen sich alle Werte auf site-Perkolation. Um  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  des Voronoi-Gitters zu erhalten, wurde eine approximative Verteilung  $s_n$  der Plaketten mit Kantenzahl  $n$  aus [4] verwendet.

#### 4.1.5 Zufällig dekorierte Mosaik

Ein Gitter heisst dekoriertes Mosaik, wenn es aus einem planaren Gitter (Mosaik) besteht, dessen Plaketten teilweise um allen diagonalen Kanten erweitert wurden. Die Vertices auf dem Rand einer solchen Plakette sind dann alle durch Kanten verbunden, und die Plakette heisst dekoriert (siehe Kapitel 1.3.2). Um zu untersuchen, wie sich  $p_c$  mit dem Bruchteil der dekorierten Plaketten eines Mosaiks ändert, kann man Gitterplaketten mit Wahrscheinlichkeit  $m$  dekorieren, und  $p_c$  für eine Reihe verschiedener Werte von  $m$  bestimmen. Die mittlere Euler-Charakteristik dieser statistisch dekorierten Mosaik kann mit Gl. (2.16) bestimmt werden. Dazu müssen die Kardinalitäten der Vertexmengen und die mittlere Koordinationszahl des Wechselwirkungsgraphs (siehe Abb. 4.5) bestimmt werden.

- Wechselwirkungsverices sitzen auf jedem Gitterplatz und sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt.
- Spinvertices  $s \in S$  sitzen auf allen Kanten und in dem mit Wahrscheinlichkeit  $m$  dekorierten Plaketten. Wenn das Mosaik nur Plaketten mit Kantenzahl  $n$  und Vertices

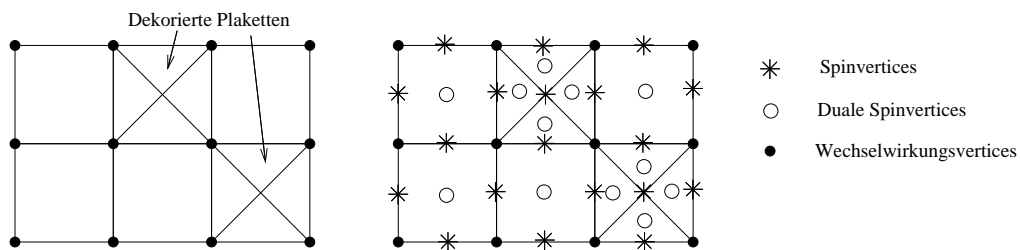


Abbildung 4.5: Teil eines dekorierten Quadratgitters (links) und der resultierende Wechselwirkungsgraph (rechts).



mit Koordinationszahl  $z$  hat, gibt es pro Wechselwirkungsvertices im Mittel  $\frac{z}{2}(1 - (1 - p)^2) + m\frac{z}{n}(1 - (1 - p)^n)$  Spins. Bei einem komplizierteren Gitter treten mehr Terme auf, die aber analog berechnet werden können.

- Duale Spinvertices  $s^* \in S^*$  werden in alle undekorierten Plaketten und in die Dreiecke, in die die dekorierten Plaketten durch den Wechselwirkungsgraph zerschnitten werden, gesetzt. Sie werden nur dann gezählt, wenn alle umliegenden Wechselwirkungsvertices besetzt sind. Haben alle Plaketten Kantenzahl  $n$ , gibt es pro Wechselwirkungsvertex  $(1 - m)\frac{z}{n}p^n + mzp^2$  duale Spins.
- Die Koordinationszahl eines Wechselwirkungsvertex ist die des Mosaiks  $z$ , zuzüglich der Zahl der ihn umgebenden dekorierten Plaketten. Die mittlere Koordinationszahl ist  $\bar{z} = z + \sum_{i=1}^z im^i(1 - m)^{z-i} \binom{i}{z}$ .

Mit Gleichung (2.16) und den oben bestimmten Größen lässt sich die Euler-Charakteristik ausrechnen.

Die Perkolationsschwellen komplementär dekorierte Mosaik ergänzen sich zu 1. Für  $m = 1/2$  sind die zufällig dekorierte Mosaik im statistischen Sinn selfmatching, und  $p_c$  sowie  $p_0$  sind  $1/2$ . Perkolation auf zufällig dekorierte Gittern ist eine Form der gemischten Perkolation. Vertices werden mit Wahrscheinlichkeit  $p$  und Plaketten mit Wahrscheinlichkeit  $m$  besetzt. Kanten sind immer besetzt.

Ich habe für das Quadrat-, Sechseck- und Kagomé-Gitter, sowie das  $3^3, 4^2$ - und das  $3, 12^2$ -Gitter die Perkolationsschwelle in Abhängigkeit von  $m$  berechnet. Details der Simulation sind im Anhang über numerische Methoden zusammengefasst. Die Perkolationsschwelle fällt vom leeren zum vollständig dekorierte Mosaik ab (siehe Abb. 4.6). Die Perkolationsschwellen von Gittern mit einem Anteil an dekorierte Plaketten von  $m \in [0, 1]$  und  $1 - m$  ergänzen sich zu  $1 \pm 0.01$ , wie aufgrund der statistischen matching-Eigenschaft zu erwarten war. Die Genauigkeit der Simulation ist nicht sehr hoch, da für jedes Gitter 100 verschiedene Werte von  $m$  simuliert werden mussten. Die Fehlerabschätzungen ergeben sich einfach aus den Fluktuationen von  $p_c(m)$  um eine glatte Kurve.

Während für Gitter mit Perkolationsschwellen nahe  $\frac{1}{2}$  die Kurve  $p_c(m)$  kaum von einer Geraden abweicht, ist beim Sechseck- und  $3, 12^2$ -Gitter ein geschwungener Verlauf deutlich erkennbar (siehe Abb. 4.6). Für alle Gitter und alle  $m$  ist die Nullstelle der Euler-Charakteristik im Rahmen der Genauigkeit der Simulation für  $p_c < \frac{1}{2}$  eine untere und für  $p_c > \frac{1}{2}$  eine obere Schranke. Für den Wendepunkt der Euler-Charakteristik gilt das komplementäre Verhalten, anders als für  $m = 0$  und  $m = 1$ , nicht. Die Kurve  $p_0(m)$  hat sehr ähnliche Form wie  $p_c(m)$ , und beide Kurven können durch Skalierung fast zur Deckung gebracht werden. In Abbildung 4.7 ist die Differenz von  $p_c(m)$  und  $(p_0(m) - 0.5)\frac{p_c(1)-0.5}{p_0(1)-0.5} + 0.5$  für die untersuchten Gitter dargestellt. Die Abweichung liegt innerhalb der Fehlergrenzen der Simulation, zeigt aber für Gitter mit großem  $p_c$  systematische Variation.

Die Daten stimmen innerhalb der Fehlergrenzen mit bekannten Perkolationsschwellen für undekorierte oder vollständig dekorierte Gitter überein [31].

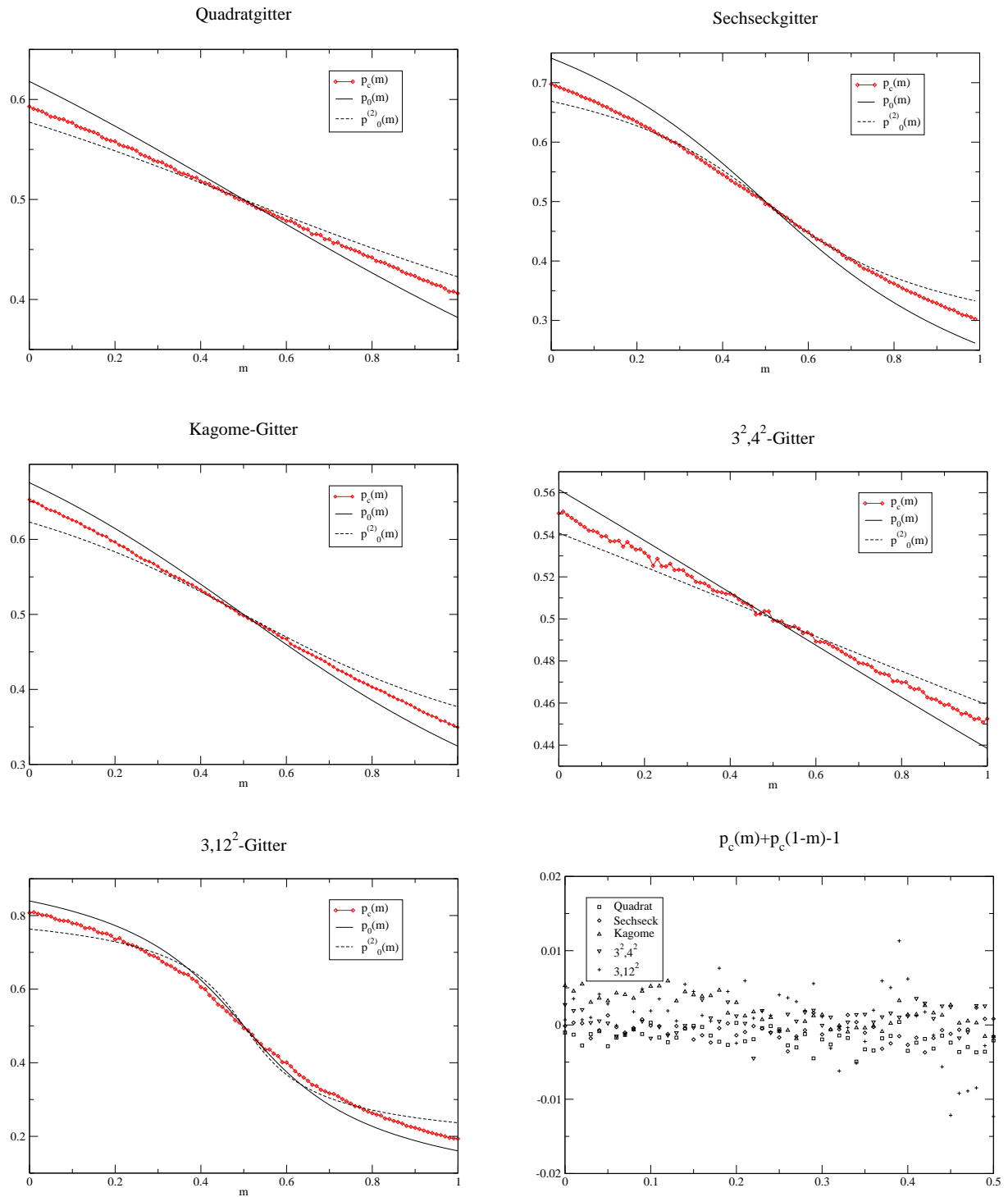


Abbildung 4.6: Die Grafiken zeigen die Perkolationschwelle  $p_c(m)$  in Abhängigkeit vom Bruchteil  $m$  der dekorierten Plaketten für die fünf untersuchten Gitter. Zusätzlich sind Nullstelle  $p_0(m)$  und Wendepunkt  $p_0^{(2)}(m)$  der Euler-Charakteristik eingezeichnet. Rechts unten ist die Abweichung von  $p_c(m) + p_c(1-m)$  von 1 für alle Gitter aufgetragen.

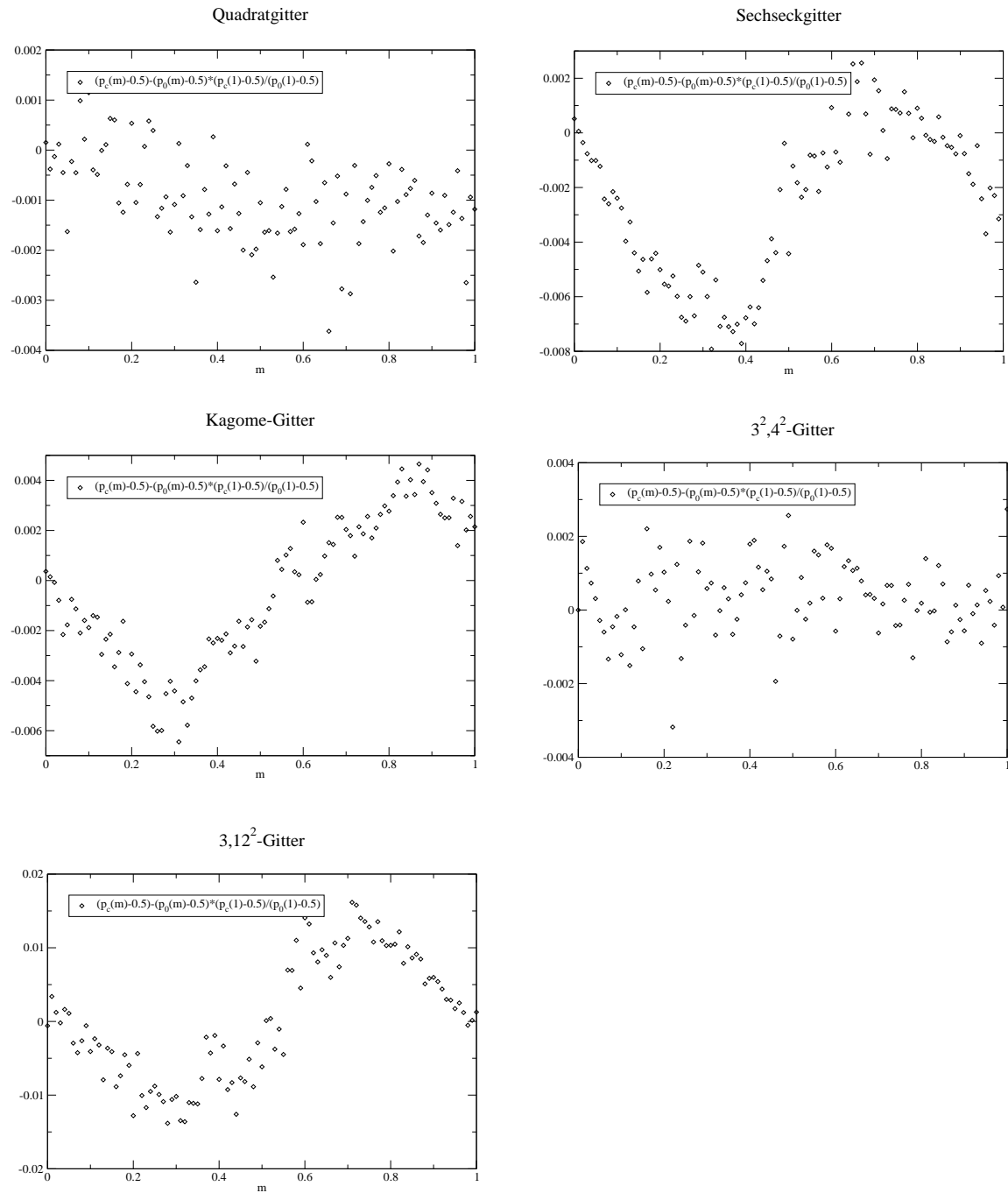


Abbildung 4.7: Die Perkolationschwelle  $p_c(m)$  von Gittern, deren Plaketten mit Wahrscheinlichkeit  $m$  dekoriert sind, ist fast identisch mit der reskalierten Nullstelle der Euler-Charakteristik  $(p_0(m) - 0.5) \frac{p_c(1) - 0.5}{p_0(1) - 0.5} + 0.5$ . Für die fünf untersuchten Gitter ist die Differenz beider Größen aufgetragen.

## 4.2 Euler-Charakteristik großer Cluster

Bei allen bisher untersuchten zweidimensionalen Gitter, mit Ausnahme der bond-Perkolation auf dem  $(3, 4, 6, 4)$ -Gitter, ist  $p_0$  größer als  $p_c$ , wenn  $p_c > \frac{1}{2}$ , und kleiner, wenn  $p_c < \frac{1}{2}$  ist. Auch die Untersuchungen an zufällig dekorierten Gitter haben die Vermutung sehr gut bestätigt, dass  $p_0 > p_c$  ist, falls  $p_c > \frac{1}{2}$  ist, und, dass  $p_0 < p_c$  ist, falls  $p_c < \frac{1}{2}$  ist. Zusammen mit den archimedischen Gittern ist die vermutete Beziehung zwischen  $p_0$  und  $p_c$  also auf einer großen Zahl von Gittern, wenn auch nur numerisch, verifiziert worden. Im Folgenden soll der Versuch gemacht werden, die Ursache dieses Sachverhalts zu verstehen.

An der Perkolationsschwelle divergiert die Korrelationslänge und es gibt, abgesehen von der Gitterkonstanten, keine charakteristische Längenskala. Die Skalenannahme sagt voraus, dass die Clusterkonfiguration auf jeder Skala, die groß gegen den Gitterabstand ist, qualitativ gleich aussieht. Stauffer [30] hat für die Zahl der Cluster pro Vertex  $n_s$  der Größe  $s$  in der Nähe von  $p_c$  ( $\Delta p = p - p_c$ )

$$n_s = q_0 s^{-\tau} f(\Delta p q_1 s^\sigma) \quad (4.12)$$

als Skalenrelation vorgeschlagen. Die Parameter  $q_0, q_1$  und  $p_c$  hängen vom betrachteten Gitter ab; die übrigen Größen und die Funktion  $f(z)$  sind universell.

Seien nun  $q_0, q_1$  und  $p_c$  die nicht-universellen Parameter des betrachteten Gitters und  $q_0^*, q_1^*$  und  $1 - p_c$  die des matching Gitters. Die Summen

$$\sum_{s=s_0}^{\infty} n_s(p) \quad \text{und} \quad \sum_{s=s_0}^{\infty} n_s^*(q) \quad (4.13)$$

sind die Zahlen der Cluster bzw. Löcher, die größer als ein gewisses  $s_0$  sind. Ihre Differenz ist die Euler-Charakteristik pro Vertex, zu der nur Cluster der Größe  $s \geq s_0$  beitragen. Mit der Skalenannahme ergibt sich

$$\chi_{s_0}(p) := \sum_{s=s_0}^{\infty} n_s(p) - n_s^*(1-p) = \sum_{s=s_0}^{\infty} s^{-\tau} [q_0 f(\Delta p q_1 s^\sigma) - q_0^* f(-\Delta p q_1^* s^\sigma)]. \quad (4.14)$$

Die Wahrscheinlichkeiten, dass ein Vertex in einem Cluster oder einem Loch der Größe  $s \geq s_0$  ist, sind durch

$$\sum_{s=s_0}^{\infty} s n_s(p) + P_\infty(p) \quad \text{und} \quad \sum_{s=s_0}^{\infty} s n_s^*(q) + P_\infty^*(q) \quad (4.15)$$

gegeben. Für die Differenz beider Größen gilt mit der Skalenannahme

$$\begin{aligned} [p - q]_{s_0} &:= \sum_{s=s_0}^{\infty} s [n_s(p) - n_s^*(1-p)] + P_\infty(p) - P_\infty^*(q) \\ &= \sum_{s=s_0}^{\infty} s^{-\tau+1} [q_0 f(\Delta p q_1 s^\sigma) - q_0^* f(-\Delta p q_1^* s^\sigma)] + P_\infty(p) - P_\infty^*(q). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Gitter	$\frac{\chi(p_c)}{p_c - q_c} (s_0 = 1)$	$\frac{\chi(p_c)}{p_c - q_c} - \frac{5}{96}$
3, 12 <sup>2</sup>	0.0284	-0.0237
4, 6, 12	0.0381	-0.0140
4, 8 <sup>2</sup>	0.0478	-0.0043
Sechseckg.	0.0649	0.0128
Kagomé.	0.0387	-0.0134
3, 4, 6, 4	0.0534	0.0014
Quadratg.	0.0727	0.0207
3 <sup>3</sup> , 6	0.0361	-0.0160
3 <sup>2</sup> , 4, 3, 4	0.0538	0.0017
3 <sup>3</sup> , 4 <sup>2</sup>	0.0574	0.0054
Dreiecksg.	—	—

Tabelle 4.6: Euler-Charakteristik archimedischer Gitter bei  $p = p_c$ .

Bei  $p = p_c$  vereinfachen sich die Beziehungen zu

$$\chi_{s_0}(p_c) = (q_0 - q_0^*)f(0) \sum_{s=s_0}^{\infty} s^{-\tau} \quad (4.17)$$

und

$$[p_c - q_c]_{s_0} = (q_0 - q_0^*)f(0) \sum_{s=s_0}^{\infty} s^{-\tau+1}. \quad (4.18)$$

Die Summen lassen sich durch Integrale nähern und man erhält

$$\chi_{s_0}(p_c) = (q_0 - q_0^*)f(0) \frac{s_0^{-\tau+1}}{\tau - 1} \quad (4.19)$$

und

$$[p_c - q_c]_{s_0} = (q_0 - q_0^*)f(0) \frac{s_0^{-\tau+2}}{\tau - 2}. \quad (4.20)$$

Der Exponent  $\tau$  hat in zwei Dimensionen vermutlich den Wert  $\frac{187}{91}$ , ist also größer als 2. Daher haben  $\chi_{s_0}(p_c)$  und  $[p_c - q_c]_{s_0}$  das gleiche Vorzeichen und ihr Verhältnis ist

$$\boxed{\frac{\chi_{s_0}(p_c)}{[p_c - q_c]_{s_0}} = \frac{\tau - 2}{\tau - 1} s_0^{-1} = \frac{5}{96 s_0}}. \quad (4.21)$$

Wenn sich das Skalenverhalten bis zu kleinen Clustern qualitativ fortsetzt, ist  $\chi(p_c)$  positiv und das Verhältnis  $\frac{\chi(p_c)}{p_c - q_c}$  sollte ungefähr  $\frac{5}{96}$  betragen. Für archimedische Gitter gilt dies im Rahmen der Erwartungen (siehe Tabelle 4.6).

Für das Quadratgitter sind die Clusterzahlen sowohl für nächste, als auch für übernächste Nachbarschaften bis  $s = 12$  bekannt [25], und  $\chi_{s_0}(p_c)$  sowie  $[p_c - q_c]_{s_0}$  können durch Abziehen der bekannten Beiträge der Cluster  $s < s_0$  von  $\chi(p_c)$  und  $[p_c - q_c] = 2p_c - 1$  berechnet

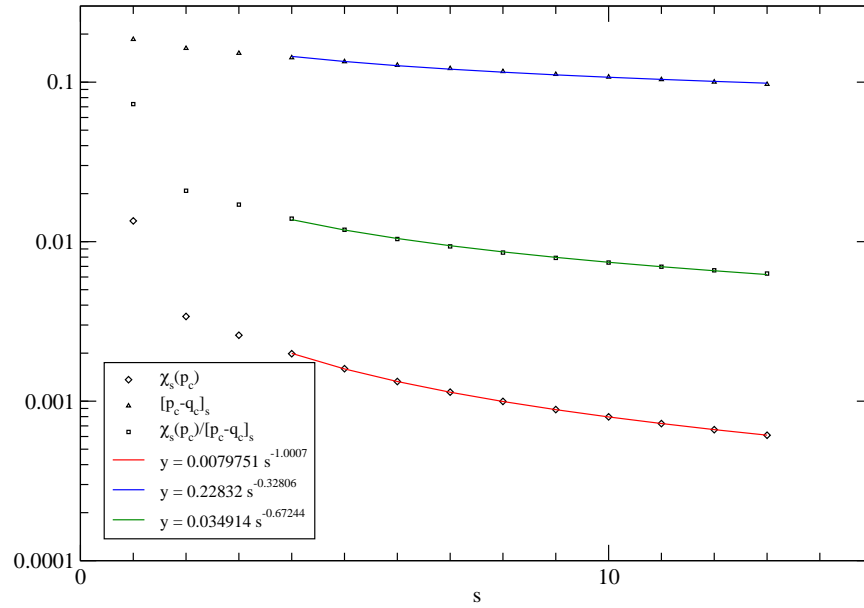


Abbildung 4.8: Euler-Charakteristik  $\chi_s(p_c)$  und  $[p_c - q_c]_s$  (siehe Text) auf dem Quadratgitter für  $s = 1, \dots, 13$ . Die Kurven sind Fitkurven an die Werte  $s \geq 3$ . Zur Vereinfachung der Darstellung hat der Plot eine logarithmische Ordinate.

werden. Schon für  $s_0 \geq 3$  lassen sich die so gewonnen Werte gut an ein Potenzgesetz fitten (siehe Abb. 4.8). Die Werte der Fitparameter stimmen aber nur mäßig mit den Erwartungen überein.

Da die Clusterzahlen für großer Cluster nicht exakt bekannt sind, müssen Resultate für größere  $s_0$  aus Monte-Carlo-Simulationen gewonnen werden. Hierzu wird mit dem im Appendix A vorgestellten Programm eine Perkulationskonfiguration erzeugt und die Clusterverteilung (siehe Abschnitt A.3) ausgewertet. Die Simulationen wurden für site-Perkolation auf dem Quadrat- und Sechseckgitter sowie für bond-Perkolation auf dem Sechseckgitter durchgeführt. Die Kantenlänge der simulierten Gitter betrug  $L = 2048$ . Die Ergebnisse sind in sehr guter Übereinstimmung mit dem erwarteten Skalenverhalten. Auch die numerischen Werte für die Exponenten und das Verhältnis  $\frac{\chi_{s_0}(p_c)}{[p_c - q_c]_{s_0}}$  stimmen sehr gut mit den Vorhersagen der Skalenannahme überein. Die gewonnen Daten und die ermittelten Fitparameter sind in Abb. 4.9 dargestellt.

Mit der Skalenannahme aus Gleichung (4.12) kann auch die Nullstelle von  $n_s(p) - n_s^*(1 - p)$  für große  $s$  durch die nicht-universellen Parameter der Gitter ausgedrückt werden.

$$n_s(p) - n_s^*(1 - p) = q_0 s^{-\tau} f((p - p_c)q_1 s^\sigma) - q_0^* s^{-\tau} f((p_c - p)q_1^* s^\sigma). \quad (4.22)$$

Für die Nullstelle von  $n_s(p) - n_s^*(1 - p)$  ergibt sich die Bedingung ( $\Delta p = p_0 - p_c$ )

$$q_0 s^{-\tau} f(\Delta p q_1 s^\sigma) = q_0^* s^{-\tau} f(-\Delta p q_1^* s^\sigma). \quad (4.23)$$

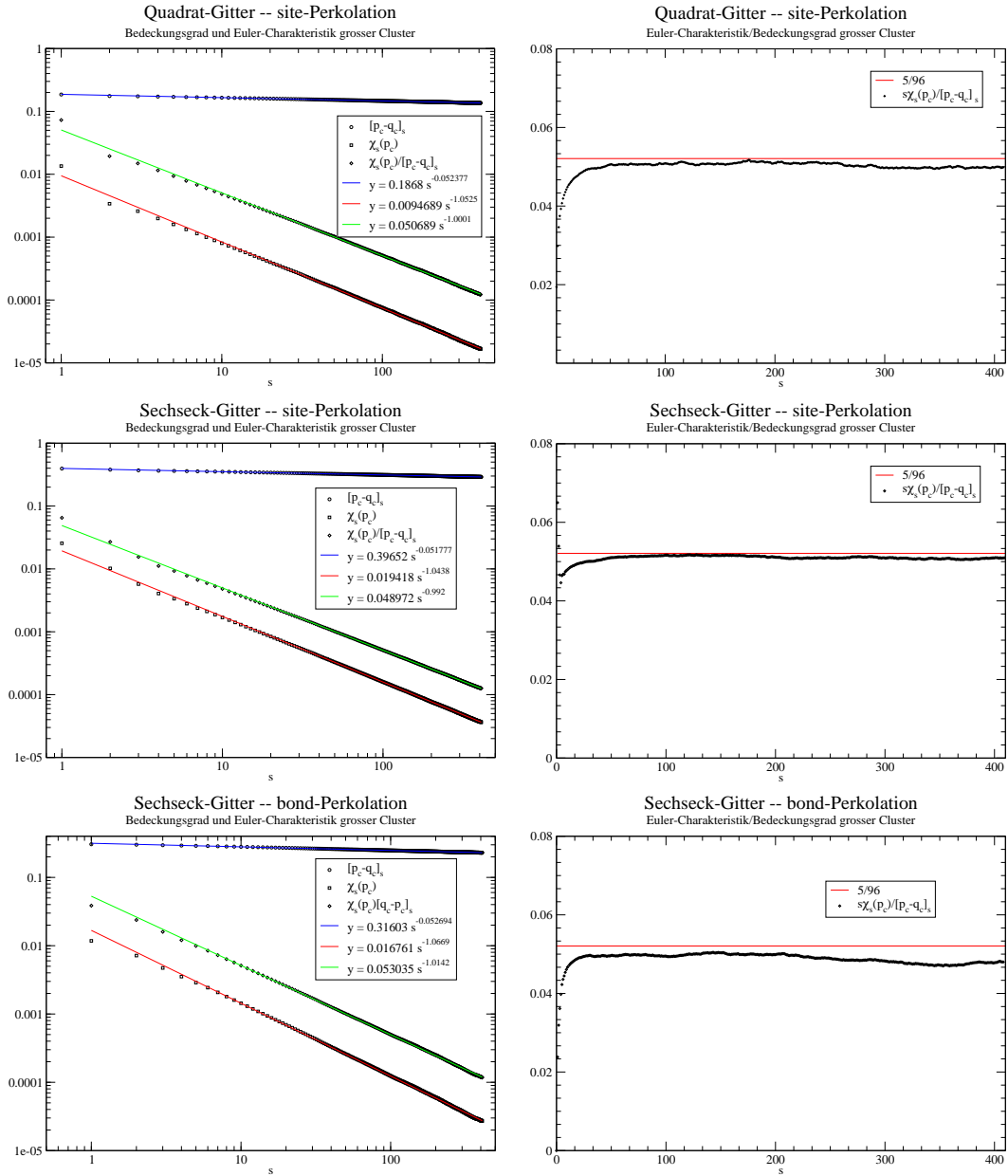


Abbildung 4.9: Simulationsergebnisse für die Clusterverteilung bei  $p_c$  der site-Perkolation auf dem Quadrat- und Sechseckgitter, sowie bond-Perkolation auf dem Sechseckgitter. Auf der linken Seite sind  $\chi_s$ ,  $\chi_s/[p_c - q_c]_s$  und  $[p_c - q_c]_s$  doppelt-logarithmisch aufgetragen. Rechts ist  $s\chi_s/[p_c - q_c]_s$  und das erwartete Skalenverhalten  $5/96$  dargestellt.

Angenommen  $f(z)$  lässt sich um  $z = 0$  entwickeln, erhält man

$$\begin{aligned} q_0(f(0) + f'(0)\Delta p q_1 s^\sigma + \frac{1}{2}f''(0)(\Delta p q_1 s^\sigma)^2 + \dots) \\ = q_0^*(f(0) - f'(0)\Delta p q_1^* s^\sigma + \frac{1}{2}f''(0)(\Delta p q_1^* s^\sigma)^2 + \dots). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Nach Potenzen in  $\Delta p s^\sigma$  geordnet ergibt sich

$$f(0)(q_0 - q_0^*) + f'(0)(q_0 q_1 + q_0^* q_1^*)\Delta p s^\sigma + \frac{1}{2}f''(0)(q_0 q_1^2 - q_0^* q_1^{*2})(\Delta p s^\sigma)^2 + \dots = 0. \quad (4.25)$$

$\Delta p s^\sigma$  muss für alle  $s$  Lösung des Polynoms mit konstanten Koeffizienten sein. Für die Lösung gilt  $\Delta p s^\sigma = \text{const.}$  oder  $\Delta p = \text{const.} * s^{-\sigma}$ . Falls  $\Delta p s^\sigma \ll 1$ , kann man Terme höherer Ordnung vernachlässigen. Eine konsistente Skalenfunktion  $f(x)$  hat ihr einziges Maximum bei negativem  $x$  [30], und daher ist  $f'(0) < 0$ .  $\Delta p$  hat dann das gleiche Vorzeichen wie  $q_0 - q_0^*$  und ist mit obigen Argumenten für  $p_c > 1/2$  positiv. Die bekannten Clusterzahlen für das Quadratgitter bestätigen das Skalenverhalten, und ein Fit an die Werte  $s = 6, \dots, 12$  liefert einen Exponenten  $\sigma = 0.38$ . Es wird vermutet, dass  $\sigma$  den Wert  $\frac{36}{91} \approx 0.396$  hat.

Mit der Skalenhypothese lässt sich die Beobachtung, dass für  $p_c > \frac{1}{2}$  die Nullstelle der Euler-Charakteristik über  $p_c$  liegt, begründen. Allerdings liefern kleine Cluster mit Abstand den größten Beitrag zur Euler-Charakteristik und gerade für diese ist die Skalenannahme nicht gültig. Wenn sich das Skalenverhalten qualitativ auf kleine Cluster fortsetzt, sollte aber  $p_c < p_0$  gelten, wenn  $p_c > \frac{1}{2}$  ist.

### 4.3 Euler-Charakteristiken in drei Dimensionen

Um den Zusammenhang zwischen  $p_0$  und  $p_c$  in drei Dimensionen weiter zu untersuchen, wurde die mittlere Euler-Charakteristik verschiedener dreidimensionaler Gitter berechnet, deren Perkolationsschwellen bekannt sind. Wie schon im Kapitel 2.5 diskutiert, müssen zur Berechnung der Euler-Charakteristik von Clustern auf dreidimensionalen Gittern, Zellen um die Vertices gefunden werden, die die Nachbarschaftsverhältnisse des Gitters widerspiegeln. Die Wahl solcher Zellen ist in der Regel nicht eindeutig. Bei Gittern, deren Wigner-Seitz-Zellen (WSZ) geeignet sind, um die Euler-Charakteristik zu berechnen, sind die WSZ als natürliche Zellen vorgegeben. Dennoch kann man auch durch Wahl anderer Zellen Zusammenhangsverhältnisse erzeugen, die denen des Gitters entsprechen. Die Zahl der Zellen, mit denen eine Zelle einen nichtleeren Durchschnitt hat, ist bei diesen Zellen aber i. A. eine andere als bei den WSZ, und man erhält unterschiedliche Euler-Charakteristiken.

Sind geeignete Zellen gefunden, werden sie wie immer mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  besetzt. Wir berechnen die mittlere Euler-Charakteristik dieser Figuren  $\bar{\chi}(1 - p)$ . In drei Dimensionen gilt für die Euler-Charakteristik des geeignet abgeschlossenen Komplements  $\chi(p) = \bar{\chi}(1 - p)$ . Wir werden uns auf Ergebnisse und wesentliche Aspekte beschränken und technische Details der Rechnungen und Konstruktionen in den Appendix verbannen.



### 4.3.1 Gitterstapel

Die einfachste Möglichkeit dreidimensionale Gitter zu erhalten, ist, Ebenen zweidimensionaler Gitter übereinander zu legen, und jeden Vertex mit den Vertices über und unter ihm zu verbinden. Solche Gitter heißen Gitterstapel.

Prismen mit den dualen Plaketten der zweidimensionalen Gitter als Grundfläche sind geeignete Zellen, um die Euler-Charakteristik auszurechnen. Die Höhe der Prismen ist der Gitterebenenabstand, und die Gittervertices sollen im Schwerpunkt der Prismen liegen. Diese Prismen haben nur mit den Prismen der nächsten Nachbarn im zweidimensionalen Gitter und mit denen der senkrecht über und unter ihnen liegenden Gittervertices eine Fläche gemein. Sie sind daher geeignet  $\chi(p)$  zu berechnen.

Durch die Gitterebenen ist eine Schichtstruktur vorgegeben und die Euler-Charakteristik wird zweckmäßigerweise mit der Schnittrekursion ausgerechnet. Die Schnittebenen stehen senkrecht auf Symmetrieachse der Prismen. Das Schnittmuster besteht aus besetzten und unbesetzten dualen Plaketten des zweidimensionalen Gitters. Die mittlere Euler-Charakteristik dieser Muster ist die des vollständig dekorierten zweidimensionalen Gitters  $\bar{\chi}_2(q)$ . Die Schnittmuster ändern sich nur, wenn die Schnittebene von einer Prismenschicht in die nächste wandert. Dort, wo sich zwei Prismenschichten berühren, sind die Plaketten des Schnittmusters mit Wahrscheinlichkeit  $1 - (1 - q)^2$  besetzt. Jeder andere Schnitt entspricht dem zweidimensionalen Gitter mit Besetzungswahrscheinlichkeit  $q$ . Die Differenz der Euler-Charakteristiken beider Schnitte ist  $\bar{\chi}(q)$ :

$$\bar{\chi}(q) = \bar{\chi}_2(1 - (1 - q)^2) - \bar{\chi}_2(q). \quad (4.26)$$

In zwei Dimensionen gilt  $\chi_2(p) = -\bar{\chi}_2(1 - p)$  und daher

$$\bar{\chi}(q) = -\chi_2((1 - q)^2) + \chi_2(1 - q) \quad (4.27)$$

Weiterhin gilt in drei Dimensionen  $\chi(p) = \bar{\chi}(1 - p)$  und für die Euler-Charakteristik des Gitterstapels gilt

$$\chi(p) = -\chi_2(p^2) + \chi_2(p). \quad (4.28)$$

Die Nullstellen der Euler-Charakteristiken der Gitterstapel aller archimedischer Gitter und Laves-Gitter, sowie des Bowtie- und des dualen Bowtie-Gitters sind zusammen mit den bekannten site-Perkolationsschwellen in Tabelle 4.7 angegeben. Die Nullstellen  $p_0$  sind bei allen Gittern größer als  $p_c$ . Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.14 grafisch dargestellt.

### 4.3.2 Einfach-kubisches Gitter

Das einfach-kubische Gitter (sc-Gitter) ist als Gitterstapel des Quadratgitters schon behandelt worden, und seine Euler-Charakteristik als Beispiel in Kapitel 2.5 berechnet worden. Hier soll die Euler-Charakteristik für den Fall, dass Vertices des Gitters verbunden sind, wenn ihre dualen Würfel (WSZ) an Flächen oder an Kanten zusammenhängen, berechnet werden. Details der Rechnung befinden sich im Anhang B.1. Ein Gittervertex hat 18

Nr.	$p_0$	$p_c[18]$	$p_0^{dual}$	$p_c^{dual}[18]$
1	0.50934	–	0.32878	–
2	0.47709	–	0.32878	–
3	0.47504	0.3840(4)	0.32878	0.2524(4)
4	0.46434	0.3701(4)	0.32878	0.2623(4)
5	0.42098	0.3346(4)	0.39401	0.2998(4)
6	0.40698	–	0.39401	–
7	0.39401	0.3114(4)	0.39401	0.3114(4)
8	0.37384	–	0.43546	–
9	0.36184	–	0.43546	–
10	0.36184	0.2872(4)	0.43546	0.3394(4)
11	0.32878	0.2623(4)	0.46435	0.3701(4)
bowtie	0.36184	0.2822(4)	0.44098	0.3480(4)

Tabelle 4.7: Euler-Charakteristik und site-Perkolation auf Gitterstapeln: Die erste Spalte enthält die Nummer (1-11) des zweidimensionalen archimedischen Gitters oder “bowtie” für das Bowtie-Gitter. In der zweiten und dritten Spalte sind die Nullstellen  $p_0$  der Euler-Charakteristik und, falls bekannt, die Perkolationsschwellen  $p_c$  der Gitterstapel der zweidimensionalen Gitter angegeben. In der vierten und fünften Spalte sind  $p_0$  und  $p_c$  der Stapel der dualen Gitter angegeben.

Nachbarn. Ein Würfel um einen Vertex hat mit den Würfeln von 26 anderen Vertices einen nichtleeren Durchschnitt. Die Euler-Charakteristik ist

$$\chi_{18-26}^{sc}(p) = p(1-p)(p^6 + p^5 + p^4 + p^3 + 4p^2 - 8p + 1). \quad (4.29)$$

### 4.3.3 fcc-Gitter

Das fcc-Gitter (face centered cubic) ist ein einfach-kubisches Gitter (sc-Gitter), bei dem in die Flächen der Würfel zusätzliche Vertices gesetzt werden (siehe Abb. 4.10). Alternativ kann man das Gitter auch als vier jeweils um die halbe Länge der drei Flächendiagonalen gegeneinander verschobene sc-Gitter auffassen. Dann liegt ein Vertex mittig in je einer Fläche der anderen drei sc-Gitter und hat damit zwölf je eine halbe Flächendiagonale entfernte Nachbarn. Die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des fcc-Gitters ist ein rhombisches Dodekaeder. WSZ entstehen durch den Schnitt von Ebenen mittig und senkrecht auf den Gitterverbindungen. Jede Fläche der WSZ entspricht einer Gitterkante, und die WSZ sind zur Berechnung der Euler-Charakteristik geeignet. Die Anzahlen der Zellen verschiedener Dimensionen lassen sich leicht bestimmen (siehe Appendix B.4), und man erhält für die Euler-Charakteristik

$$\chi_{12-18}^{fcc-WSZ}(p) = p(1-p)(1 - 5p + 3p^2 + p^3 + p^4). \quad (4.30)$$

Neben den zwölf Zellen, die die WSZ an Flächen berührt, gibt es sechs weitere WSZ, die sie nur an einer Ecke berührt. Somit gibt es insgesamt 18 Zellen, mit denen eine WSZ einen

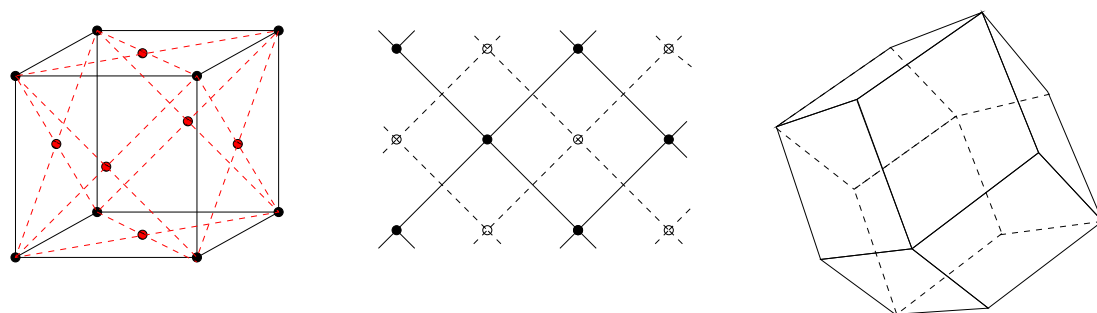


Abbildung 4.10: Links ein Würfel mit Vertices in allen Flächen. In der Mitte sind die beiden durch Projektion entlang einer Würfelkante entstehenden Quadratgitter dargestellt. Rechts ist eine Skizze der WSZ des fcc-Gitters, ein rhombisches Dodekaeder, zu sehen.

nichtleeren Durchschnitt hat.

Alternativ zu den WSZ können auch Prismen quadratischer Grundfläche als Zellen benutzt werden. Das fcc-Gitter ist nämlich ein Stapel gegeneinander verschobener Quadratgitter (siehe Abb. 4.10). Prismen mit quadratischer Grundfläche sind Zellen, die die Zusammenhangsverhältnisse des Gitters widerspiegeln, denn sie haben mit den Zellen innerhalb der Ebene je eine Fläche gemein, und obere und untere Flächen überlappen mit den Fuß- bzw. Kopfflächen von vier Prismen aus den darunter bzw. darüber liegenden Ebenen. An den senkrechten Kanten stoßen die Prismen innerhalb einer Ebene mit den übernächsten Nachbarn auf dem Quadratgitter zusammen. Eine Zelle kann also mit 16 Nachbarzellen einen nichtleeren Durchschnitt haben, statt 18 bei der WSZ. Die Euler-Charakteristik, die man mit den Prismen erhält (siehe Appendix B.4), ist

$$\chi_{12-16}^{fcc-Qu}(p) = p(1-p)(1-5p+3p^2+2p^3). \quad (4.31)$$

Zum Vergleich der beiden Euler-Charakteristiken sind sie links in Abbildung 4.11 aufgetragen. Bis zur ersten Nullstelle, die in beiden Fällen zwölf Nachbarn entspricht, unterscheiden sie sich kaum. Für  $p > 0.3$  ist der Unterschied deutlich erkennbar.

#### 4.3.4 bcc-Gitter

Das bcc-Gitter (body centered cubic) entsteht, wenn in die Mitte jedes Würfels des sc-Gitter ein weiterer Vertex gesetzt wird (siehe Abb. 4.12). Man erhält das bcc-Gitter auch durch zwei überlagerte, um eine halbe Raumdiagonale gegeneinander verschobene, sc-Gitter. Die nächsten Nachbarn eines Vertex des bcc-Gitter sind die acht Vertices auf den Ecken des umgebenden Würfels. Die WSZ des bcc-Gitters hat 14 Flächen, davon acht Sechsecke, die den Gitterkanten entsprechen, und sechs Quadrate, die den Kanten der sc-Untergitter entsprechen. Fügt man die Kanten der sc-Gitter zum bcc-Gitter hinzu, erhält man ein Gitter mit 14 Nachbarn. An jeder Kante der WSZ stoßen nur drei und an jeder Ecke nur vier Zellen zusammen. D.h. es stoßen keine Zellen zusammen, die nicht ohnehin eine gemeinsame Fläche haben, und das Komplement hat die gleichen Zusammenhangsverhältnisse. Das bcc-Gitter mit 14 Nachbarn ist in dieser Hinsicht das dreidimensionale

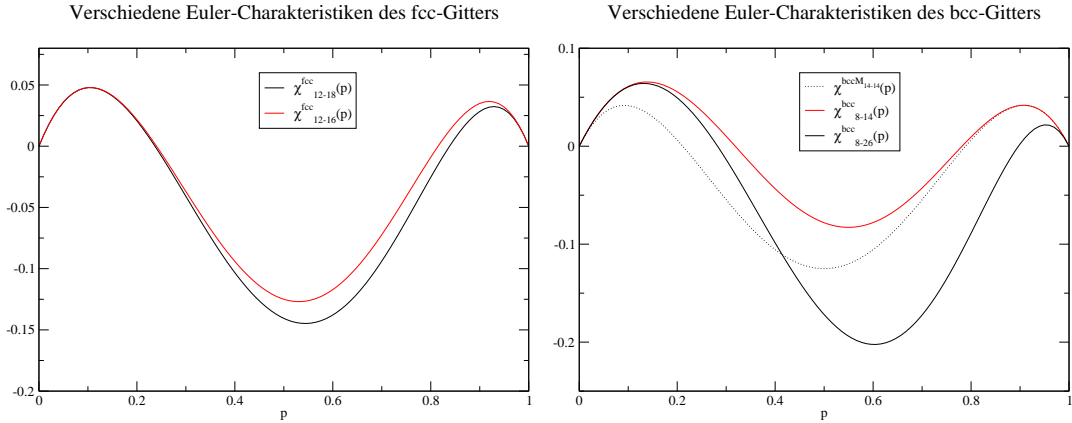


Abbildung 4.11: Verschiedene Euler-Charakteristiken des fcc- (links) und bcc-Gitters (rechts).

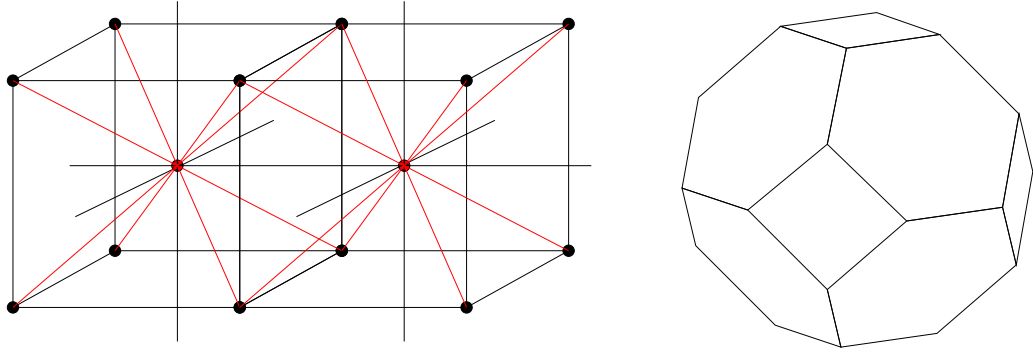


Abbildung 4.12: Bcc-Gitter: Links ist ein Ausschnitt des bcc-Gitter zu sehen. Die Gitterkanten sind mit roten Linien eingezeichnet; Kanten der sc-Untergitter sind schwarz gezeichnet. Rechts ist die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des bcc-Gitter gezeigt.

Analogon des zweidimensionalen Dreiecksgitters. Das 14er bcc-Gitter wurde in [16] behandelt; die Euler-Charakteristik ist

$$\chi_{14-14}^{bcc}(p) = p(1-p)(1-6p+6p^2). \quad (4.32)$$

Um eine Euler-Charakteristik zu erhalten, die die Zusammenhängeverhältnisse des bcc-Gitter mit acht Nachbarn widerspiegelt, kann man entweder eine komplizierte Zelle (siehe Abbildung B.1 und Kapitel B.2) wählen, oder zwei WSZ nur dann als benachbart betrachten, wenn sie sich an einem Sechseck berühren. Zwei WSZ, die sich an einem Quadrat berühren, gelten dann nur als benachbart, wenn sie einen gemeinsamen besetzten Gitternachbarn haben (siehe Kapitel 3.3.2). Die Euler-Charakteristiken, die man mit den unterschiedlichen Methoden erhält, unterscheiden sich im Wesentlichen in der Zahl der Zellen, mit denen ein abgeschlossene Zelle einen nichtleeren Durchschnitt hat. Während eine nichtkonvexe Zelle mit 26 anderen Zellen einen nichtleeren Durchschnitt hat, sind es

bei der WSZ nur 14.

$$\chi_{8-26}^{bcc}(p) = p(1-p)(1-3p-3p^2+3p^3+3p^4) \quad (4.33)$$

$$\chi_{8-14}^{bcc}(p) = p(1-p)(1-3p-3p^2+9p^3-3p^4). \quad (4.34)$$

Um die drei unterschiedlichen Euler-Charakteristiken zu vergleichen, sind im rechten Teil der Abb. 4.11 aufgetragen. Wenn die Nachbarschaftszahlen  $z$  bzw.  $\bar{z}$  zweier Euler-Charakteristiken übereinstimmen, unterscheiden sie für kleine bzw. große  $p$  kaum. So fällt  $\chi_{8-26}^{bcc}(p)$  mit  $\chi_{8-14}^{bcc}(p)$  für  $p < 0.3$  fast zusammen, während sie für große  $p$  stark unterschiedlich sind. Für  $p > 0.7$  sind dagegen  $\chi_{8-14}^{bcc}(p)$  und  $\chi_{14-14}^{bcc}(p)$  sehr ähnlich. Im Bereich  $p \approx \frac{1}{2}$  unterscheiden sich alle sehr stark, da die Bedingungen, unter denen ein “Tunnel” entstehen kann, unterschiedlich sind.

### 4.3.5 Diamantgitter

Das Diamantgitter ist ein fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis, also kein Bravaisgitter. Wenn ein Vertex auf einem fcc-Vertex liegt, liegt der andere bei  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  auf der Würfeldiagonale des sc-Teilgitters. Ein Vertex hat vier nächste Nachbarn, die auf den Ecken eines Tetraeders um den Vertex liegen.

#### Nichtkonvexe Zelle mit 4er-Nachbarschaft

Um der Topologie des Diamantgitters mit seinen vier nächsten Nachbarn Rechnung zu tragen, ist eine Zelle nötig, die nur die Zellen der vier nächsten Nachbarn an einer Fläche berührt. Wie diese Zellen aussehen, und wie die Euler-Charakteristik berechnet wird, ist im Anhang B.3.2 beschreiben. Man erhält für die Euler-Charakteristik

$$\chi_{4-47}^{Diamant}(p) = p(1-p) \left( \frac{p^{12} + p^{11} + p^{10} + p^9 + p^8 + p^7 + p^6 + p^5}{2} - p^4 - p^3 - p^2 - p + 1 \right). \quad (4.35)$$

Diese Zellen berühren insgesamt 47 Zellen an Ecken, Kanten oder Flächen.

#### Konvexe Zellen mit 4er-Nachbarschaft

Nun betrachten wir eine WSZ des fcc-Gitters und halbieren sie senkrecht zur Basisachse (siehe Abb. B.4). Die gemeinsame Schnittfläche und die drei Rhomben auf der gegenüberliegenden Seite gehören zu einer Gitterkante des Diamantgitters. Alle anderen Seiten entsprechen keinen Gitternachbarschaften, und zwei Zellen sollen über diese Seiten nur zusammenhängen, wenn sie einen gemeinsamen nächsten Nachbarn haben. Analog zur Prozedur aus Kapitel 3.3.2 kann so eine Euler-Charakteristik des Diamantgitters berechnet werden. Die im Anhang B.3.1 beschriebene Rechnung liefert:

$$\chi_{4-19}^{Diamant}(p) = p(1-p)(p^8 + p^7 + p^6 + p^5 - 4p^4 + 2p^3 - p^2 - p + 1). \quad (4.36)$$

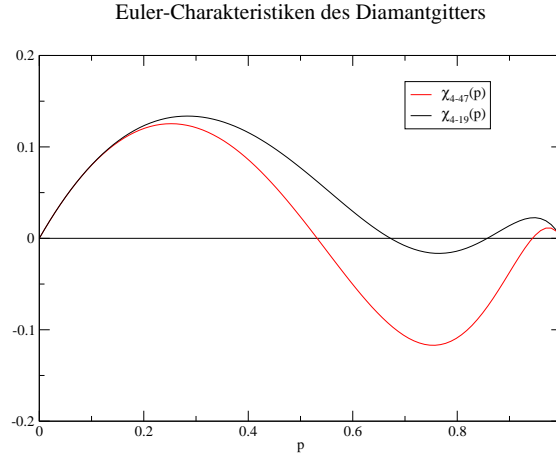


Abbildung 4.13: Verschiedene Euler-Charakteristiken des Diamantgitters.

Eine halbierte WSZ kann mit 19 anderen Zellen einen nichtleeren Durchschnitt haben.

In Abbildung 4.13 sind die beiden Euler-Charakteristiken des Diamantgitters aufgetragen. Beide Euler-Charakteristiken sind für kleine  $p$  ähnlich. Dadurch, dass die Zellen zur Berechnung von  $\chi_{4-47}^{Diamant}(q)$  sehr viele andere Zellen an Ecken oder Kanten berühren, entstehen Tunnel sehr viel einfacher als bei Verwendung der konvexen Zellen, und  $\chi_{4-47}^{Diamant}(p)$  ist für  $p \approx 0.5$  kleiner als  $\chi_{4-19}^{Diamant}(p)$ .

#### 4.4 Euler-Charakteristik und Perkolation in drei Dimensionen

Jeder Euler-Charakteristik der dreidimensionalen Gitter haben wir ein Paar von Zahlen  $(z, \bar{z})$  zugeordnet. Die erste Zahl  $z$  ist die Koordinationszahl des Gitters. Die zweite Zahl  $\bar{z}$  ist die Zahl der Zellen, mit denen eine abgeschlossene Zelle einen nichtleeren Durchschnitt haben kann. Wenn man auf dem Gitter alle Vertices verbindet, deren Zellen einen nichtleeren Durchschnitt haben, erhält man ein Gitter mit der Topologie der unbesetzten Bereiche. Dieses Gitter hat die Koordinationszahl  $\bar{z}$ . Die Gitter mit Zusammenhangsverhältnissen der unbesetzten Bereiche entsprechen den matching-Gittern in zwei Dimensionen. Da die Wahl der Zellen aber nicht eindeutig ist, sind auch die “matching”-Gitter in drei Dimensionen nicht eindeutig.

Jede der berechneten Euler-Charakteristiken dreidimensionaler Gitter hat zwei Nullstellen zwischen null und eins. Die kleinere von beiden markiert den Übergang von isolierten Clustern zu vernetzten Strukturen, in denen Tunnel überwiegen. Sie wird der Perkolationsschwelle des Gitter mit  $z$  Nachbarn zugeordnet. Die zweite Nullstelle markiert den Übergang vernetzter Strukturen zu isolierten Einschlüssen und wird daher der Perkolationsschwelle der unbesetzten Bereiche zugeordnet. Wenn explizit die Euler-Charakteristik  $\bar{\chi}(q)$  der unbesetzten Vertices, d.h. des “matching”-Gitters, betrachtet wird, sind die Rol-

Name	$z$	$\bar{z}$	$p_0$	$p_c$
Diamant (nicht konvex)	4	47	0.5318	0.4286(4)
Diamant (konvex)	4	19	0.6722	0.4286(4)
sc (WSZ)	6	26	0.3940	0.3114(4)
bcc (nicht konvex)	8	26	0.2825	0.2458(4)
bcc (konvex)	8	14	0.3185	0.2458(4)
fcc (WSZ)	12	18	0.2370	0.1994(2)
fcc (Prisma)	12	16	0.2401	0.1994(2)
bcc (WSZ)	14	14	0.2113	0.175
sc (WSZ)	18	26	0.1344	0.137
bcc (WSZ)	14	8	0.2185	0.175
fcc (Prisma)	16	12	0.1851	–
fcc (WSZ)	18	12	0.1616	0.136
Diamant (konvex)	19	4	0.1425	–
sc (WSZ)	26	6	0.1139	0.097
bcc (nicht konvex)	26	8	0.1033	0.095
Diamant (nicht konvex)	47	4	0.0561	–

Tabelle 4.8: Dreidimensionale Gitter: Nullstellen  $p_0$  der verschiedenen Euler-Charakteristiken im Vergleich zu den Perkolationsschwellen  $p_c$ . Die zur Berechnung der Euler-Charakteristik verwendeten Zellen und die resultierenden Koordinationszahlen besetzter und unbesetzter Zellen sind jeweils angegeben. Einträge unterhalb des Doppelstrichs gehören zu “matching”-Gittern. Vierstellige Perkolationsschwellen mit Fehlergrenzen stammen aus [18], die übrigen aus [6]. Letztere sind vermutlich sehr ungenau.

len von  $z$  und  $\bar{z}$  vertauscht und  $\bar{\chi}_{\bar{z},z}(q) = \chi_{z,\bar{z}}(p)$ .

Auch in drei Dimensionen bestätigt sich die Vermutung, dass die Nullstelle der Euler-Charakteristik in der Regel eine obere Schranke an die Perkolationsschwelle ist. Das gilt sowohl für die Perkolation auf den untersuchten Gittern, als auch für die Perkolation auf den “matching”-Gittern, sofern deren Perkolationsschwellen bekannt sind. Nur die Euler-Charakteristik des sc-Gitters mit 18 Nachbarn fällt aus der Reihe, was wohl daran liegt, dass sowohl das Gitter selbst, als auch das “matching”-Gitter sehr hohe Koordinationszahlen haben. In Abbildung 4.14 sind die Perkolationsschwellen  $p_c$  und die Nullstellen  $p_0$  der Euler-Charakteristik für alle behandelten Gitter aufgetragen. Die numerischen Werte der Nullstellen und Perkolationsschwellen sind in den Tabellen 4.7 und 4.8 zusammengefasst. Trägt man die Nullstellen der Euler-Charakteristiken gegen  $z$  auf (Plot in Abb. 4.15), beobachtet man in etwa  $p_0 \sim \frac{1}{z}$ .

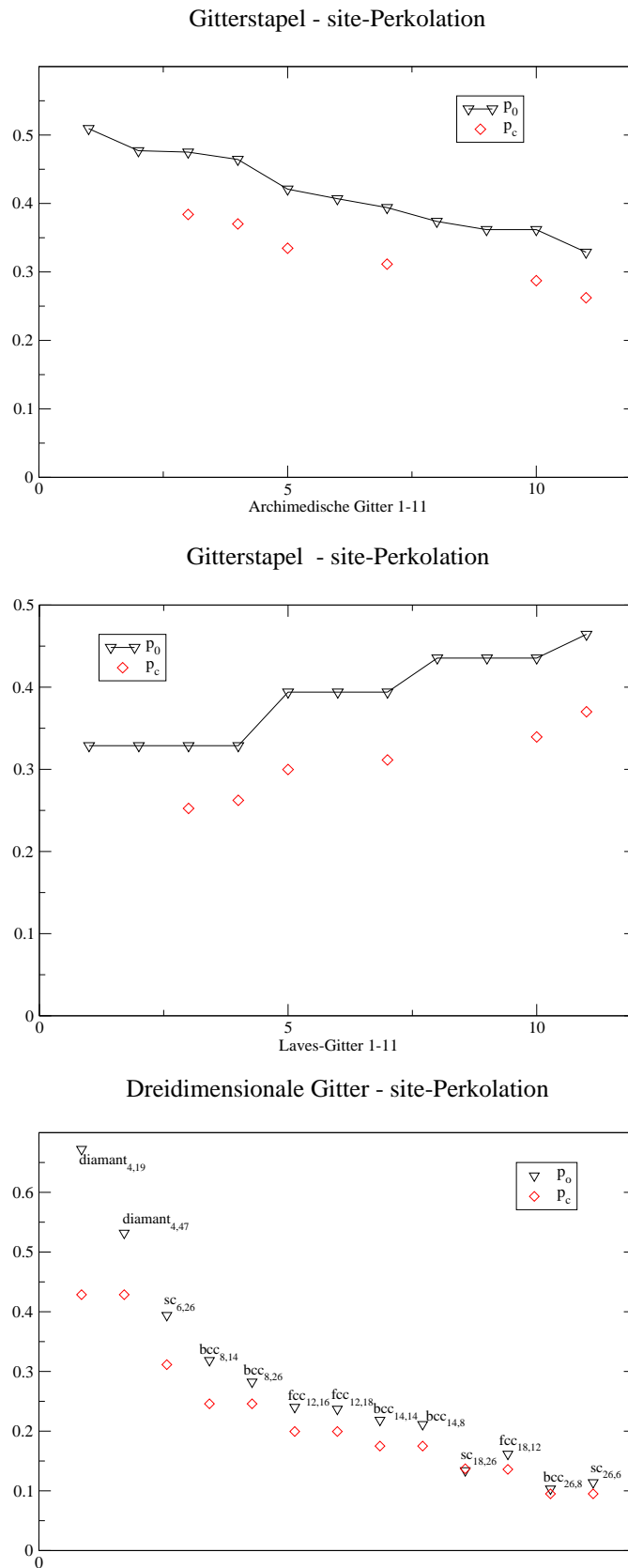


Abbildung 4.14: Ergebnisse in drei Dimensionen: Die oberen beiden Grafiken zeigen die Nullstellen  $p_0$  der Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen  $p_c$  für die Gitterstapel der archimedischen Gitter (oben) und der Laves-Gitter (Mitte). Der unterste Plot enthält  $p_0$  und  $p_c$  der übrigen untersuchten Gitter.



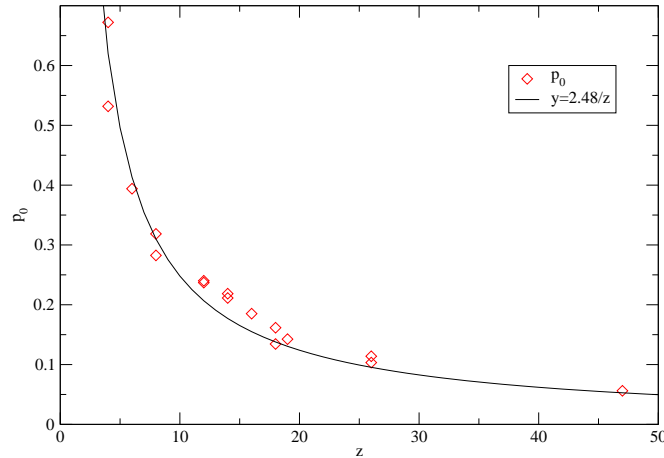


Abbildung 4.15: Variation der Nullstelle  $p_0$  der Euler-Charakteristik mit der Zahl der Nachbarn  $z$  eines Vertex. Es gilt in etwa  $p_0 \sim 1/z$ . Siehe auch Tabelle 4.8.

## 4.5 Bond-site-Perkolation

In Kapitel 3 wurde eine Methode vorgestellt, mit der die mittlere Euler-Charakteristik von Konfigurationen, wie sie bei bond-site-Perkolation entstehen, berechnet werden kann. Hier wird die Nullstelle der so berechneten Euler-Charakteristiken mit den bond-site-Perkolationsschwellen der Gitter verglichen.

Der kritische Ort eines gemischten bond-site-Perkulationsproblem mit Besetzungswahrscheinlichkeiten  $p_s$  und  $p_b$  für Vertices und Kanten ist eine Kurve  $[p_s^*(t), p_b^*(t)]_c$  in der  $(p_s, p_b)$ -Ebene mit einem geeigneten Parameter  $t$ . Die Kurve lässt sich in der Regel sowohl durch  $p_b^*$  als auch durch  $p_s^*$  parametrisieren. In Ref. [41] wird folgende empirische Beziehung für die bond-site-Perkolationsschwellen  $[p_s^*(t), p_b^*(t)]$  vorgestellt:

$$\frac{\ln p_s^*}{\ln p_b^*} + \frac{\ln p_c^{site}}{\ln p_c^{bond}} = 1. \quad (4.37)$$

Die Parameter  $p_c^{site}$  und  $p_c^{bond}$  sind die Perkolationsschwellen der reinen site- bzw. bond-Perkolation. Die durch Gl. 4.37 gegebene Kurve stimmt bis auf wenige Promille mit den Simulationsergebnissen für bond-site-Perkolation überein. Die Gültigkeit von Gl. 4.37 wurde in Ref. [33] weiter untersucht, und es wurde sehr gute Übereinstimmung für zweidimensionale Gitter und Abweichungen von maximal einem Prozent für höher dimensionale Gitter festgestellt. Die Gl. 4.37 lässt sich nach  $p_b^*$  oder  $p_s^*$  auflösen und man erhält für die kritische site-Besetzungswahrscheinlichkeit  $p_s^*$  bei gegebenem  $p_b^* \in [p_c^{bond}, 1]$

$$p_s^*(p_b^*) = p_c^{site} [p_b^*]^{-\frac{\ln p_c^{site}}{\ln p_c^{bond}}}. \quad (4.38)$$

Die Genauigkeit dieser empirischen Formel reicht für den Vergleich mit der Nullstelle der Euler-Charakteristik aus, und statt Simulationsdaten wird für  $[p_s^*, p_b^*]$  die Gleichung 4.38

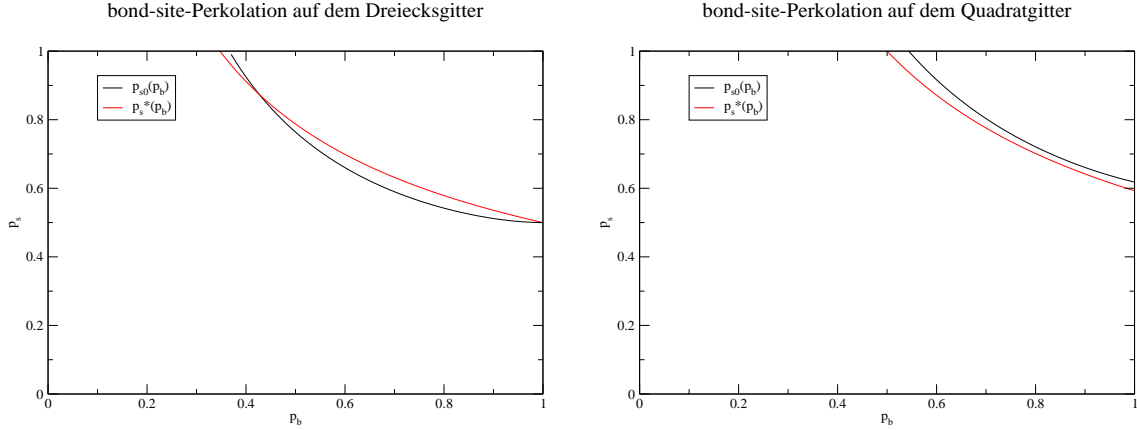


Abbildung 4.16:  $p_s^*(p_b)$  und  $p_{s0}(p_b)$  ist links für das Dreiecks- und rechts für das Quadratgitter aufgetragen. Für  $p_s^*(p_b)$  ist die in [41] vorgeschlagene Formel benutzt worden.

benutzt.

Die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex  $\chi(p_s, p_b)$  ist ein Polynom in  $p_s$  und  $p_b$ .  $\chi(p_s, p_b)$  hat einige allgemeine Eigenschaften: Ist  $p_b = 0$ , so besteht die Anordnung aus isolierten, abgeschlossenen Zellen und  $\chi(p_s, 0) = p_s$ . Für  $p_s = 0$  sind überhaupt keine Zellen vorhanden und  $\chi(0, p_b) = 0$ . Der Fall  $p_b = 1$  entspricht der üblichen site-Perkolation und  $\chi(p_s, 1) = \chi^{site}(p_s)$ . Der letzte Extremfall mit  $p_s = 1$  entspricht einer speziellen Geometrie der bond-Perkolation, bei der, ausgehend von isolierten Zellen, nach und nach Verbindungen durch Verschmelzen von  $(d - 1)$ -Nachbarschaften hinzugefügt werden.  $\chi(1, p_b)$  unterscheidet sich von der Euler-Charakteristik, die durch Übergang zum Überdeckungsgitter erhalten wurde.

In zwei Dimensionen wurde  $\chi(p_s, p_b)$  für das Quadrat- (siehe Kap. 3.3.1) und das Dreiecksgitter (siehe Anhang B.5) ausgerechnet. Die Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem Dreiecksgitter ist

$$\chi^{tr}(p_s, p_b) = p_s - 3p_b p_s^2 + 2p_b^3 p_s^3. \quad (4.39)$$

Für das Quadratgitter erhält man

$$\chi^{sq}(p_s, p_b) = p_s - 2p_b p_s^2 + p_b^4 p_s^4. \quad (4.40)$$

Aus der Gleichung  $\chi(p_s, p_b) = 0$  erhält man eine Kurve  $p_{s0}(p_b)$  und kann diese mit  $p_s^*(p_b)$  vergleichen. In beiden Fällen hat  $p_{s0}(p_b)$  in etwa die gleiche Form wie die kritische Kurve, und beide Kurven liegen dicht zusammen (siehe Abb. 4.17). Beim Quadratgitter liegt die Nullstelle immer jenseits der Perkolationsschwelle, im Fall des Dreiecksgitters schneiden sich beide Kurven.

In drei Dimensionen wurde  $\chi(p_s, p_b)$  für das fcc-Gitter (siehe Anhang B.5) und das sc-Gitter (siehe Kap. 3.3.1) ausgerechnet.

$$\chi^{fcc}(p_s, p_b) = p_s - 6p_s^2 p_b + 8p_s^3 p_b^3 - 2p_s^4 p_b^6 - p_s^6 p_b^{12}. \quad (4.41)$$

$$\chi^{sc}(p_s, p_b) = p_s - 3p_s^2 p_b + 3p_s^4 p_b^4 - p_s^8 p_b^{12}. \quad (4.42)$$

Beim fcc- und sc-Gitter liegt  $p_{s_0}(p_b)$  immer jenseits von  $p_s^*(p_b^*)$ , und beide Kurven haben fast identische Form (siehe Abb. 4.17).

Auch bei bond-site-Perkolation bestätigt sich die Beobachtung, dass die Nullstelle der Euler-Charakteristik in der Nähe der Perkolationsschwelle liegt. Beim zweidimensionalen Quadratgitter und bei den dreidimensionalen Gittern liegt die Nullstelle jenseits der Perkolationsschwelle, analog zu  $p_c < p_0$  bei der reinen site-Perkolation. Neben den in Abschnitt 4.1.3 für bond-Perkolation auf archimedischen Gittern berechneten Euler-Charakteristiken, kann aus  $\chi(p_s = 1, p_b)$  eine weitere Euler-Charakteristik für bond-Perkolation erhalten werden. Die Nullstellen dieser Euler-Charakteristik liegt in allen Fällen, anders als bei den Euler-Charakteristiken der Überdeckungsgittern, über der Perkolationsschwelle.

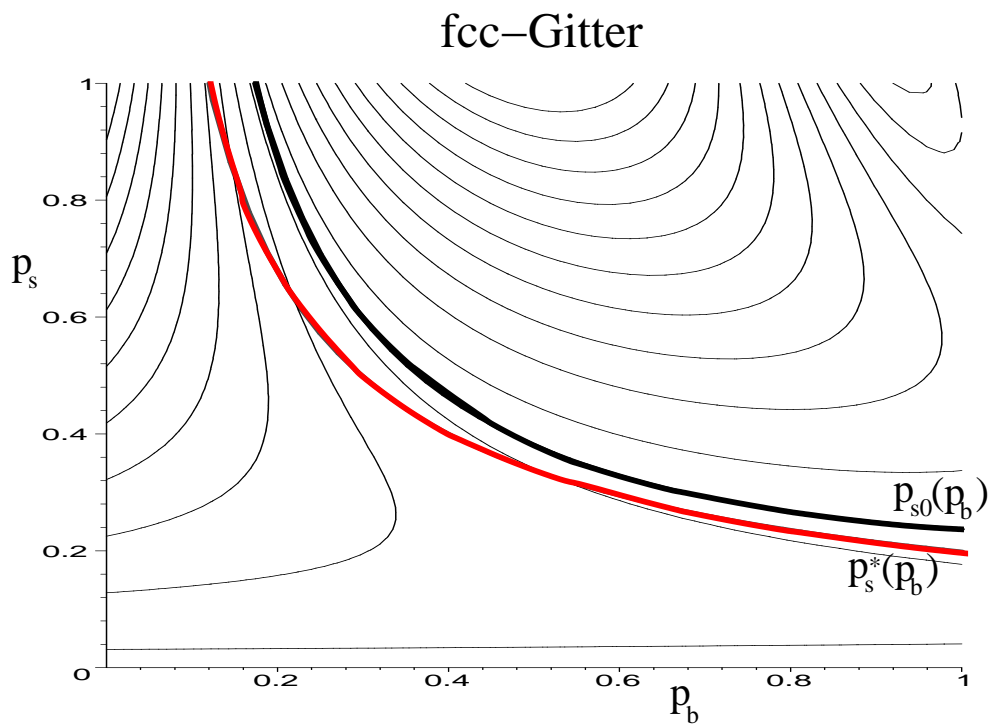
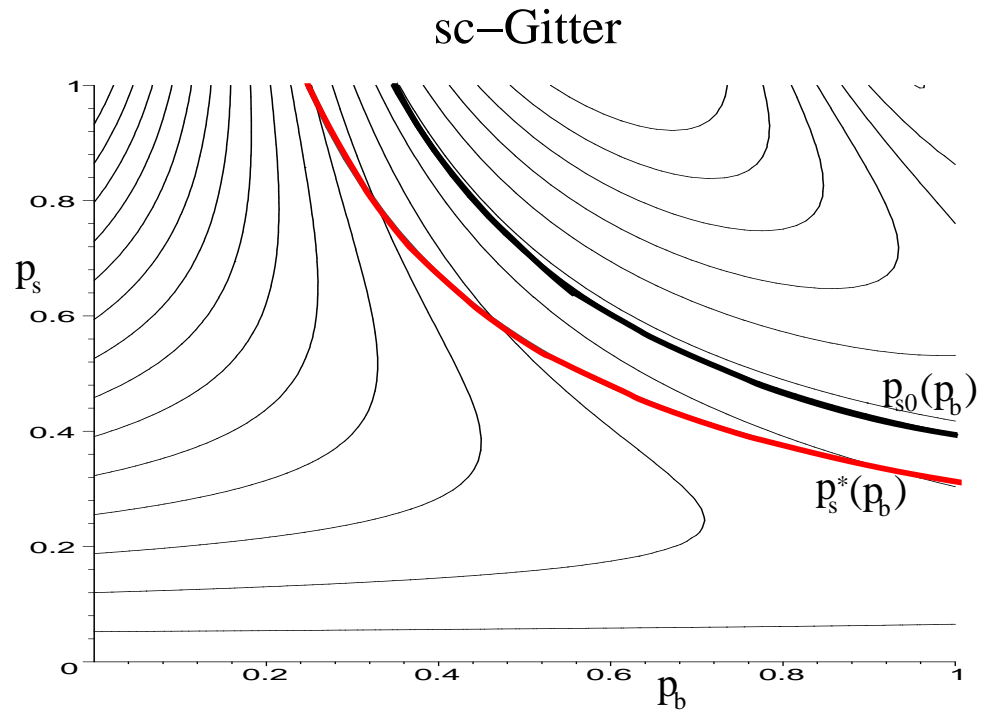


Abbildung 4.17: Die Kurven  $p_s^*(p_b)$  und  $p_{s0}(p_b)$  haben sowohl für das fcc-, als auch für das sc-Gitter fast identische Form. Die dünnen Linien sind die Höhenlinien der  $\chi(p_s, p_b)$ -”Landschaft”. Für  $p_s^*(p_b)$  ist die in Ref. [41] vorgeschlagene Formel benutzt worden.

# Kapitel 5

## Gegenbeispiele

Die in der Einleitung vorgestellte Beziehung zwischen der Perkolationsschwelle und der Nullstelle der mittleren Euler-Charakteristik hat sich in Kapitel 4 im Wesentlichen bestätigt. Auch die Vermutung, dass die Perkolationsschwelle in zwei Dimensionen immer zwischen Wendepunkt und Nullstelle der Euler-Charakteristik liegt, scheint bei einer großen Klasse von Gittern zu stimmen. Es gibt aber auch Gitter, bei denen diese Beziehungen nicht gelten. Im Folgenden sollen diese Gitter vorgestellt und ihre gemeinsamen Eigenschaften identifiziert werden.

### 5.1 site-Perkolation

Steven van der Marck hat das Quadrat- und das Kagomé-Gitter auf verschiedene Arten modifiziert und für die so erhaltenen zehn neuen Gitter die Perkolationsschwellen numerisch bestimmt. Die Gitter, die van der Marck betrachtet, sind in Abbildung 5.1 dargestellt. Die Gitter haben entweder nur zwei Vertextypen, oder bestehen nur aus viereckigen Plaketten. Die Euler-Charakteristiken der Gitter, die nur zwei Vertextypen haben, können mit Gleichung (4.6) ausgerechnet werden. Die Euler-Charakteristiken der übrigen Gitter sind gleich der des Quadratgitters. Die Bezeichnungen der Gitter sind in Abbildung 5.1 und ihre Vertexkonfigurationen in Tabelle 5.1 zu finden. In der Tabelle sind auch die Nullstellen und Wendepunkte der Euler-Charakteristiken und die Perkolationsschwellen der Gitter angegeben. Bei vielen dieser Gitter liegt  $p_c$  nicht zwischen  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$ . Die größten Abweichungen von  $p_c$  nach oben sind beim *filled Kagomé*- und *star Kagomé*-Gitter zu finden. Beim *filled Kagomé*-Gitter tragen die Vertices in den Dreiecken des Kagomé-Gitters nicht zur Konnektivität bei, denn zwei Vertices auf den Ecken eines Dreiecks sind miteinander verbunden, unabhängig davon, ob der Vertex im Dreieck besetzt oder leer ist. Das Gitter perkoliert genau dann, wenn das Kagomé-Untergitter perkoliert;  $p_c$  ist daher gleich  $p_c^{Kagome} = 1 - 2 \sin(\pi/18)$ . Die Euler-Charakteristiken der beiden Gitter sind aber verschieden. Insbesondere ist die Nullstelle erheblich kleiner, da unbesetzte Vertices in den Dreiecken zusätzliche Löcher erzeugen können.

Beim *embedded Kagomé dual*- und beim *star Kagomé dual*-Gitter ist  $p_c$  kleiner als  $p_0^{(2)}$ . Alle

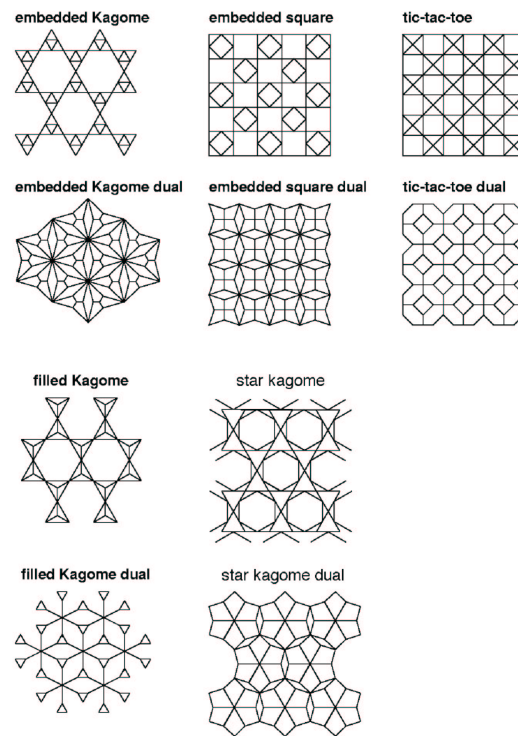


Abbildung 5.1: Modifizierte Quadrat- und Kagomé-Gitter aus [19].

Gittername	Vertexkonfiguration	$p_0$	$p_0^{(2)}$	$p_c$
embedded Kagomé	$\frac{2}{3} [3, 3, 3, 12] + \frac{1}{3} [3, 12, 3, 12]$	0.7580	0.6863	0.7406(3)
embedded square	$\frac{2}{3} [3, 4, 3, 8] + \frac{1}{3} [3, 8, 3, 8]$	0.6965	0.6384	0.6766(3)
tic-tac-toe	$\frac{1}{3} [3, 3, 3, 3] + \frac{2}{3} [3, 3, 4, 3, 3, 4]$	0.5414	0.5275	0.5448(3)
filled Kagomé	$\frac{2}{5} [3, 3, 3] + \frac{3}{5} [3, 3, 6, 3, 3, 6]$	0.6093	0.5754	0.6527...
star Kagomé	$\frac{2}{3} [3, 6, 3, 6] + \frac{1}{3} [3, 6, 3, 6]$	0.6756	0.6231	0.7406(2)
embedded Kagomé dual	wie Quadratgitter	0.6180	0.5774	0.5510(3)
embedded square dual	wie Quadratgitter	0.6180	0.5774	0.5770(3)
tic-tac-toe dual	$\frac{1}{5} [6, 6, 6, 6] + \frac{4}{5} [4, 6, 6]$	0.7200	0.6527	0.6779(3)
filled Kagomé dual	$\frac{1}{7} [6, 6, 6, 6, 6, 6] + \frac{6}{7} [3, 6, 6]$	0.7156	0.6512	0.6599(2)
star Kagomé dual	wie Quadratgitter	0.6180	0.5774	0.5515(2)

Tabelle 5.1: Die Perkolationsschwelle  $p_c$  modifizierter archimedischer Gitter liegt häufig nicht zwischen der Nullstelle  $p_0$  und dem Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der Euler-Charakteristik. Die Namen der Gitter und die Perkolationsschwellen sind aus [19] übernommen. “wie Quadratgitter” soll bedeuten, dass die Euler-Charakteristik gleich der des Quadratgitters ist. Diese Gitter haben mehr als zwei unterschiedliche Vertextypen, aber nur viereckige Plaketten.

Plaketten dieser Gitter sind Vierecke, und die Euler-Charakteristik ist daher die gleiche wie beim Quadratgitter. Es gibt aber einige Vertices mit hoher und andere mit kleiner Koordinationszahl. Diese Inhomogenität führt offensichtlich zu einer Absenkung von  $p_c$ . Dieser Effekt ist beim *embedded square dual*-Gitter nicht so stark ausgeprägt.  $p_c$  ist auch dort niedriger als beim Quadratgitter, aber nicht so niedrig wie bei den obigen Gittern und in etwa gleich  $p_0^{(2)}$ .

### Cluster der Größe 1 auf dem *filled Kagomé*-Gitter

Um die Absenkung der Nullstelle der Euler-Charakteristik relativ zur Perkolationsschwelle des *filled Kagomé*-Gitters zu untersuchen, bestimmen wir die Beiträge der Cluster und Löcher der Größe 1 zur Euler-Charakteristik. Ein Cluster der Größe 1 entsteht, wenn ein Vertex besetzt und alle seine Nachbarn unbesetzt sind.

Die Vertices innerhalb der Dreiecke haben drei Nachbarn und stellen  $\frac{2}{5}$  der Vertices. Die übrigen Vertices haben sechs Nachbarn. Die erwartete Zahl der Cluster der Größe 1 ist also

$$n_1(p) = \frac{2pq^3 + 3pq^6}{5}, \quad (5.1)$$

wobei  $q = 1 - p$  ist. Auf dem matching-Gitter haben die Vertices in den Dreiecken die gleiche Nachbarzahl, während die übrigen Vertices zwölf Nachbarn haben. Für erwartete Zahl der Cluster der Größe 1 auf dem matching-Gitter erhält man also

$$n_1^*(p) = \frac{2pq^3 + 3pq^{12}}{5}. \quad (5.2)$$

Im Abschnitt 4.2 wurde die Euler-Charakteristik  $\chi_{s_0}(p)$ , eingeschränkt auf Cluster und Löcher der Größe  $s \geq s_0$ , betrachtet. Zieht man  $n_1(p) - n_1^*(q)$  von der Euler-Charakteristik  $\chi^{f-Kagome}(p)$  des *filled Kagomé*-Gitters ab, erhält man  $\chi_2^{f-Kagome}(p)$ . Die Nullstelle und der Wendepunkt von  $\chi_2^{f-Kagome}(p)$  liegen bei  $p_0 = 0.6804$  und  $p_0^{(2)} = 0.6220$ . Das bloße Abziehen der Beiträge kleinster Cluster "repariert" also die Abweichung von  $p_0 > p_c > p_0^{(2)}$ .

## 5.2 bond-Perkolation

Die Perkolationsschwelle des archimedischen Gitters mit Vertexkonfiguration  $(3, 4, 3, 6)$  liegt oberhalb der Nullstelle der Euler-Charakteristik, obwohl  $p_c > \frac{1}{2}$  ist. Die Abweichung ist aber nur gering und  $p_c$  nur numerisch bekannt.

Ein Gegenbeispiel mit exakt bekannter Perkolationsschwelle erhält man, indem jede Gitterkante des Sechseckgitters durch den Graphen, der in Abb. 5.2 angegeben ist, ersetzt wird. Die bond-Perkolationsschwelle des Sechseckgitters ist exakt bekannt. Die Perkolationsschwelle des modifizierten Gitters ergibt sich aus der Bedingung, dass die Wahrscheinlichkeit, dass der Graph aus Abb. 5.2, durchgängig ist, gleich der bond-Perkolationsschwelle des Sechseckgitters ist.

Diese Wahrscheinlichkeit kann durch Abzählen aller Konfigurationen ausgerechnet werden.

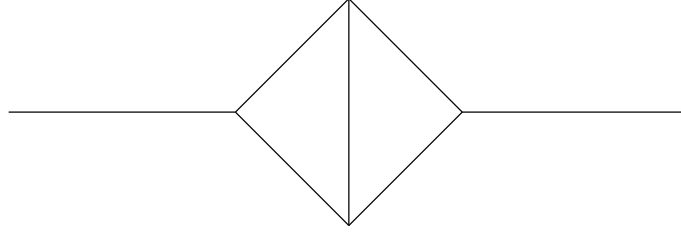


Abbildung 5.2: Graph, durch den die Gitterkanten des Sechseckgitters ersetzt werden.

Die beiden Kanten an den Enden des Graphens müssen offen sein, daher ein Faktor  $p^2$ . Der Graph ist sicherlich durchgängig, wenn höchstens eine der mittleren Kanten geschlossen ist, daher ein Beitrag  $p^5 + 5p^4q$ . Es gibt zwei Möglichkeiten, von den fünf mittleren Kanten zwei zu schließen, so dass keine Verbindung von links nach rechts existiert. Es bleiben acht offene Konfigurationen mit zwei geschlossenen Kanten, und man erhält einen Beitrag  $8p^3q^2$ . Sind nur zwei der fünf Kanten offen, gibt es zwei Möglichkeiten für eine offene Verbindung und daher einen Beitrag  $2p^2q^3$ . Ist nur eine der fünf Kanten offen, ist die Verbindung unterbrochen.  $p_c$  ist also Lösung der Gleichung

$$1 - 2 \sin\left(\frac{\pi}{18}\right) = p^2(p^5 + 5p^4q + 8p^3q^2 + 2p^2q^3). \quad (5.3)$$

Die einzige Lösung zwischen null und eins ist  $p_c = 0.833702\dots$

Die Euler-Charakteristik des Überdeckungsgitters lässt sich mit Gleichung (2.16) ausrechnen, und man erhält

$$\chi(p) = -q + 2(1 - p^2) - \frac{20}{21}(1 - p^3) - \frac{1}{21}(1 - p^{24}). \quad (5.4)$$

$\chi(p)$  hat eine Nullstelle bei  $p_0 = 0.82208$ ;  $p_0$  ist also kleiner als  $p_c$ . Durch das explizite Einführen einer Substruktur wird auch hier die Euler-Charakteristik abgesenkt, und die Nullstelle "rutscht" unter  $p_c$ .

### 5.3 Eine Folge von Gittern mit $p_c = \frac{1}{2}$ und variierender Euler-Charakteristik

Ausgehend von einem Dreiecksgitter, wird eine Folge von Gittern  $\{\mathcal{G}_n\}$  konstruiert, deren mittlere Euler Charakteristik für  $n = 0$  die des Dreiecksgitter ist, und für  $n \rightarrow \infty$  gegen die des Quadratgitters konvergiert. Für alle  $n$  ist die site-Perkolationsschwelle  $p_c = \frac{1}{2}$ .

Die Gitter entstehen, wenn man in jedes Dreieck des Dreiecksgitter ein weiteres Dreieck setzt, und dessen Ecken mit den Ecken des äußeren Dreiecks verbindet. Die Perkolationsschwelle des Gitters ändert sich dadurch nicht, da die Vertices an den Ecken des äußeren Dreiecks ohnehin miteinander verbunden sind. In das innere Dreieck wird eine Pyramide aus Quadraten eingeschrieben (siehe Abb. 5.3).



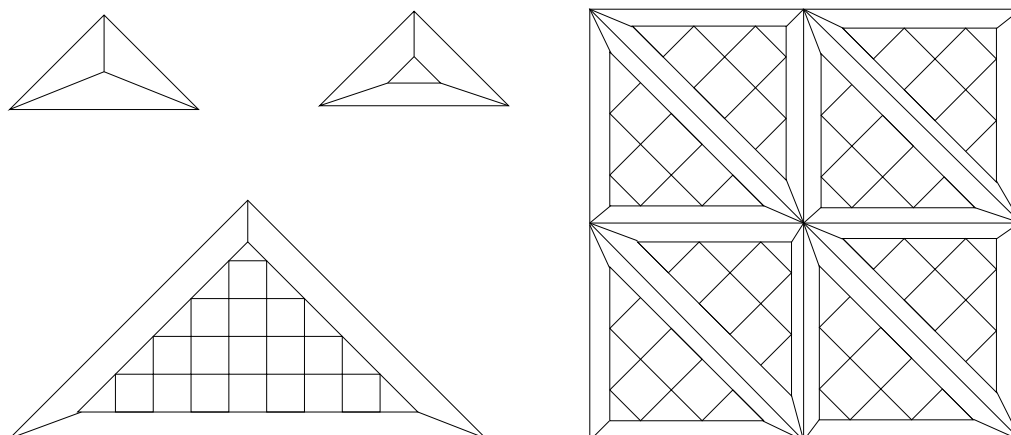


Abbildung 5.3: Links: In die Dreiecke eines Dreiecksgitters wird eine Substruktur eingeführt. Diese Substrukturen sind für  $n = 0$ ,  $n = 1$  und  $n = 5$  gezeigt. Rechts ist ein größerer Ausschnitt des Gitters mit  $n = 3$  zu sehen.

Die Fälle  $n = 1$  und  $n = 0$  müssen gesondert betrachtet werden (siehe Abb. 5.3). Für  $n = 0$  entartet das eingeschriebene Dreieck zu einem Vertex, für  $n = 1$  ist das innere Dreieck leer. Die Euler-Charakteristik lässt sich mit den bekannten Methoden ausrechnen, und man erhält eine Folge von Nullstellen  $p_{n_0}$ . Die Folge der Nullstellen hat bei  $n = 6$  ein Maximum und konvergiert dann langsam gegen  $p_0 = 0.618$  des Quadratgitters (siehe Abb. 5.4).

Der Zusammenhang zwischen den Nullstellen der Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen kann offensichtlich durch Substrukturen zerstört werden. Die Perkolationsschwelle und die Nullstelle der Euler-Charakteristik reagieren unterschiedlich auf Substruktur. Während die mittlere Euler-Charakteristik nur durch lokale Beiträge erzeugt wird, hängen Perkolationsschwellen vor allem von globalen Eigenschaften des Gitters ab. Substrukturen sind für Perkolation irrelevant und können renormiert werden. Im Abschnitt 4.2 wurde schon erwähnt, dass  $p_c < p_0$  dann gelten sollte, wenn sich das Skalenverhalten großer Cluster qualitativ auf kleine Cluster fortsetzt. Bei Gittern mit Substruktur ist aber gerade das nicht der Fall.

## 5.4 Kontinuumsperkolation von Kreisringen oder Kugeln verschiedener Radii

Auch bei Kontinuumsperkolation kann man Fälle finden, in denen aus der mittleren Euler-Charakteristik keine sinnvollen Aussagen über Perkolationsschwellen gewonnen werden können. Das einfachste Beispiel ist die Perkolation von Kreisringen in zwei Dimensionen. Die Euler-Charakteristik einer Vereinigung von Kreisringen ist immer negativ und kann daher keine Information über  $p_c$  liefern [21]. Ein anderes Beispiel ist Kontinuumsperkolation von Kugeln zwei verschiedener Radii. Hat ein kleiner Anteil der Kugeln einen großen

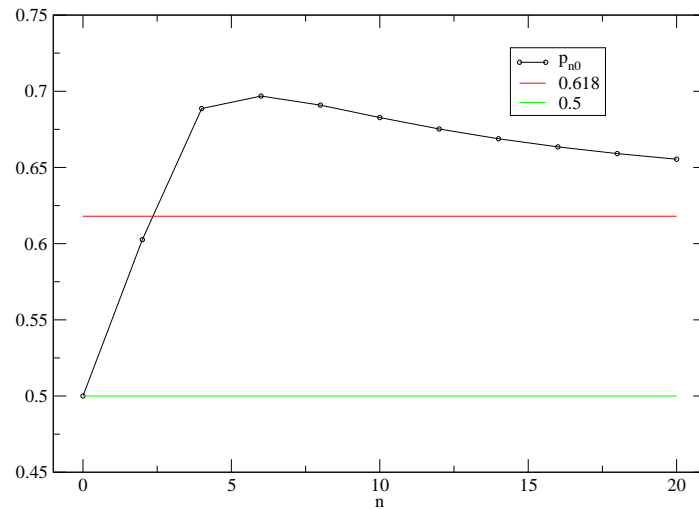


Abbildung 5.4: Die Nullstellen  $p_{n0}$  der mittleren Euler-Charakteristik der Gitter  $\mathcal{G}_n$ . Die beiden horizontalen Linien markieren die Perkolationschwelle der Gitter  $p_c = \frac{1}{2}$  und die Nullstelle der Euler-Charakteristik des Quadratgitters  $p_0^{sq} = 0.618$ .

Radius und die übrigen Kugeln einen sehr kleinen Radius, werden die großen Kugeln bei genügend hoher Punktdichte perkolieren. Durch die vielen isolierten kleinen Kugeln ist die Euler-Charakteristik aber positiv und bei geeigneter Wahl des Größenverhältnisses der Kugeln kann die Nullstelle der Euler-Charakteristik zu beliebig hohen Punktdichten verschoben werden, obwohl die großen Kugeln perkolieren. Untersuchungen zur Abhängigkeit der Perkolationschwelle und Euler-Charakteristik von Polydispersität sind in Ref. [20] zu finden.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

### Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen in zwei Dimensionen

In der Einleitung wurde die Beobachtung vorgestellt, dass die site-Perkolationsschwelle  $p_c$  jedes archimedischen Gitters immer zwischen der Nullstelle  $p_0$  und dem Wendepunkt  $p_0^{(2)}$  der mittleren Euler-Charakteristik liegt. Genauer gilt für alle archimedischen Gitter  $p_0^{(2)} < p_c < p_0$ , und das arithmetische Mittel von  $p_0$  und  $p_0^{(2)}$  liefert eine exzellente Approximation von  $p_c$ . Dieser Befund war der Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen in zwei Dimensionen. Dazu wurde die Euler-Charakteristik einer Vielzahl zweidimensionaler Gitter berechnet, und mit den, zumeist numerisch bestimmten, Perkolationsschwellen verglichen. Darüberhinaus liefert das Skalenverhalten der Cluster bei  $p_c$  Argumente für die Gültigkeit der Beobachtung.

- Die Perkolationsschwellen aller “self-matching” Gitter fallen mit der Nullstelle der Euler-Charakteristik zusammen. Auch für die eindimensionale Kette und das Bethe-Gitter gilt  $p_0 = p_c$ .
- Für site-Perkolation auf Laves-Gittern, auf 2-uniformen Gittern und auf einigen irregulären Gittern gilt  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$ . Die site-Perkolationsschwellen der 2-uniformen Gitter waren nicht bekannt und wurden numerisch bestimmt.
- Die Euler-Charakteristiken der Überdeckungsgitter wurden für alle archimedischen Gitter und für das Voronoi-Gitter berechnet. Mit Ausnahme des  $(3, 4, 6, 4)$ -Gitters gilt für alle untersuchten Gitter  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$  für  $p_c \geq \frac{1}{2}$  und  $p_0^{(2)} \geq p_c \geq p_0$  für  $p_c \leq \frac{1}{2}$ .
- Die site-Perkolationsschwellen zufällig dekorierte Mosaike wurden numerisch bestimmt und die Euler-Charakteristiken der dekorierten Mosaike berechnet. Die Nullstelle der Euler-Charakteristik  $p_0(m)$  und die Perkolationsschwelle  $p_c(m)$  ändern sich mit dem Bruchteil  $m$  der dekorierten Plaketten. Für  $p_c(m) > \frac{1}{2}$  ist  $p_0(m) > p_c(m)$

und für  $p_c(m) < \frac{1}{2}$  gilt  $p_0(m) < p_c(m)$ . Für den Wendepunkt der Euler-Charakteristik gilt dieses Verhalten i. A. nicht.

- Das Skalenverhalten der Cluster in der Nähe des kritischen Punktes liefert Argumente dafür, dass  $p_c < p_0$  gilt, wenn  $p_c > \frac{1}{2}$  ist, und umgekehrt, dass  $p_c > p_0$  gilt, wenn  $p_c < \frac{1}{2}$  ist. Dazu wurde die mittlere Euler-Charakteristik pro Vertex  $\chi_{s_0}(p_c)$  am kritischen Punkt betrachtet, zu der nur Cluster und Löcher der Größe  $s \geq s_0$  beitragen. Entsprechend wurde  $[p_c - q_c]_{s_0}$  als die Differenz der Wahrscheinlichkeiten, dass ein Vertex Teil eines Clusters oder eines Loches der Größe  $s \geq s_0$  ist, definiert. Mit der Skalenannahme erhält man für  $s_0 \gg 1$  für das Verhältnis beider Größen

$$\frac{\chi_{s_0}(p_c)}{[p_c - q_c]_{s_0}} = \frac{5}{96s_0}. \quad (6.1)$$

$\chi_{s_0}(p_c)$  hat also für  $s_0 \gg 1$  das gleiche Vorzeichen wie  $[p_c - q_c]_{s_0}$ .

- Für Gitter, die eine Substruktur enthalten, gelten die diskutierten Beziehungen i. A. nicht. Sowohl für bond-Perkolation, als auch für site-Perkolation konnten Beispiele gefunden werden, in denen exakte Perkolationsschwellen bekannt sind, die über der Nullstelle liegen, obwohl  $p_c > \frac{1}{2}$  ist. Bei anderen Gitter liegen die Perkolationsschwellen unter dem Wendepunkt.

Die Beziehungen  $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$  für  $p_c \geq \frac{1}{2}$  und  $p_0^{(2)} \geq p_c \geq p_0$  für  $p_c \leq \frac{1}{2}$  konnten also als "Faustregel" für zweidimensionale Gitter ohne nennenswerte Substruktur empirisch gut bestätigt werden. Die Skalenargumente unterstützen die Vermutung, dass Abweichungen von der Faustregel mit Substrukturen der Gitter zusammenhängen. Durch die Gegenbeispiele sind die Hoffnungen auf einen allgemeinen Beweis der Vermutung aber zunichte gemacht worden. Ob die Ungleichungen unter bestimmten Regularitätsannahmen richtig sind, bleibt offen.

## Euler-Charakteristik und Perkolationsschwellen in drei Dimensionen

Für einige dreidimensionale Gitter war bekannt, dass die Nullstelle der mittleren Euler-Charakteristik über der Perkolationsschwelle liegt. In drei Dimensionen führt die Abhängigkeit der Euler-Charakteristik von der Wahl der Zellen auf Mehrdeutigkeiten. Die Berechnung der Euler-Charakteristik dreidimensionaler Gitter wird immer dann kompliziert, wenn die WSZ des Gitters mehr Flächen hat, als ein Gittervertex Nachbarn hat. Es wurden die mittlere Euler-Charakteristik einer Reihe weiterer Gitter berechnet. Auch in drei Dimensionen bestätigt sich die Vermutung, dass die Nullstelle der Euler-Charakteristik größer als die site-Perkolationsschwelle ist, in den allermeisten Fällen.

## Bond-site-Perkolation

Um die Euler-Charakteristik von bond-site-Perkulationsprozessen bestimmen zu können, wurde die im Kapitel 3 beschriebene Methode entwickelt. Mit dieser Methode kann die Geometrie von Figuren unter beliebig vorgegebenen Zusammenhangsverhältnissen berechnet werden. Die Methode fand außerdem Anwendung in der Berechnung der Euler-Charakteristik von Gittern, die ansonsten nur mit komplizierten Zellen durchzuführen ist. Es wurden die Euler-Charakteristiken für bond-site-Perkolation auf dem zweidimensionalen Dreiecks- und Quadratgitter, sowie auf dem dreidimensionalen sc- und fcc-Gitter berechnet. Abgesehen vom Dreiecksgitter, liegt die Nullstelle in der  $(p_s, p_b)$ -Ebene jenseits von der kritischen Kurve, analog zu  $p_c < p_0$  bei reiner site-Perkolation. Beide Kurven haben in allen Fällen ähnliche Form und liegen in etwa so dicht zusammen, wie die  $p_0$  und  $p_c$  der reinen bond- und site-Perkolation. Die Faustregel scheint daher auch auf bond-site-Perkolation anwendbar zu sein.

## Ausblick

Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen die Faustregeln:

- $p_0^{(2)} \leq p_c \leq p_0$  für  $p_c \geq \frac{1}{2}$  und  $p_0^{(2)} \geq p_c \geq p_0$  für  $p_c \leq \frac{1}{2}$  für Perkolation auf zweidimensionalen Gittern
- $p_c < p_0$  für dreidimensionale Gitter
- Für bond-site-Perkolation liegt die Kurve mit  $\chi(p_s, p_b) = 0$  über der kritischen Kurve.

Allerdings wurde auch deutlich, dass diese Beziehungen keineswegs immer gelten. Abweichungen von der Regel konnten mit Substruktur der Gitter in Verbindung gebracht werden. Wie sich Substrukturen im Detail auf die Euler-Charakteristik und Perkolation auswirken, und ob es Klassen von Gittern gibt, bei denen die Faustregeln rigoros gelten, bleibt offen.

Die Tatsache, dass der beobachtete Zusammenhang zwischen der Nullstelle der Euler-Charakteristik und der Perkolationsschwelle nicht nur für ausgewählte site-Perkulationsprobleme gilt, sondern auch für zufällig dekorierte Mosaike und sogar für bond-site-Perkolation gilt, lässt hoffen, dass die Faustregel für eine große Klasse von Perkulationsproblemen anwendbar ist. Für die Gültigkeit scheint nicht so sehr die Art des Perkulationsprozesses, als viel mehr die Homogenität der verwendeten Gitter entscheidend zu sein.



# Anhang A

## Numerik

Ausser in einer Dimension oder auf Bethe-Gittern lässt sich kein Perkulationsproblem analytisch lösen. Nur von wenigen Gitter kennt man aufgrund von Symmetrien die exakten Perkulationsschwellen. Um quantitative Aussagen über Perkulationseigenschaften zu machen, ist man auf numerische Methoden angewiesen. Da Perkulation aber streng genommen nur in unendlich ausgedehnten Systemen auftritt, können alle numerischen Resultate nur fehlerbehaftete Schätzungen der exakten Resultate sein. Durch finite-size-scaling (siehe Abschnitt A.2.2) können Resultate aus einer Folge von Simulationen auf endlichen Gittern verschiedener Größe systematisch zu unendlicher Gittergröße extrapoliert werden. Finite-size-scaling beruht auf der Skalenhypothese. Dennoch sind Simulationen eine wichtige Stütze der Intuition und liefern, falls man die Skalenhypothese glaubt, gute quantitative Resultate.

Ich habe Perkulationsprobleme auf verschiedenen zwei- und dreidimensionalen Gittern simuliert. Zu diesem Zweck wird ein endliches Gitter mit  $N$  Gitterplätzen in einem Computerprogramm generiert und die Gitterkanten oder Vertices unabhängig voneinander mit der Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt. Für die Simulationen wurde das von Newman und Ziff in [27] vorgestellte Programm benutzt. Dort werden die Kanten oder Vertices nicht mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt, sondern  $Np$  zufällig über das Gitter verteilte Vertices (Kanten) besetzt. Auf großen Gittern ist diese Prozedur äquivalent zum Besetzen mit Wahrscheinlichkeit  $p$ . Diese Methode hat den Vorteil, dass man, ausgehend von einem völlig leeren Gitter, sukzessive Vertices (Kanten) in zufälliger Reihenfolge besetzen kann und eine ganze Folge von Gitterkonfigurationen erhält, deren Eigenschaften untersucht werden können. Die Besetzungsreihenfolge muss mit einem Pseudo-Zufallsgenerator erzeugt werden.

### A.1 Der Algorithmus von Newman und Ziff [27]

Um ein Perkulationsproblem auf dem Computer zu simulieren, müssen zu jedem Gitterpunkt sein Zustand (besetzt oder unbesetzt) und seine Nachbarvertices bekannt sein. Die Vertices werden mit einem einzigen Index  $i$  indiziert. Die lineare Indizierung ermöglicht einen schnelleren Zugriff auf die Speicherorte und wird deshalb gegenüber einem Zeilen-

und einem Spaltenindex bevorzugt. Bei komplizierteren Gitter ist es zudem häufig nicht möglich oder zweckmäßig, das Gitter in gleichlange Zeilen zu zerlegen. Um den Zustand eines Vertex  $i$  zu speichern, wird jedem Vertex eine Größe  $\text{ptr}[i]$  zugewiesen.  $\text{ptr}[i]$  steht für *pointer* (Zeiger) und enthält entweder den Wert `EMPTY`, wenn der Vertex unbesetzt ist, oder einen Label, anhand dessen festgestellt werden kann, zu welchem Cluster der Vertex gehört. Das “cluster labelling” wird unten genauer beschrieben. Um die Nachbarn eines Vertex festzulegen, wird jedem Vertex  $i$  ein Vektor  $\text{nn}[i]$  zugewiesen. Der Vektor  $\text{nn}[i]$  hat so viele Einträge, wie der Vertex  $i$  Nachbarn hat, und enthält die Indices der Nachbarvertices. Wenn bond-Perkolationsprobleme simuliert werden sollen, müssen, anstatt Vertices zu besetzen, nacheinander die Einträge von  $\text{nn}[i]$  hinzugefügt werden. Die Gitterdefinition wird im nächsten Unterkapitel beschrieben.

### A.1.1 Die Gitterdefinition

Um die  $\text{nn}[i]$  festzulegen, werden für jeden Vertex  $i$  die Indices der Nachbarvertices  $\text{nn}[i][0], \dots, \text{nn}[i][z-1]$  ( $z$  ist die Koordinationszahl des Vertex) ermittelt. Durch die lineare Indizierung müssen auf mehrdimensionalen Gittern Zeilen- und Ebenenumbrüche usw. berücksichtigt werden. Für ein Quadratgitter mit Kantenlänge  $L$  und Vertexzahl  $N=L*L$  haben die Vertices der ersten Zeile die Indices  $0, \dots, L$ , die der zweiten Zeile  $L, \dots, 2L-1$ , usw. bis zur letzten Zeile  $N-L, \dots, N-1$ . Für einen Vertex  $i$  gilt also

- $\text{nn}[i][0]=i+1$ ; (der östliche Nachbar)
- $\text{nn}[i][1]=i+L$ ; (der südliche Nachbar)
- $\text{nn}[i][2]=i-1$ ; (der westliche Nachbar)
- $\text{nn}[i][3]=i-L$ ; (der nördliche Nachbar)

Die Vektoren der Randvertices, also solche mit  $i=0, \dots, L-1$ ,  $i=N-L, \dots, N-1$ ,  $i=0, L, 2L, \dots, (L-1)L$  und  $i=L-1, 2L-1, \dots, N-1$ , müssen, abhängig von den verwendeten Randbedingungen, korrigiert werden. Ich habe keine periodischen Randbedingungen verwendet, sondern  $\text{nn}[i][3]$  in der ersten Zeile,  $\text{nn}[i][2]$  in der ersten Spalte,  $\text{nn}[i][1]$  in der letzten Zeile und  $\text{nn}[i][0]$  in der letzten Spalte auf den Wert  $i$  gesetzt. Setzt man  $\text{nn}[i][1]=i$ , verbindet man den Vertex mit sich selbst und erzeugt eine triviale Verbindung.

Für eine effektive Zuweisung von  $\text{nn}[i]$  muss man einen möglichst kleinen Ausschnitt des Gitters identifizieren, der sich in alle Richtungen periodisch fortsetzen lässt und dadurch das Gitter generiert. Ist eine solche Einheitszelle gefunden, reicht es, die Nachbarschaftsverhältnisse der Vertices innerhalb der Zelle und relativ zu umgebenden Zellen zu charakterisieren. Die Gesamtgröße des Gitter muss dann ein Vielfaches der Einheitszelle sein. Beim Quadratgitter ist die kleinste Einheitszelle, die sich nach oben, unten, rechts und links fortsetzen lässt, ein einziger Vertex. Auch das Dreiecksgitter lässt sich durch bloße Translation eines einzigen Vertex erhalten. Bei komplizierteren Gitter geht das im Allgemeinen nicht. Selbst wenn sie, wie die archimedischen Gitter, nur einen Vertextyp enthalten, müssen



die Einheitszellen mehrere Vertices enthalten, da Vertices in verschiedenen Orientierungen vorkommen können. Beim Sechseckgitter sind z.B. vier Vertices nötig (siehe Abb. A.1). Darüberhinaus ist es häufig sinnvoll, ein Gitter auf ein Quadratgitter zu transformieren, wie am Beispiel des Sechseckgitters in Abbildung A.1 illustriert ist. Wenn die  $nn[i]$  für

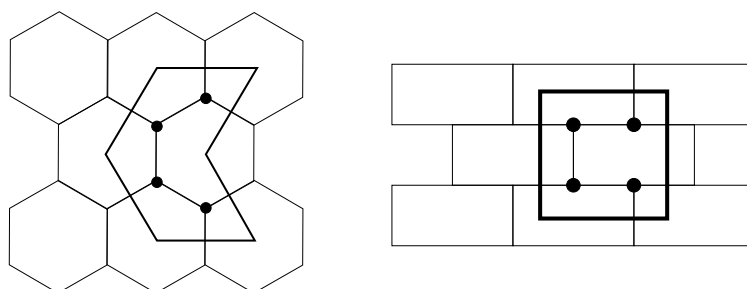


Abbildung A.1: Ein periodisch fortsetzbarer Ausschnitt und die Transformation auf ein Quadratgitter, am Beispiel des Sechseckgitters.

das Sechseckgitter festgelegt werden, muss zwischen geraden und ungeraden Zeilen bzw. Spalten unterschieden werden. Bei Gittern mit verschiedenen Vertextypen ist die Gitterdefinition häufig bei weitem komplizierter, im Prinzip aber genauso durchzuführen. Um die Indizierung einfacher zu machen, ist es manchmal sinnvoll, zusätzliche, isolierte Vertices einzuführen. Dadurch erreicht man einheitliche Zeilenlängen, muss aber ein größeres Gitter zu speichern. In manchen Fällen sind die kleinsten rechteckigen Ausschnitte, die sich periodisch fortsetzen lassen, extrem groß, wohingegen kleine Parallelogramme durch periodische Fortsetzung das Gitter erzeugen. Wird das endliche Gitter aus Parallelogrammen aufgebaut, hat es selbst die Form eines Parallelogramms. Der Gitterabstand gegenüberliegender Parallelogrammseiten ist aber nach wie vor  $L$ . Die Randbedingungen werden bei allen Gittern analog zum Quadratgitter implementiert.

### A.1.2 Cluster labelling

Um festzustellen, ob zwei Vertices zu ein und demselben Cluster gehören, muss jeder Vertex eindeutig einem Cluster zugeordnet werden können. Dazu wird jedem Vertex  $i$  ein Zeiger  $ptr[i]$  zugewiesen. Als Label für einen Cluster dient ein ausgezeichnete Vertex des Clusters, der sogenannte root-Vertex.  $ptr[root]$  enthält den negativen Wert der Cluster-Größe.  $ptr[i]$  von jedem anderen Vertex im gleichen Cluster zeigt, möglicherweise in mehreren Schritten auf  $root$ , z.B.  $ptr[i]=j \rightarrow ptr[j]=k, \dots, ptr[m]=n \rightarrow ptr[n]=root \rightarrow ptr[root]<0$ . Dadurch kann zu jedem Vertex schrittweise der Clusterlabel, der erste und einzige in der Kette mit  $ptr[i]<0$ , gefunden werden. Auf jedem Cluster wird dadurch eine Baumstruktur festgelegt, und durch Absteigen auf den "Ästen" gelangt man zum Label. Durch sukzessives Besetzen weiterer Vertices oder Kanten des Gitters, kann es vorkommen, dass zwei ehemals verschiedene Cluster mit Labeln  $root1$  und  $root2$  zusammenwachsen. Sei nun  $-ptr[root1] < -ptr[root2]$ . Dann wird der Zeiger  $ptr[root1]$  des kleineren Clusters auf den Wert  $ptr[root1]=root2$  gesetzt. In  $root2$  wird die negative Summe der Clu-

stergrößen von Cluster 1 und 2  $\text{ptr}[\text{root2}] = \text{ptr}[\text{root2}] + \text{ptr}[\text{root1}]$  geschrieben. Danach gehört der komplette kleinere Cluster zum größeren, denn das Absteigen von einem Vertex des kleineren Cluster führt zu  $\text{root1}$  und im nächsten Schritt auf  $\text{root2}$ . Die Variable  $\text{prt}[\text{root2}]$  enthält die negative Clustergröße des vereinigten Clusters mit Label  $\text{root2}$ . Der Fall, dass beide Cluster gleich groß sind, wird separat behandelt. Dadurch erhält man eine eindeutige Zuordnung der Vertices zu Clustern.

### A.1.3 site-Perkolation

Um ein site-Perkulationsproblem zu simulieren, werden zu Beginn des Programms alle Vertices in den Zustand  $\text{prt}[i] = \text{EMPTY}$  gesetzt und die vollständige Gitterdefinition durchgeführt. Anschließend werden in einer Programmschleife von  $i=0$  bis  $i=N-1$  die Vertices sukzessive in einer (pseudo)-zufälligen Reihenfolge besetzt. Um Vertex  $i$  zu besetzen, wird  $\text{ptr}[i] = -1$  gesetzt. Das entspricht einen Cluster der Größe 1. Anschließend wird für alle Nachbarvertices geprüft, ob der neue Vertex schon zu einem vorhandenen Cluster gehört, und die Cluster gegebenenfalls durch die oben beschriebene Prozedur vereinigt.

### A.1.4 bond-Perkolation

Die Vorgehensweise bei der Simulation eines bond-Perkulationsproblem unterscheidet sich von der site-Perkolation. Anfangs werden alle Vertices besetzt, d.h. deren Pointer auf den Wert  $\text{ptr}[i] = -1$  gesetzt. Die Nachbarschafts-Vektoren aller Vertices enthalten nur Verbindungen zu sich selbst ( $\text{nn}[i][1] = i$  für alle  $i, 1$ ). Die so entstandene Konfiguration entspricht  $N$  isolierten Clustern der Größe 1. In einer Programmschleife werden nun Einträge von  $\text{nn}[i]$  in (pseudo)-zufälliger Reihenfolge hinzugefügt. Falls die neue Gitterkante verschiedene Cluster verbindet, werden diese vereinigt und deren Labels entsprechend angepasst.

## A.2 Bestimmung von Perkulationschwellen

### A.2.1 Spanning Cluster

Auf einem endlichen Gitter kann selbstverständlich kein unendlicher Cluster auftreten. Stattdessen sucht man "spanning clusters", d.h. Cluster, die rechten und linken oder oberen und unteren Rand des endlichen Gitters verbinden. Ein spanning cluster kann, anders als der unendliche Cluster, bei jeder von 0 und 1 verschiedenen Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  mit strikt positiver Wahrscheinlichkeit existieren oder nicht existieren. Auch die Eindeutigkeit des unendlichen Clusters gilt nur für unendlich ausgedehnte Gitter und echte Zufallszahlen, nicht aber für spanning cluster. In unserem Fall, wo  $Np$  Vertices (Kanten) ausgewählt werden, und nicht alle Vertices (Kanten) mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt werden, muss  $Np > L$  bzw.  $Np < N - L$ , damit ein spanning cluster existieren kann. Dennoch ist für kleine  $p$  die Wahrscheinlichkeit  $P_{sp}(p)$ , dass ein spanning Cluster existiert, sehr klein,

während sie für große  $p$  nahe eins ist.  $P_{sp}(p)$  nähert sich für große Gitter immer mehr einer Stufenfunktion mit Sprung bei  $p_c$  an. Um  $p_c$  zu bestimmen, errechnet in einer Simulation den Wert  $p_{sp}$ , bei dem zum ersten Mal ein spanning cluster auftritt. Aus  $I$  unabhängigen Simulationen erhält man einen Schätzwert für  $\langle p_{sp} \rangle = \int_0^1 p \frac{dP_{sp}(p')}{dp'}|_{p'=p} dp$  durch

$$\bar{p}_{sp} = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I p_{sp_i}. \quad (\text{A.1})$$

Die Standardabweichung  $\sigma^2 = \int_0^1 (p - \langle p_{sp} \rangle)^2 \frac{dP_{sp}(p')}{dp'}|_{p'=p} dp$  kann durch

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{1}{I-1} \sum_{i=1}^I (p_{sp_i} - \bar{p}_{sp})^2 \quad (\text{A.2})$$

geschätzt werden.  $\bar{\sigma}$  ist ein Maß für die Breite des Bereichs, in dem  $P_{sp}(p)$  von Werten nahe 0 auf Werte nahe 1 ansteigt.

Aus der Streuung der einzelnen  $p_{sp}$  ergibt sich die Standardabweichung für  $\bar{p}_{sp}$  zu  $\sqrt{\frac{\sigma^2}{I}}$ . Diese Werte hängen von der Größe des verwendeten Gitters ab. Aus Simulationen auf Gittern unterschiedlicher Größe lässt sich durch Extrapolation, das sog. finite-size-scaling (nächstes Kapitel), ein Wert für unendlich große Gitter ermitteln.

### A.2.2 finite-size-scaling

Die sog. Skalenannahme sagt für das Verhalten von Größen in der Nähe des kritischen Punktes Potenzgesetze voraus. Die Skalenannahme ist sowohl durch numerische Simulationen sehr gut bestätigt als auch durch Renormierungsargumente untermauert. Die Längenskala des exponentiellen Abfalls der pair-connectedness Funktion, die Korrelationslänge  $\xi$ , divergiert in der Nähe von  $p_c$  mit einem Potenzgesetz

$$\xi \sim |p_c - p|^{-\nu}. \quad (\text{A.3})$$

Es wird vermutet, dass  $\nu = 4/3$  exakt gilt (siehe [30]).

Ein spanning cluster wird typischerweise dann existieren, wenn  $\xi$  die Größenordnung der Kantenlänge des Gitterausschnitts erreicht, denn für Abstände  $x > \xi$  fällt die pair-connectedness Funktion exponentiell ab. D.h. der Wert  $\bar{p}_{sp}(L)$ , bei dem im Mittel zum ersten Mal ein spanning cluster auf einem Gitter der Kantenlänge  $L$  auftritt, sollte folgende Skalenrelation erfüllen:

$$L \sim \xi \sim |p_c - \bar{p}_{sp}(L)|^{-\nu} \quad (\text{A.4})$$

Daraus erhält man  $|p_c - \bar{p}_{sp}(L)| \sim L^{-\frac{1}{\nu}}$  und kann die für verschiedene  $L$  ermittelten Werte  $\bar{p}_{sp}(L)$  nach  $L \rightarrow \infty$  extrapolieren. Dazu trägt man  $\bar{p}_{sp}(L)$  gegen  $L^{-\frac{1}{\nu}}$  auf und legt eine Regressionsgerade durch die Werte. Der Achsenabschnitt der Regressionsgeraden ist der Schätzwert für  $p_c$ . Die Standardabweichung des Achsenabschnitts ist die Fehlergrenze von

der Perkolationsschwelle.

Newman und Ziff beschreiben in [27] Methoden zur numerischen Bestimmung von Perkolationsschwellen, bei denen  $p_{sp}(L)$  schneller mit der Gittergröße gegen  $p_c$  konvergiert. Für die hier benötigte Genauigkeit ist diese einfache Methode aber völlig ausreichend.

### A.3 Bestimmung von Clusterverteilungen

Mit dem Algorithmus lassen sich Gitter-Konfigurationen zu jeder Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  generieren. Diese Konfigurationen stellen Stichproben aus dem Raum der möglichen Konfigurationen dar. Da die Zahl der möglichen Konfigurationen selbst für kleine Gitter extrem groß ( $2^N$ ) ist, kann immer nur ein kleiner Teil untersucht werden.

Die Konfiguration ist in dem Satz von `ptr[i]`-Variablen gespeichert. Die Verteilung der Clustergrößen kann für eine bestimmte Konfiguration einfach durch Auswerten von `ptr[i]` erhalten werden, denn `ptr[root]` eines jeden `root`-Vertex enthält die Größe des Clusters, dem er als Label dient. Auch die Zahl der Cluster einer bestimmten Größe pro Vertex kann so bequem bestimmt werden. Um zuverlässige Werte zu erhalten, muss über viele Konfigurationen gemittelt werden.

### A.4 Simulationen

#### A.4.1 Perkolationsschwellen 2-uniformer Gitter

In Kapitel 4.1.2 werden 2-uniforme Gitter [10] untersucht. Es gibt gerade 20 2-uniforme Gitter, deren Perkolationsschwellen als Teil dieser Arbeit bestimmt wurde.

In den folgenden Abbildungen sind jeweils eine Skizze des Gitters, in der die verwendete Einheitszelle eingerahmt ist, und der Plot des finite-size-scalings gezeigt. Wo es für die Implementierung auf dem Computer sinnvoll war, ist auch eine Transformation des Gitters auf ein Quadratgitter oder eine ähnliche Deformation skizziert. Falls die Zeilen der Einheitszellen verschiedene Längen haben, stehen die Längen der Zeilen am Ende der Zeilen. Bei manchen Gitter habe ich zur Vereinfachung der Implementierung zusätzliche, isolierte Vertices (Geistervertices) eingeführt. Zu den einzelnen Gittern sind jeweils die Besonderheiten der Implementierung kurz geschildert. Die Gitter sind in der Reihenfolge aufgeführt, die in [10] gewählt wurde. Zu jedem Gitter ist zusätzlich die Vertexkonfiguration angegeben (siehe Kapitel 4.1.2). Bei vielen 2-uniformen Gitter kann man Untereinheiten identifizieren, die wie Vertices eines Sechseck- oder Quadratgitters angeordnet sind.

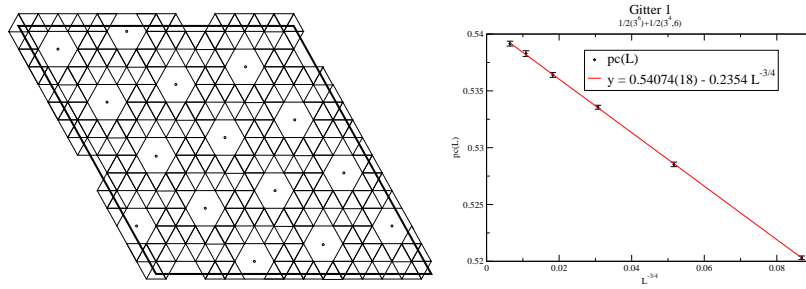


Abbildung A.2: Gitter 1:  $\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^4, 6)$ . Das Gitter wiederholt sich erst nach zwölf Spalten und Zeilen. In die “Löcher” wurden zusätzliche isolierte Vertices gesetzt.

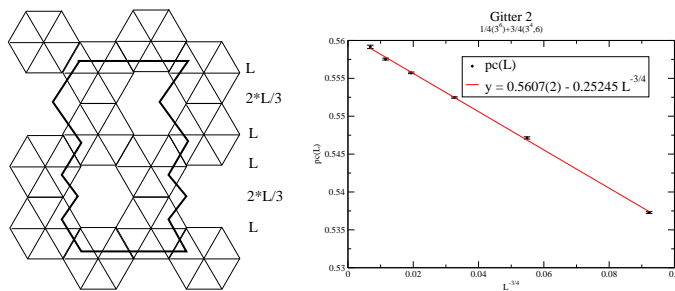


Abbildung A.3: Gitter 2:  $\frac{1}{4}(3^6) + \frac{3}{2}(3^4, 6)$ . Die Einheitszelle hat sechs Zeilen und vier Spalten.

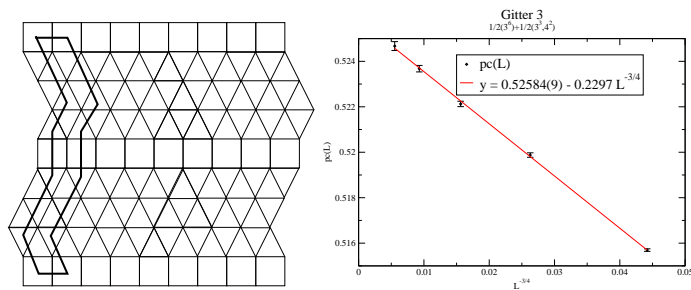


Abbildung A.4: Gitter 3:  $\frac{1}{2}(3^6) + \frac{1}{2}(3^3, 4^2)$

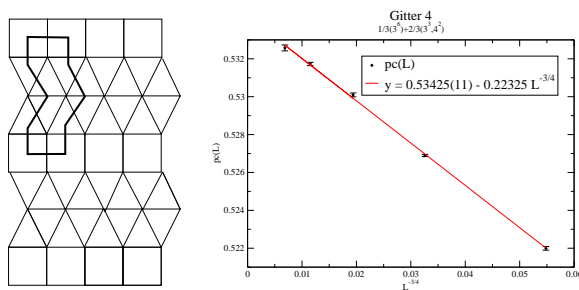


Abbildung A.5: Gitter 4:  $\frac{1}{3}(3^6) + \frac{2}{3}(3^3, 4^2)$

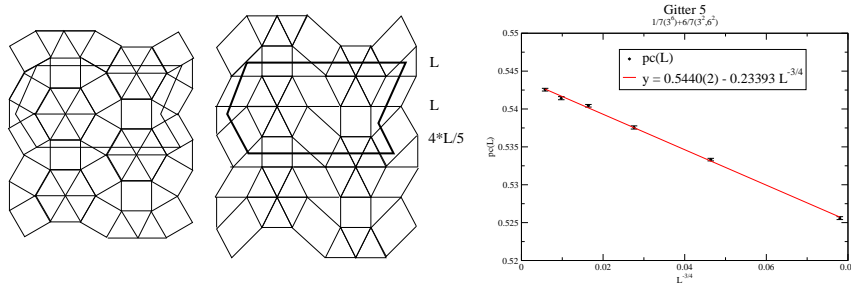


Abbildung A.6: Gitter 5:  $\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 3, 4)$ . Damit eine Zeilenstruktur sichtbar wird, ist es sinnvoll die senkrechten Streifen des Gitter gegeneinander zu verschieben. Die Zeilenlängen der Eineitszelle sind unterschiedlich.

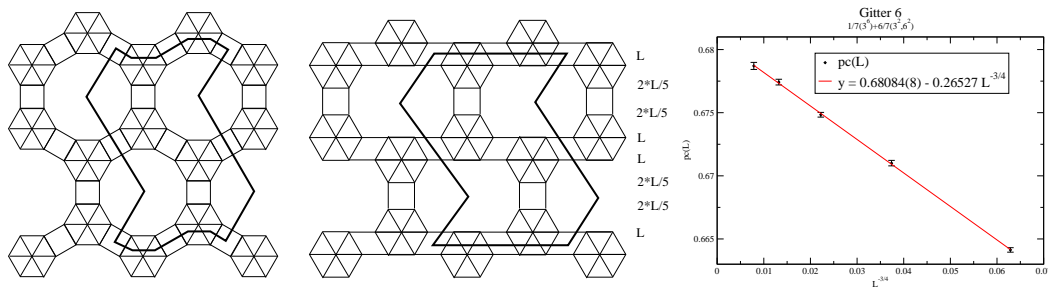


Abbildung A.7: Gitter 6:  $\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 4, 12)$ . Die sechseckigen Untereinheiten, bestehend aus sechs Dreiecken, sind auf einem Sechseckgitter angeordnet. Die Untereinheiten sind durch je zwei Kanten verbunden. Leichte Deformation des Gitters ermöglicht eine Einteilung in Zeilen. Die Längen der Zeilen sind unterscheiden sich.

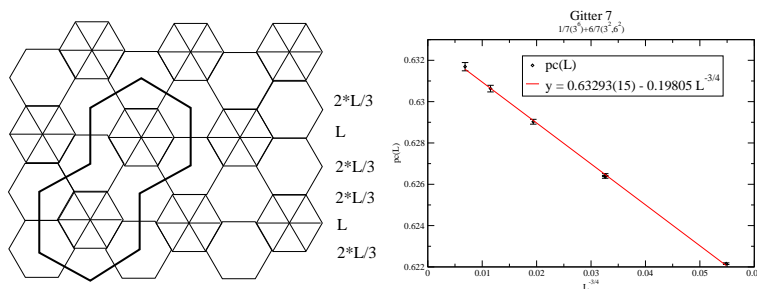


Abbildung A.8: Gitter 7:  $\frac{1}{7}(3^6) + \frac{6}{7}(3^2, 6)$ . Der gewählte Ausschnitt ist nicht der kleinstmögliche. Eine einziges Sechseck, bestehend aus sechs Dreiecken hätte ausgereicht.

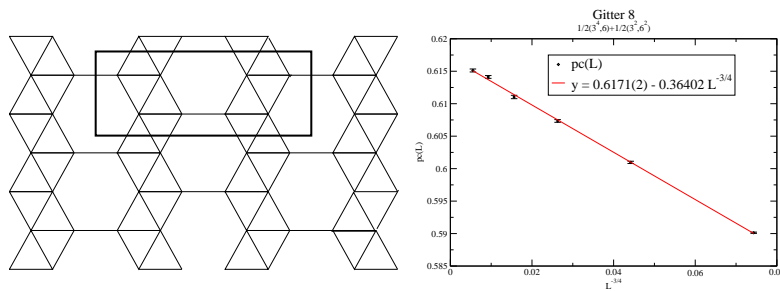
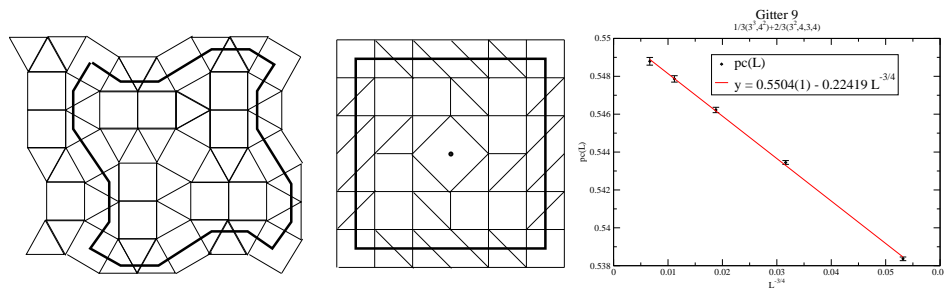
Abbildung A.9: Gitter 8:  $\frac{1}{2}(3^4, 6) + \frac{1}{2}(3^2, 6^2)$ 

Abbildung A.10: Gitter 9:  $\frac{1}{3}(3^3, 4^2) + \frac{2}{3}(3^2, 4, 3, 4)$ . Die Implementierung des Gitters wird erheblich einfacher, wenn es auf ein Quadratgitter transformiert wird, und das zentrale Loch durch einen Geistervertex gefüllt ist. Der gewählte Gitterausschnitt ist fünf Spalten breit und fünf Zeilen hoch.

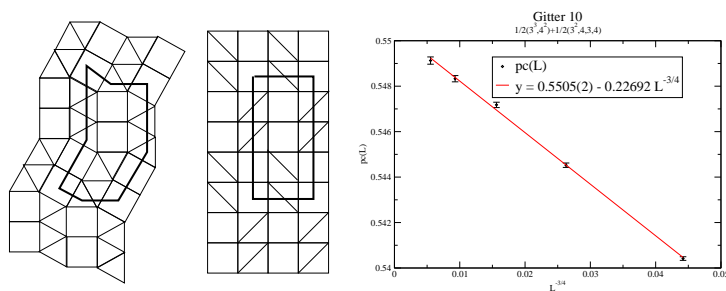


Abbildung A.11: Gitter 10:  $\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4)$ . Eine Scherung des Gitters erlaubt die Transformation auf ein Quadratgitter. Die gewählte Zelle erzeugt bei periodischer Forsetzung aber keinen rechteckigen Gitterausschnitt.

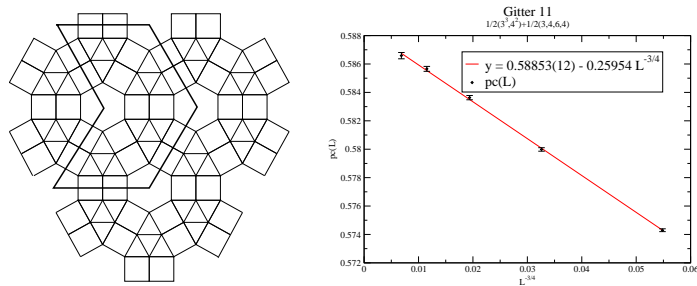


Abbildung A.12: Gitter 11:  $\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$ . Auch bei diesem Gitter lässt sich eine Substruktur identifizieren. Je vier Dreiecke bilden ein großes Dreieck, und diese Dreiecke sind auf einem Sechseckgitter angeordnet. Die Einheitszelle besteht aus vier “Supersechseck-Vertices”.

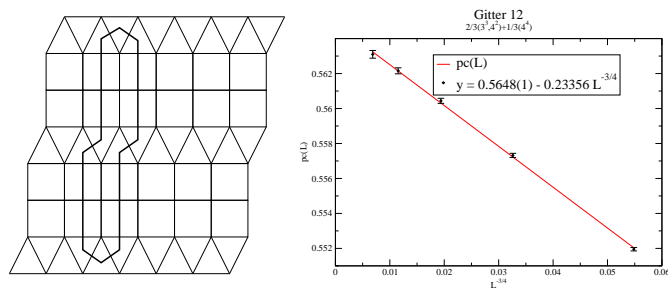


Abbildung A.13: Gitter 12:  $\frac{2}{3}(3^3, 4^2) + \frac{1}{3}(4^4)$ .

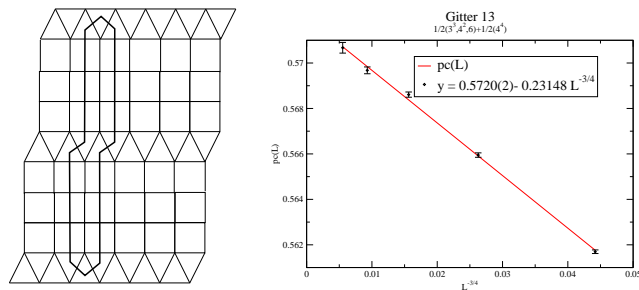


Abbildung A.14: Gitter 13:  $\frac{1}{2}(3^3, 4^2) + \frac{1}{2}(4^4)$ .



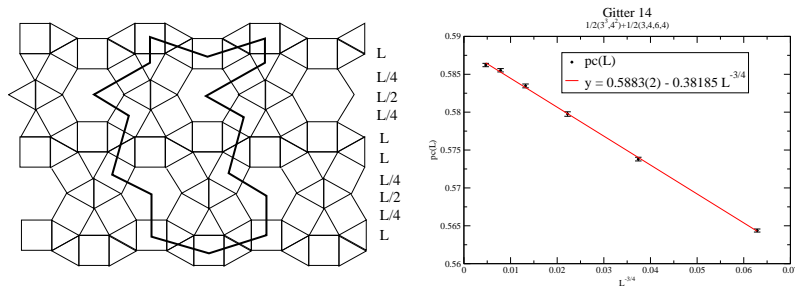


Abbildung A.15: Gitter 14:  $\frac{1}{2}(3^2, 4, 3, 4) + \frac{1}{2}(3, 4, 6, 4)$ . Die Einheitszelle dieses Gitters ist mit vier Spalten und zehn Zeilen sehr groß.

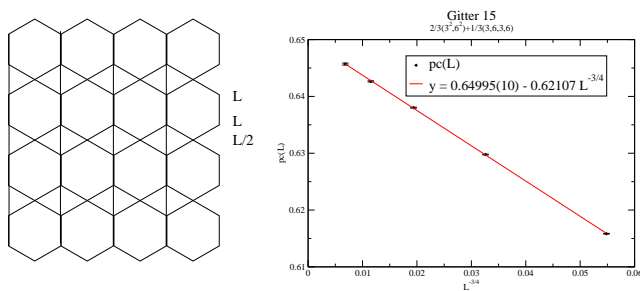


Abbildung A.16: Gitter 15:  $\frac{2}{3}(3^2, 6^2) + \frac{1}{3}(3, 6, 3, 6)$ .

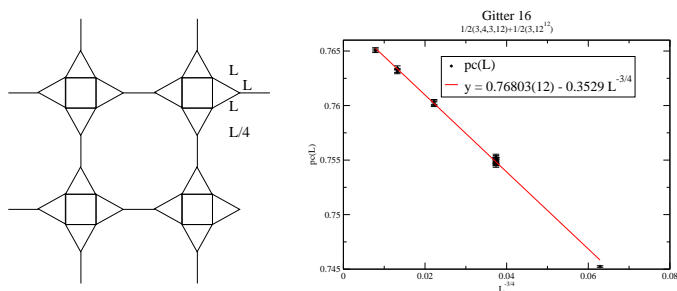


Abbildung A.17: Gitter 16:  $\frac{1}{2}(3, 4, 3, 12) + \frac{1}{2}(3, 12^2)$ . Dieses Gitter ist eine Variation des Quadratgitters. Jeder Vertex des Quadratgitters wird durch ein Quadrat und vier Dreiecke ersetzt. Die Struktur, die den Vertex ersetzt, eignet sich als Einheitszelle.

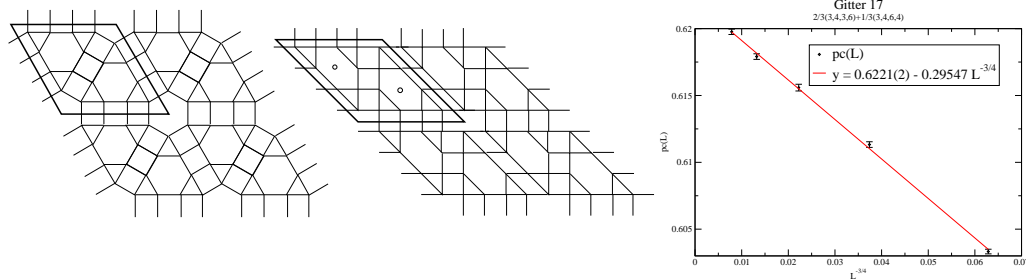


Abbildung A.18: Gitter 17:  $\frac{2}{3}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{3}(3, 4, 6, 4)$ . Das Gitter ist mit dem Sechsecksgitter verwandt. Die Strukturen, bestehend aus einem Sechseck und drei Dreiecken, entsprechen den Sechseckvertices. Zur Implementierung ist es sinnvoll, zwei solche Einheiten zusammenzufassen und zwei Geistervertices in den Sechsecken einzuführen. Der Ausschnitt ist ein Parallelogramm, und seine Fortsetzung erzeugt ein Parallelogramm und kein Rechteck.

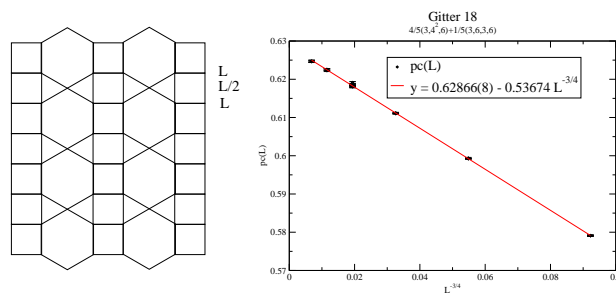


Abbildung A.19: Gitter 18:  $\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$

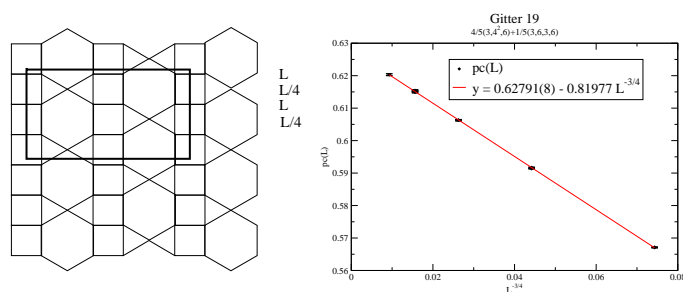


Abbildung A.20: Gitter 19:  $\frac{4}{5}(3, 4^2, 6) + \frac{1}{5}(3, 6, 3, 6)$

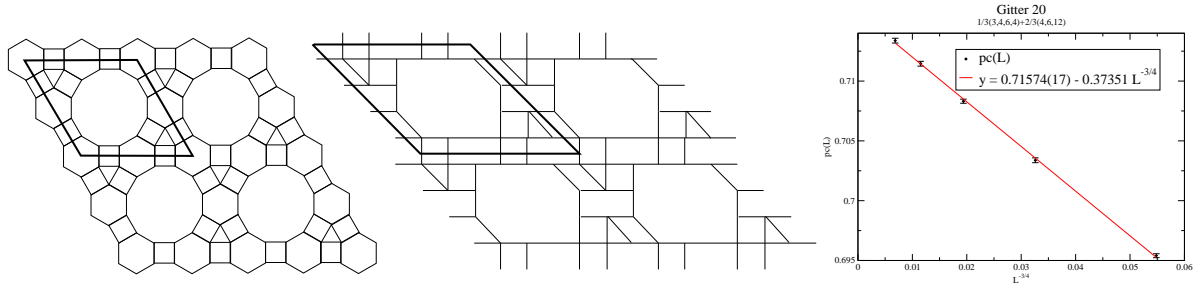


Abbildung A.21: Gitter 20:  $\frac{1}{3}(3, 4, 6, 4) + \frac{2}{3}(4, 6, 12)$ . Auch dieses Gitter lässt sich in Untereinheiten zerlegen, die auf einem Sechseckgitter angeordnet sind. Die Untereinheiten bestehen aus einem Dreieck und drei Quadraten und sind durch Sechsecke miteinander verbunden. Die gewählte Zelle ist ein Parallelogramm.

## Diskussion

Unter den 20 2-uniformen Gittern gibt es drei Paare mit identischen Euler-Charakteristiken. Gitter 18 und 19 haben identische Euler-Charakteristiken und sogar identische Vertexkonfigurationen. Trotzdem unterscheiden sich die numerischen Werte für die Perkolationschwellen um ca.  $7 \cdot 10^{-4}$ , also um mehr als 4 Standardabweichungen. Auch die Gitter 11 und 14, sowie 9 und 10, haben identische Euler-Charakteristik, unterscheiden sich aber in der Anordnung der Polygone um die Vertices und daher in der Vertexkonfiguration. Die ermittelten Perkolationschwellen der Gitter 11 und 14 bzw. 9 und 10 stimmen innerhalb der Fehlergrenzen überein.

### A.4.2 Perkolation zufällig dekorierte Gitter

In Abschnitt 4.1.5 wurde die Abhängigkeit der Perkolationsschwelle eines Gitters vom Bruchteil der dekorierten Gitterplaketten diskutiert. Auch diese Perkolationsschwellen wurden mit dem Algorithmus von Suding und Ziff bestimmt. Das Programm musste dazu entsprechend modifiziert werden. Die Länge der Nachbarschaftsvektoren  $\mathbf{nn}[i]$  muss gleich der Zahl der Nachbarn eines Vertex des vollständig dekorierten Gitters sein. Diese beträgt beim Quadratgitter  $z = 8$ , beim Sechseck-Gitter  $z = 12$ , beim Kagomé-Gitter  $z = 10$ , beim  $3^3, 4^2$ -Gitter  $z = 7$  und beim  $3, 12^2$ -Gitter  $z = 21$ . Zu Beginn des Programms wird das undekorierte Gitter erzeugt. Die Einträge der  $\mathbf{nn}[i]$ , die Verbindungen in einer dekorierten Plakette entsprechen, werden auf  $i$  gesetzt und verbinden daher keine Vertices. Die spanning probability  $\bar{p}_{sp}$  wird für das Gitter der Kantenlänge  $L$  bestimmt und anschließend ein Prozent der Plaketten dekoriert, indem die Einträge  $\mathbf{nn}[i]$  aller Vertices  $i$  auf dem Rand jeder dekorierten Plakette ergänzt werden. Dies wird solange wiederholt, bis alle Plaketten dekoriert sind. Die Plaketten werden dabei unabhängig und zufällig ausgewählt. Bei Gittern mit großen Plaketten ist die Dekoration sehr aufwendig. Zur Dekoration eines Zwölfecks im  $(3, 12^2)$ -Gitter müssen zum Beispiel  $12 \cdot 9 = 108$  Einträge der  $\mathbf{nn}[i]$  ergänzt werden.

Um die finite-size-scaling Extrapolation zu unendlich großen Gitter durchzuführen, muss

die Simulation auf Gittern verschiedener Größe wiederholt werden.

## A.5 Bestimmung des Erwartungswertes von $\lambda(c_k)$

Um die mittleren Euler-Charakteristiken von Gittern mit der Methode aus Kapitel 3 zu berechnen, müssen die Erwartungswerte der Größen  $\lambda(c_k)$  bestimmt werden. Hier wird das Programm beschrieben, das  $\langle \lambda(c_0) \rangle$  einer Ecke einer dreidimensionalen Zelle ausrechnet, wenn 3-Zellen und Flächen mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_s$  bzw.  $p_b$  besetzt werden. Alle anderen Anwendungen sind sehr ähnlich. Wenn alle 3-Zellen und Flächen, die  $c_0$  umgeben, besetzt sind, ist  $\sigma(c_0) = 1$ , andernfalls 0. Wegen dieser Bedingung sind die Beiträge der einzelnen Zellen nicht mehr unabhängig und jede Konfiguration muss einzeln abgezählt werden. Das Programm besteht aus einer Schleife über alle möglichen Konfigurationen der Zellen und Flächen, die die Ecke umgeben. Zu jeder Konfiguration wird  $\lambda(c_0)$  ausgerechnet und die Wahrscheinlichkeit der Konfiguration bestimmt.

Um aus einer gegebenen Konfiguration aus besetzten 3-Zellen und Flächen,  $\lambda_0$  zu bestimmen, muss die Anordnung der 3-Zellen und Flächen um  $c_0$  bekannt sein. Dazu werden die 3-Zellen, die  $c_0$  umgeben, durchnummeriert und jeder Fläche  $c_2$  das Paar von 3-Zellen, zwischen denen  $c_2$  liegt, zugeordnet. Entsprechend werden zu jeder Kante  $c_1$  die 3-Zellen und Flächen gespeichert, die  $c_1$  umgeben. Diese Definition der Flächen und Kanten muss per Hand im Quelltext des Programms durchgeführt werden.

Aus einer vorgegebenen Konfiguration aus besetzten 3-Zellen und Flächen lassen sich die  $\lambda$ 's aller 3-Zellen, Flächen, Kanten nach dem Gleichungen aus Kapitel 3 bestimmen. Daraus wird  $\lambda_0$  ausgerechnet. Die Wahrscheinlichkeit einer Konfiguration aus  $n$  besetzten Zellen und  $m$  besetzten Flächen ist  $p_s^n p_b^m (1 - p_s)^{N-n} (1 - p_b)^{M-m}$ , wobei  $M$  und  $N$  die Gesamtzahl der Flächen bzw. 3-Zellen ist.

$\lambda(c_0)$  ist eine ganze Zahl zwischen  $-M$  und  $N$ . Um den Erwartungswert von  $\lambda(c_0)$  zu bestimmen, muss die Anzahl der Konfigurationen mit  $n$  besetzten Vertices,  $m$  besetzten Flächen und  $\lambda(c_0) = c$  für alle  $0 < n \leq N$  und  $0 < m \leq M$  bekannt sein. Dazu wird ein Feld  $K[N+M+1][N][M]$  angelegt und der Eintrag  $K[c+M+1][n][m]$  um eins erhöht, wenn eine Konfiguration mit  $\lambda(c_0) = c$  aus  $n$  besetzten 3-Zellen und  $m$  besetzten Flächen gefunden wird. Nachdem alle Konfigurationen abgezählt sind, erhält man den Erwartungswert  $\langle \lambda(c_0) \rangle$  durch

$$\langle \lambda(c_0) \rangle_{p_s, p_b} = \sum_{c=-M}^{c=N} \sum_{n=0}^{n=N} \sum_{m=0}^{m=M} c K[c+M+1][n][m] p_s^n p_b^m (1 - p_s)^{N-n} (1 - p_b)^{M-m}. \quad (\text{A.5})$$

# Anhang B

## Rechnungen und Details

### B.1 sc-Gitter mit 18 Nachbarn

Die Vertices des sc-Gitter liegen auf den Ecken von Würfeln. Wenn die Vertices des sc-Gitters nicht nur mit ihren sechs nächsten Nachbarn, sondern auch mit den zwölf Vertices verbunden sind, die eine Flächendiagonale entfernt sind, hat jeder Vertex 18 Nachbarn. Würfel um die Vertices müssen also nicht nur über Flächen, sondern auch über gemeinsame Kanten zusammenhängen, damit sie die Gitternachbarschaften beschreiben. Andererseits dürfen Würfel nicht über Ecken verbunden sein. Die mittlere Euler-Charakteristik einer Konfiguration mit diesen Nachbarschaftsverhältnissen kann mit der Methode aus Kapitel 3 berechnet werden.

Die Würfel werden mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt und  $\langle \lambda_3 \rangle = p$ . Die  $\sigma$ 's auf Flächen und Kanten haben den Wert 1. Eine Ecke  $c_0$  hat  $\sigma(c_0) = 0$ , es sei denn, alle umliegenden Würfel sind besetzt. Wenn immer einer der beiden an eine Fläche  $c_2$  angrenzenden Würfel besetzt ist, ist  $\lambda(c_2)$  Fläche  $c_2$  eins und daher  $\langle \lambda(c_2) \rangle = \langle \lambda_2 \rangle = 1 - (1 - p)^2 = 2p - p^2$ . Entsprechend gilt für die Kanten  $\langle \lambda_1 \rangle = 1 - (1 - p)^4$ . Um  $\langle \lambda_0 \rangle$  der Ecken zu bestimmen, werden die alle Besetzungszustände der Würfel, die die Ecke umgeben, mit einem Computerprogramm (siehe Anhang A.5) abgezählt. Mit  $q = 1 - p$  erhält man

$$\langle \lambda_0 \rangle = 8pq^7 + 32p^2q^6 + 48p^3q^5 + 34p^4q^4 + 16p^5q^3 + 12p^6q^2 + 8p^7q + p^8, \quad (\text{B.1})$$

und damit für das sc-Gitter mit 18 Nachbarn

$$\chi_{18-26}^{sc}(p) = p - 9p^2 + 12p^3 - 3p^4 - p^8. \quad (\text{B.2})$$

### B.2 bcc-Gitter

Im Kapitel 3 wurde für das bcc-Gitter eine Euler-Charakteristik ausgerechnet, die nur WSZ von Gitternachbarn als benachbart zählt. Dazu mussten aber WSZ, die sich an Flächen berühren, die keiner Gitterkante entsprechen, als getrennt aufgefasst werden, solange sie keinen gemeinsamen Gitternachbarn haben. Es gibt auch Zellen, die ohne diesen Umweg

Cluster mit den Nachbarschaftsverhältnissen des Gitter erzeugen.

Im bcc-Gitter sind die nächsten Nachbarn eines Gitterpunktes die acht Ecken des umgebenden Würfels; die Ecken des Würfels sind untereinander nicht benachbart (siehe Abb. 4.12). Daher dürfen die Zellen nur mit jenen acht Zellen eine Fläche gemeinsam haben, und die Zellen der Vertices auf den Enden einer Würfelkante dürfen sich gegenseitig nur an Kanten berühren. Die vier Zellen auf den Ecken einer Fläche der Würfel müssen aber die Fläche des Würfels beinhalten, denn sonst hätte die Zelle im Inneren des Würfels eine Fläche mit der Zelle im Inneren des nächsten Würfels gemein. Eine mögliche Zelle ist in Abbildung B.1 dargestellt. Diese Zelle füllt den ganzen Raum, wenn sie um jeden Punkt des bcc-Gitters platziert wird. Wie immer werden die Zellen mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  besetzt. Die

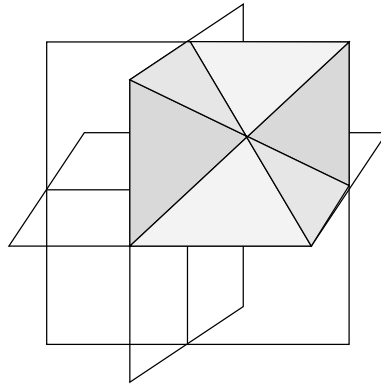


Abbildung B.1: Nicht-konvexe Zelle, die angeheftet an jeden Vertex des bcc-Gitters, den Raum füllt; die Struktur der Oberfläche ist nur in einem Oktanten gezeigt. Die Zelle hat nur mit acht weiteren Zellen einen “zweidimensionalen” Durchschnitt.

Euler-Charakteristik wurde mit der Schnittrekursion ausgerechnet. Dazu betrachtet man eine Schar von Ebenen, parallel zu den Grundflächen der Würfel. Die Euler-Charakteristik des Schnittes der Ebenen mit den besetzten Zellen ändert sich dort, wo Ober- und Unterseiten von Zellen in der Ebene liegen. Die Schnitte bestehen aus Quadraten und Kreuzen (siehe Abbildung B.2). Erstere sind horizontale Schnitte durch die Mitte einer Zelle, letztere die zwei Zellen gemeinsamen Ober- bzw. Unterseiten. Die mittlere Euler-Charakteristik des obigen Schnittes erhält man durch wiederholte Schnittrekursion (siehe Abb. B.3). Die Quadrate sind mit Wahrscheinlichkeit  $q$  besetzt, die Kreuze gehören zu zwei Zellen und sind mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^2$  besetzt. Man betrachtet Schnittgeraden parallel zu einer der Quadratseiten. Die Euler-Charakteristik des Schnittes einer solchen Geraden mit dem zweidimensionalen Schnittmuster kann sich dort ändern, wo die Gerade zwischen Quadraten oder Kreuzen liegt. Die verschiedenen Beiträge sind in Abbildung B.3 dargestellt und

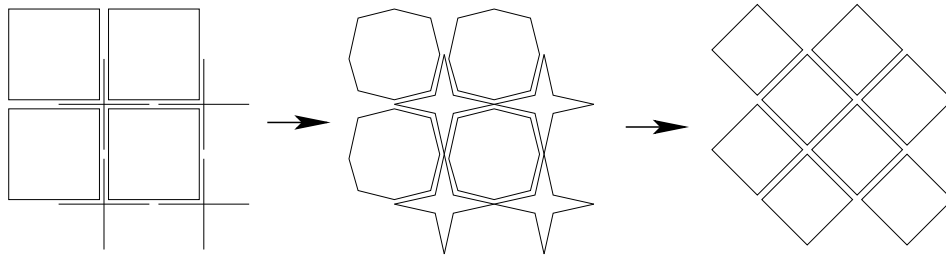


Abbildung B.2: Schnitt einer Ebene mit den Zellen des bcc-Gitters aus Abb. B.1: Links ist das Schnittmuster des Schnittes einer Ebene, in der Ober- bzw. Unterseite von Zellen liegen, mit den Zellen des bcc-Gitter gezeigt. Wandert die Ebene weiter, ändern sich die Muster wie in der Mitte und rechts skizziert. Die Euler-Charakteristik ändert sich zwischen der mittleren und rechten Situation aber nicht.

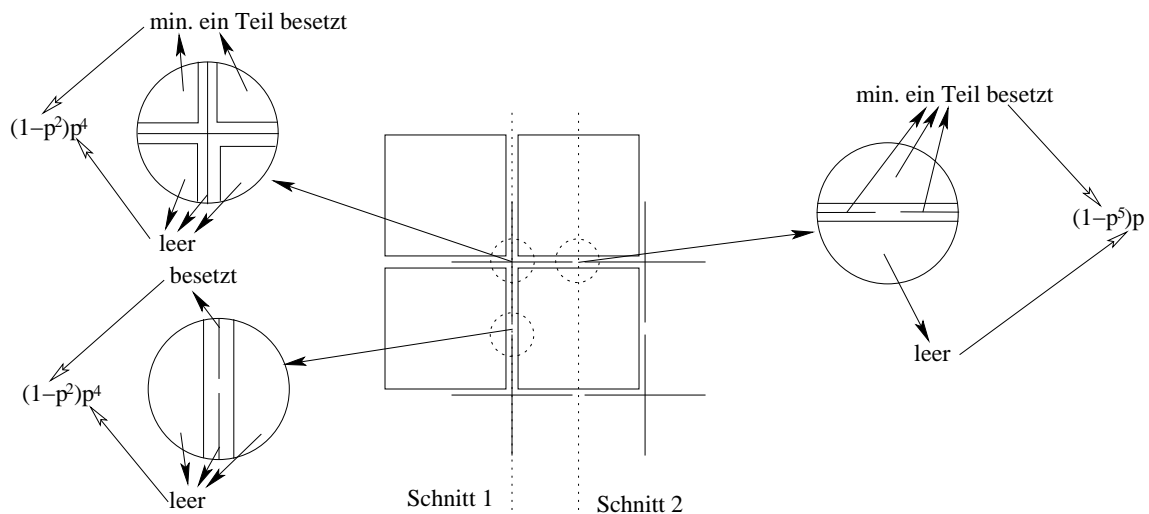


Abbildung B.3: Wiederholte Schnittrekursion für das zweidimensionale Schnittmuster. An den beiden gestrichelten Geraden (Schnitt 1 & 2) ändert sich die Euler-Charakteristik des Schnittes. Die Punkte, die Beiträge zur Euler-Charakteristik der Schnittgeraden liefern, sind in Kreisen vergrößert dargestellt. Die einzigen Konfigurationen, die Beiträge zur Euler-Charakteristik liefern, sind durch “leer” und “besetzt” beschrieben und ihre Wahrscheinlichkeit sind angegeben (vergleiche Gleichung (B.3)). Die übrigen Terme aus Gleichung (B.3) entstehen durch leicht verschobene Schnitte und lassen sich analog ablesen.

man erhält

$$\begin{aligned}
 \chi_2(q) &= \chi_1^{(1)} - \chi_1^{(1)+} + \chi_1^{(2)} - \chi_1^{(2)+} \\
 &= \frac{1}{2} [2(1-p^2)p^4 - (1-p^3)p] \\
 &\quad + \frac{1}{2} [(1-p^5)p - (1-p^3)p] \\
 &= \frac{1}{2} [-3p^6 + 4p^4 - p].
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Zu den beiden Schnitten aus Abb. B.3 tragen zwei Reihen von Zellen bei, daher der Faktor  $\frac{1}{2}$ . Die Euler-Charakteristik jedes anderen Schnittes der Ebene mit den Zellen ist die des Quadratgitters mit übernächsten Nachbarn (siehe Abbildung B.2, rechts):

$$\chi_2^+(q) = -p^4 + 2p^2 - p. \tag{B.4}$$

Pro Zellschicht gibt es zwei Schnitte dieser Art und die Euler-Charakteristik des bcc-Gitters, eingeteilt in diese Zellen, ist damit

$$\chi_{8-26}^{bcc}(p) = \bar{\chi}(q) = -3p^6 + 6p^4 - 4p^2 + p. \tag{B.5}$$

Jede Zelle hängt mit acht Zellen über eine Fläche zusammen und mit 18 weiteren über Ecken und Kanten zusammen.

## B.3 Diamantgitter

### B.3.1 Konvexe Zellen

Da das Diamantgitter ein fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis ist, bietet es sich an, als Zelle um die Vertices eine senkrecht zur Basisachse halbierte Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des fcc-Gitters zu nehmen (siehe Abb. B.4). Diese halbierten Zellen haben mehr Flächen, als ein Vertex Nachbarn hat, und die Zusammenhangsverhältnisse des Diamantgitters werden durch Wahl der  $\sigma$ -Variablen erzwungen (siehe Kapitel 3.3.2).

Die halbierten Zellen werden mit Wahrscheinlichkeit  $p = 1 - q$  besetzt und  $\langle \lambda_3 \rangle = p$ . Die oberen Rauten, in Abb. B.4 dunkelgrau gezeichnet, und die Schnittfläche entsprechen Gitternachbarschaften und haben  $\sigma^{nn} = 1$ . Zellen, die sich an anderen Flächen berühren, sollen nur zusammenhängen, wenn sie einen gemeinsamen nächsten Nachbarn haben. Für diese Flächen ist  $\sigma^{nnn}$  nur dann 1, wenn ihr gemeinsamer nächster Nachbar besetzt ist. Für die Flächen, die nächsten Nachbarn entsprechen, gilt  $\langle \lambda_2^{nn} \rangle = 1 - q^2$ , für alle übrigen Flächen

$$\langle \lambda_2^{nnn} \rangle = p(1 - q^2) + q(2p^2 + 2pq). \tag{B.6}$$

Die  $\sigma$ 's aller Kanten und Ecken sind 0, sofern nicht alle umgebenden Zellen besetzt sind und die Flächen zwischen ihnen  $\sigma = 1$  haben. Eine Zelle hat vier verschiedene Typen von Kanten, die unterschiedlich behandelt werden müssen (siehe Abb. B.4). Zum ersten Typ



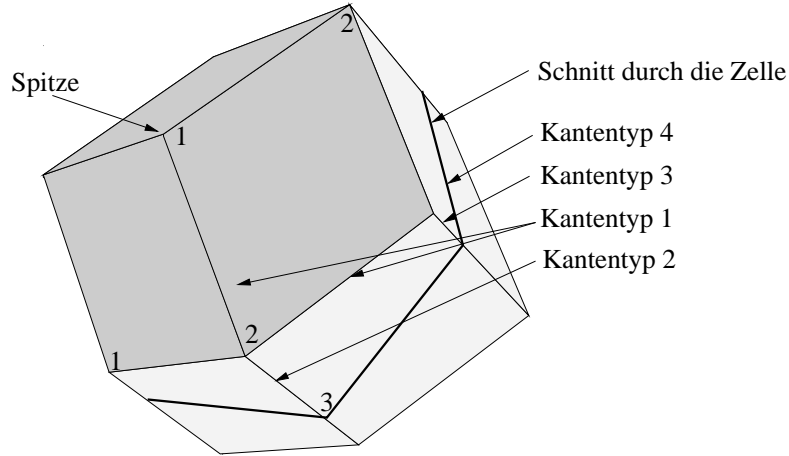


Abbildung B.4: Eine WSZ des fcc-Gitters. Die dicke Linie soll die Halbierung der Zelle andeuten. Jede Hälfte ist Zelle eines Vertex des Diamantgitters. Die Zahlen an den Ecken beziehen sich auf die verschiedenen Vertextypen; auch die verschiedenen Kantentypen sind bezeichnet (siehe Text). Die drei dunkelgrauen Flächen und die neuentstandene Schnittfläche entsprechen den Gitterkanten des Diamantgitters.

gehören die drei Kanten auf der Spitze der Zelle. Sie entsprechen den Kanten auf dem oberen Rand anderer Zellen. Daher gehören die Kanten auf der Spitze und auf dem oberen Rand der Zellen zum Typ 1. Die Kanten, die parallel zur Basisachse sind, kommen in zwei unterschiedlichen Längen vor und bilden die Typen 2 und 3. Die Kanten entlang des Schnittes seien Typ 4.

Eine Kante des ersten Typs ist in drei Zellen enthalten. Sie ist eine Kante auf der Spitze einer Zelle  $z_1$  und eine Kante auf dem oberen Rand der beiden anderen Zellen  $z_2$  und  $z_3$ . Die Zelle  $z_1$  ist gemeinsamer nächster Nachbar der Zellen  $z_2$  und  $z_3$ . Die Kante ist mindestens einmal vorhanden, wenn eine der Zellen besetzt ist. Nur wenn die Zelle  $z_1$  unbesetzt ist, und die Zellen  $z_2$  und  $z_3$  beide besetzt sind, ist  $\lambda_1^{T1} = 2$ .

$$\langle \lambda_1^{T1} \rangle = (1 - q^3) + qp^2 \quad (\text{B.7})$$

Zur Veranschaulichung führen wir für die verbleibenden Typen je einen Graphen ein, dessen Vertices den die Kante umgebenden Zellen entsprechen. Die Verbindungen zwischen den Vertices entsprechen den Flächen zwischen den Zellen (siehe Abb. B.5). Vertices sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt, die Verbindungen sind, abhängig von anderen Zellen, mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten präsent. Kanten des Typs 2 sind die langen Kanten parallel zur Basisachse. Um eine solche Kante sind drei Zellen angeordnet, und je zwei der Zellen haben einen gemeinsamen Gitternachbarn. D.h. Vertices und Kanten des entsprechenden Graphen sind unabhängig voneinander mit Wahrscheinlichkeit  $p$  vorhanden (linker Graph in Abb. B.5). Kanten des Typs 3 sind die kurzen Kanten parallel zur Basisachse. Die Kante ist Teil von drei Zellen, die alle den gleichen gemeinsamen Gitternachbarn haben. Alle Verbindungen des Graphens sind daher mit Wahrscheinlichkeit  $p$  vorhanden (mittlerer Graph

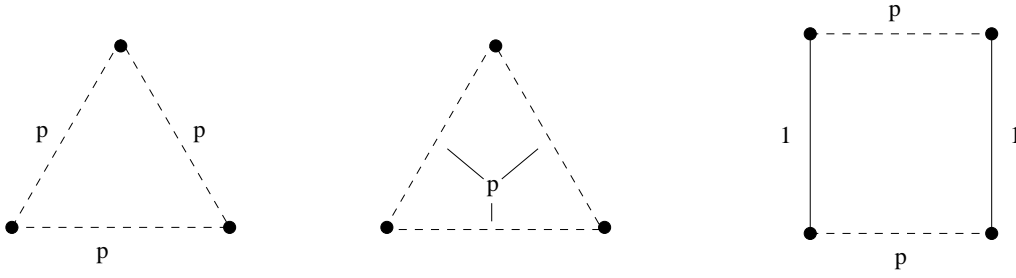


Abbildung B.5: Links der Graph des Kantentyps 2: Die drei Vertices und Verbindungen existieren unabhängig voneinander mit Wahrscheinlichkeit  $p$ . In der Mitte der Graph des Kantentyps 3: Die drei Vertices sind unabhängig voneinander jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt; mit Wahrscheinlichkeit  $p$  sind alle Vertices verbunden. Rechts der Graph des Kantentyps 4: Die Vertices sind mit Wahrscheinlichkeit  $p$  besetzt, senkrechte Verbindungen existieren immer und waagerechte mit Wahrscheinlichkeit  $p$ .

in Abb. B.5). Kanten des Typs 4 sind die durch die Halbierung der fcc-WSZ entstandenen Schnittkanten. Eine Kante des Typs 4 wird von vier Zellen umgeben, von denen die Zellen, die zu einer fcc-WSZ gehören, Gitternachbarn sind. Die zwei Zellen auf der einen und auf der anderen Seite der Schnittebene haben je einen gemeinsamen Gitternachbarn (rechter Graph in Abb. B.5).  $\lambda_1$  berechnet sich aus den Besetzungszuständen der Zellen und Flächen (Vertices und Kanten dieser Graphen). Durch Abzählen aller Konfigurationen erhält man:

$$\langle \lambda_1^{T2} \rangle = \frac{p^3(1 - q^3) + 3p^2q(p^3 + 4p^2q + 3pq^3)}{+ 3pq^2(2p^3 + 5p^2q + 3pq^2) + q^3(3p^3 + 6p^2q + 3pq^2)} \quad (\text{B.8})$$

$$\langle \lambda_2^{T3} \rangle = \frac{p(1 - q^3) + q(3p^3 + 6p^2q + 3pq^2)}{p^2(1 - q^4) + 2pq(p^4 + 6p^3q + 9p^2q^2 + 4pq^3)} \quad (\text{B.9})$$

$$\langle \lambda_2^{T4} \rangle = \frac{p^2(1 - q^4) + 2pq(p^4 + 6p^3q + 9p^2q^2 + 4pq^3)}{+ q^2(2p^4 + 8p^3q + 10p^2q^2 + 4pq^3)} \quad (\text{B.10})$$

Es gibt 3 Typen von Vertices, die unterschiedlich zur Euler-Charakteristik beitragen (siehe Abb. B.4). Die Spitze einer Zelle ist gleichzeitig eine tiefliegende Ecke auf dem oberen Rand von drei anderen Zellen. Diese Vertices seien Typ 1. Die höherliegenden Vertices auf dem oberen Rand seien Typ 2 und die durch die Halbierung der fcc-WSZ entstandenen Vertices Typ 3. Die Umgebungen der Vertices lassen sich wiederum durch Graphen anschaulich darstellen (siehe Abb. B.6). Jeder Vertex des Graphens entspricht einer Zelle und jede Verbindung einer Fläche. Die Flächen des Graphens entsprechen den Kanten, die die Ecke umgeben.

Vertextyp 1 wird von vier Zellen umgeben, von denen eine der gemeinsame nächste Nachbar der drei anderen ist. Diese Zelle ist die Spitze des Tetraeders in Abb. B.6. Sobald der Vertex auf der Spitze des Tetraeders besetzt ist, sind die Verbindungen in der Grundfläche vorhanden, und es kann nur eine Komponente entstehen, die keine Löcher hat. Wenn immer die Spitze besetzt ist, ist  $\lambda = 1$ . Ist die Spitze unbesetzt, sind die drei verbleibenden Vertices

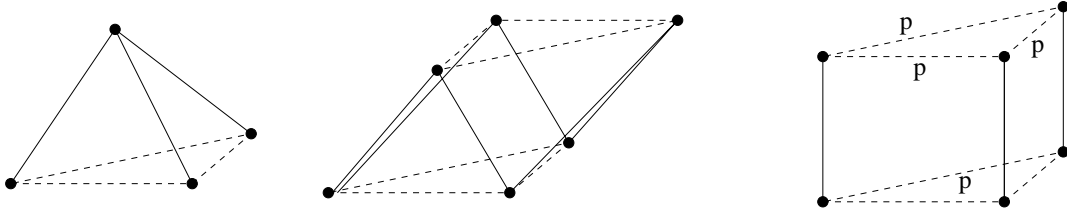


Abbildung B.6: Die Graphen der drei Vertextypen: Der Graph von Typ 1 (links) besteht aus den Vertices eines Tetraeders, dessen Spitze mit allen anderen Vertices verbunden sind. Die Vertices der Grundfläche sind untereinander nur verbunden, wenn die Spitze besetzt ist. In der Mitte ist der Graph von Vertextyp 2 dargestellt. Er besteht aus einer Schleife von sechs Vertices. Übernächste Vertices sind verbunden, wenn der Vertex zwischen ihnen besetzt ist. Der Graph von Vertextyp 3 (rechts) ist ein Prisma dreieckiger Grundfläche. Senkrechte Verbindungen existieren immer, die der Kopffläche jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $p$  und die der Fußfläche alle mit Wahrscheinlichkeit  $p$ .

isoliert. Den isolierten Vertices entsprechen isolierte Zellen, die je 1 zu  $\lambda_0$  beitragen, und man erhält

$$\langle \lambda_0^{T1} \rangle = p + q(3p^3 + 6p^2q + 3pq^2). \quad (\text{B.11})$$

Um einen Vertex vom Typ 2 sind zweimal drei Zellen angeordnet, die keine Gitternachbarn sind. Je ein Vertex der einen Dreiergruppe ist gemeinsamer Gitternachbar zweier Vertices der anderen Dreiergruppe. Der Graph von Typ 2 besteht daher aus einem Zyklus von sechs Vertices, indem Verbindungen von Vertex  $i - 1$  zu Vertex  $i + 1$  hinzugefügt werden, wenn Vertex  $i$  besetzt ist. Diese Anordnung wird im Computerprogramm (siehe Kapitel A.5) implementiert. Das Ergebnis ist:

$$\langle \lambda_0^{T2} \rangle = 6pq^5 + 24p^2q^4 + 36p^3q^3 + 24p^4q^2 + 6p^5q + p^6. \quad (\text{B.12})$$

Ein Vertex von Typ 3 liegt auf dem Schnitt, der die fcc-Zelle halbiert. Er ist von drei Paaren von Vertices umgeben, die zu einer fcc-WSZ gehören und daher Gitternachbarn sind. Die drei Zellen auf der einen Seite des Schnittes haben einen gemeinsamen Gitternachbarn, von denen auf der anderen Seite haben je zwei einen gemeinsamen Gitternachbarn. Der Graph von Vertextyp 3 ist ein Prisma dreieckiger Grundfläche, dessen senkrechte Verbindungen immer, die im oberen Dreieck jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $p$  und die im unteren Dreieck alle mit Wahrscheinlichkeit  $p$  existieren. Die Konfigurationen wurden mit dem Computerprogramm abgezählt und man erhält

$$\begin{aligned} \langle \lambda_0^{T3} \rangle = & 6q^9p + 51q^8p^2 + 186q^7p^3 + 379q^6p^4 + 468q^5p^5 \\ & + 355q^4p^6 + 162p^7q^3 + 45q^2p^8 + 10qp^9 + p^{10} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Die Anzahl der Flächen, Kanten und Ecken pro Zelle ist schnell bestimmt und alternierendes Aufsummieren liefert

$$\chi_{4-19}^{\text{Diamant}}(p) = p(1 - p)(p^8 + p^7 + p^6 + p^5 - 4p^4 + 2p^3 - p^2 - p + 1). \quad (\text{B.14})$$

### B.3.2 Geteilte primitive Einheitszellen

Um der Topologie des Diamantgitters mit seinen vier nächsten Nachbarn Rechnung zu tragen, ohne die Zusammenhangsverhältnisse “künstlich” zu erzwingen, ist eine Zelle nötig, die nur mit den Zellen der vier Gitternachbarn eine Fläche gemeinsam hat. Hierzu betrachtet man die primitive Einheitszelle des fcc-Gitters. Dieses Parallelepiped füllt den gesamten Raum, wenn es an jeden Gitterpunkt des fcc-Gitters angeheftet wird. Wird das Diamantgitter als fcc-Gitter mit zweiatomiger Basis auf diese Weise zerlegt, liegt ein Gitterpunkt an einem spitzen Ende des Parallelepiped, der andere innerhalb. Verschiebt man das Parallelepiped entlang der durch die Basis ausgezeichneten Richtung soweit, dass beide Basisatome symmetrisch in ihm liegen, kann man das Parallelepiped derart teilen, dass in jeder Hälfte ein Vertex des Diamantgitters liegt (siehe Abb. B.7). Die Teilung muss so erfolgen, dass drei der Flächen des Parallelepipeds zu einer Zelle, die übrigen zur anderen Zelle gehören. Um die Berechnung der Euler-Charakteristik zu erleichtern, ist es zweckmäßig, das Gitter derart zu deformieren, dass aus dem Parallelepiped ein Würfel wird. Das ändert nicht die Topologie, sondern nur die Abstände der Gitterpunkte.

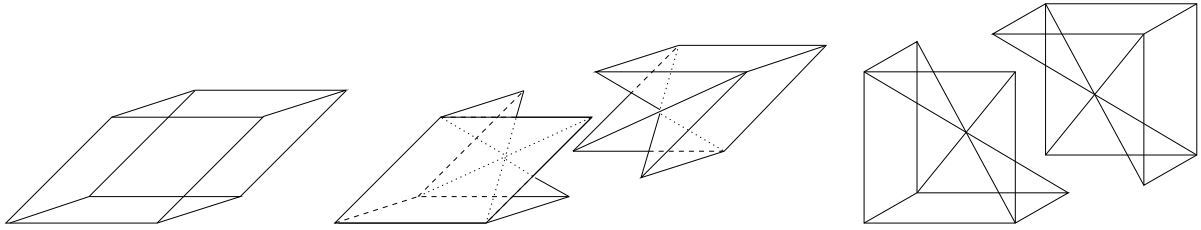


Abbildung B.7: Das Parallelepiped und seine Teilung; Teilung des zu einem Würfel deformierten Parallelepipeds

Die Fläche, die durch die Teilung entsteht, ist nicht eben. Der Beitrag der Fläche, ohne die äußeren Würfelkanten, zur Euler-Charakteristik ist aber wie bei einer ebenen Fläche ohne Rand gleich 1. Besetzt man die Zellen mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$ , so ist eine Fläche, ob eben oder nicht, mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^2$  vorhanden. Jede Würfelkante gehört zu sechs Zellen und ist daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^6$  Teil einer Figur aus mit Wahrscheinlichkeit  $q$  besetzten Zellen. Eine Ecke eines Würfels ist in 14 Zellen enthalten und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^{14}$  vorhanden. Pro Zelle gibt es vier Flächen, die jeweils zu zwei Zellen gehören, neun Würfelkanten, die jeweils zu sechs Zellen gehören, und sieben Würfecken, die jeweils zu 14 Zellen gehören. Für die Euler-Charakteristik erhält man

$$\begin{aligned} \chi_{4-47}^{diamond}(p) &= \bar{\chi}(q) = \frac{1}{2}(1 - p^{14}) - \frac{3}{2}(1 - p^6) + 2(1 - p^2) - (1 - p) \\ &= -\frac{p^{14}}{2} + \frac{3p^6}{2} - 2p^2 + p \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Die Zellen haben mit nur vier anderen Zellen eine gemeinsame Fläche und diese Flächen entsprechen den Gitternachbarschaften im Diamantgitter. Allerdings haben diese Zellen

sehr viele Nachbarn, mit denen sie über Kanten oder Ecken zusammenhängen. Zur Ermittlung der Zahl der Nachbarn einer Zelle betrachtet man den Einheitswürfel, bestehend aus zwei Zellen, und alle 26 umliegenden Würfel. Das sind zusammen 54 Zellen, von denen nur sechs nicht mit der betrachteten Zelle benachbart sind. Weiter entfernte Zellen sind nicht mit der Zelle benachbart. Eine Zelle hat also mit 47 anderen Zellen einen nichtleeren Durchschnitt.

## B.4 fcc-Gitter

### B.4.1 Wigner-Seitz-Zelle

Die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des fcc-Gitters ist ein rhombisches Dodekaeder. Die WSZ hat zwölf Flächen, 24 Kanten und 14 Ecken. Wir besetzen die WSZ eines fcc-Gitters mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$ . Eine Fläche ist immer dann belegt, wenn eine der beiden WSZ, zu denen diese Fläche gehört, besetzt ist, und daher mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^2$  vorhanden. Jede Kante ist Teil von drei WSZ und mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^3$  vorhanden. Von den 14 Ecken gehören sechs Ecken zu sechs WSZ und die übrigen acht Ecken zu vier WSZ. Erstere sind mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^6$  belegt, letztere mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p^4$ . Für die Euler-Charakteristik erhält man damit

$$\begin{aligned}\chi(p) = \bar{\chi}(q) &= (1 - p^6) + 2(1 - p^4) - 8(1 - p^3) + 6(1 - p^2) - (1 - p) \\ &= p - 6p^2 + 8p^3 - 2p^4 - p^6.\end{aligned}\tag{B.16}$$

### B.4.2 Prismen als Zellen des fcc-Gitters

Das fcc-Gitter ist ein Stapel gegeneinander verschobener Quadratgitter (siehe Kapitel 4.3.3). Die Vertices einer Ebene liegen in der Mitte der Plaketten der darüber und darunter liegenden Ebenen. Die Nachbarn eines Vertex des fcc-Gitters sind die Nachbarn im Quadratgitter seiner Ebene, sowie die Vertices auf dem Rand der Plaketten über und unter ihm. Legt man um die Vertices raumfüllende Prismen quadratischer Grundfläche, so haben diese Prismen nur mit Gitternachbarn eine Fläche gemein. In ihrer Ebene sind das die vier Seitenflächen, in den Ebenen darunter und darüber überlappen die Prismen an den Kopf- bzw. Fußflächen mit je vier Prismen. Im Unterschied zu WSZ haben die Prismen aber nur vier weitere Nachbarn, mit denen sie über die senkrechten Kanten der Prismen zusammenhängen. Die Euler-Charakteristik wurde mit der Schnittrekursion berechnet. Die Euler-Charakteristik des Schnittes einer Ebene mit den besetzten Zellen ändert sich nur zwischen zwei Prismenebenen. Die Euler-Charakteristik dieses Schnitts wird durch wiederholte Schnittrekursion bestimmt. Die Terme, die zur Euler-Charakteristik beitragen, sind in Abbildung B.8 skizziert. Jeder andere Schnitt hat die mittlere Euler-Charakteristik des Quadratgitters mit übernächsten Nachbarn. Für die Euler-Charakteristik des fcc-Gitters

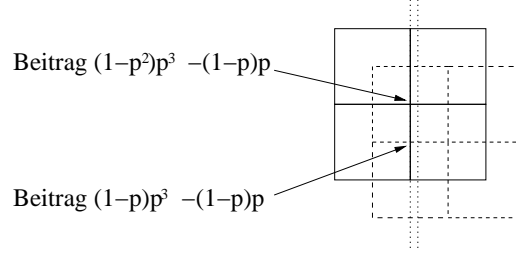


Abbildung B.8: Schnitt zwischen zwei Schichten von Prismen. Die Wahrscheinlichkeiten der einzigen beiden Konfigurationen, die zur Euler-Charakteristik beitragen, sind angegeben. Durchgezogene Quadrate sind Fußflächen der einen Prismenschicht, die gestrichelten Quadrate die Kopfflächen der anderen Schicht. Die Prismen sind jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $q = 1 - p$  besetzt.

erhält man

$$\begin{aligned}
 \chi_{12-16}^{fcc}(p) &= \bar{\chi}(q) = \bar{\chi}_2(q) - \bar{\chi}^{sq}(q) \\
 &= 2 \left[ (1 - p^2)p^3 + (1 - p)p^3 - 2qp^2 \right] - [-p^4 + 2p^2 - p] \\
 &= -2p^5 - p^4 + 8p^3 - 6p^2 + p
 \end{aligned} \tag{B.17}$$

## B.5 Bond-site-Perkolation

Um die Euler-Charakteristik eines bond-site-Perkulationsprozesses auszurechnen, müssen (siehe Kapitel 3.3.1) die Erwartungswerte  $\langle \lambda_i \rangle$  der unterschiedlichen Zellen berechnet werden.

### B.5.1 Dreiecksgitter

Das duale Gitter des Dreiecksgitters ist das Sechseckgitter. Die Sechsecke sind mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$  besetzt und für Sechsecke gilt  $\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} = p_s$ . Es gibt drei Kanten pro Sechseck und jede Kante ist mit Wahrscheinlichkeit  $p_b$  besetzt. Daher ist  $\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b} = (1 - (1 - p_s)^2)p_b - 2p_s(1 - p_b) = 2p_s - p_b p_s^2$ . Jede Ecke ist von drei Sechsecken und drei Kanten umgeben. Diese Anordnung ist einfach zu implementieren (siehe Kapitel A.5), und das Programm liefert

$$\langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b} = p_s^3 p_b^3 - 3p_s^2 p_b + 3p_s. \tag{B.18}$$

Für die Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem Dreiecksgitter erhält man

$$\begin{aligned}
 \chi^{tr}(p_s, p_b) &= \langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} - 3 \langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b} + 3 \langle \lambda_0 \rangle_{p_s, p_b} \\
 &= p_s - 3p_b p_s^2 + 2p_b^3 p_s^3.
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

### B.5.2 fcc-Gitter

Um die Euler-Charakteristik des fcc-Gitters zu bestimmen, besetzen wir die WSZ des Gitters mit Wahrscheinlichkeit  $p_s$ . Zwei besetzte WSZ sind über eine gemeinsame Fläche mit Wahrscheinlichkeit  $p_b$  verbunden. Aus Kapitel 3.3.1 haben wir  $\langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b} = p_s$  und  $\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} = 2p_s - p_b p_s^2$ . Eine Kante der WSZ gehört zu drei Zellen und  $\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b}$  ist daher gleich  $\langle \lambda_0^{tr} \rangle_{p_s, p_b}$  des Dreiecksgitters. Insgesamt hat eine WSZ 24 Kanten und damit acht pro Zelle.

Acht der 14 Ecken der WSZ gehören zu vier WSZ, deren Mittelpunkte auf einem Tetraeder angeordnet sind. Die Flächen zwischen den WSZ entsprechen den Kanten des Tetraeders. Die vier Zellen, sechs Flächen und vier Kanten, die eine solche Ecke umgeben, müssen im Quelltext des Programms definiert werden. Abzählen aller Konfigurationen liefert:

$$\langle \lambda_0^1 \rangle_{p_s, p_b} = 3p_b^4 p_s^4 - 6p_b^5 p_s^4 + 2p_b^6 p_s^4 + 4p_b^3 p_s^3 - 6p_b p_s^2 + 4p_s. \quad (\text{B.20})$$

Die anderen sechs Ecken der WSZ gehören zu sechs WSZ. Die Mittelpunkte der sechs Zellen liegen auf den Ecken eines Oktaeders. Die zwölf Kanten des Oktateders entsprechen den Flächen zwischen den Zellen, und die acht Flächen entsprechen den Kanten, die die Ecke umgeben. Das Programm aus Kapitel A.5 liefert

$$\langle \lambda_0^2 \rangle_{p_s, p_b} = 6p_s - 12p_b p_s^2 + 8p_b^3 p_s^3 - p_b^{12} p_s^6. \quad (\text{B.21})$$

Die Euler-Charakteristik der bond-site-Perkolation auf dem fcc-Gitter ist damit:

$$\begin{aligned} \chi^{fcc}(p_s, p_b) &= -\langle \lambda_3 \rangle_{p_s, p_b} + 6\langle \lambda_2 \rangle_{p_s, p_b} - 8\langle \lambda_1 \rangle_{p_s, p_b} + 2\langle \lambda_0^1 \rangle_{p_s, p_b} + \langle \lambda_0^2 \rangle_{p_s, p_b} \\ &= p_s - 6p_b p_s^2 + 8p_b^3 p_s^3 - 2p_b^6 p_s^4 - p_b^{12} p_s^6. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$





# Literaturverzeichnis

- [1] T. Banchoff, *Fundamenta Mathematicae* (1970), 475.
- [2] G. Bredon: *Topology and Geometry*. Springer-Verlag, 1993.
- [3] A. Coniglio, C. Rosanna, F. Peruggi und L. Russo, *J. Phys. A* **10** (1977), 205.
- [4] J.M. D. Stoyan, W.S. Kendall: *Stochastic Geometry and its Applications*. WILEY, 1996.
- [5] J. Essam, *J. of Math. Phys.* **20** (1979), 1769.
- [6] J.W. Essam. In *Phase Transition and Critical Phenomena*, herausgegeben von C. Domb und M. S. Green, Band 2. Academic Press London (1972), Seiten 197–270.
- [7] J.W. Essam und M.E. Fisher, *Reviews of Modern Physics* **42** (1970), 272.
- [8] C.M. Fortuin und P.W. Kastelyn, *Physica* **57** (1972), 536.
- [9] G.R. Grimmett: *Percolation*. Springer, 1999.
- [10] Grünbaum und Shepart: *Tilings and Patterns*. W. H. Freeman and Company, 1986.
- [11] H. Hadwiger, *J. Reine und Angew. Math.* **194** (1955), 101.
- [12] H. Hadwinger: *Vorlesungen über Inhalt, Oberfläche und Isoperimetrie*. Springer, Berlin, 1957.
- [13] H. Hsu und M. Huang, *Phys. Rev. E* **60** (1999), 6361.
- [14] B.D. Hughes: *Random Walks and Random Environments*, Band 2. Oxford Science Publications, 1999.
- [15] T. Jung: *Statistische Morphologie bei Perkulationsmodellen*. Diplomarbeit an der LMU, 2000.
- [16] C. Likos, K. Mecke und H. Wagner, *J.Chem.Phys.* **102** (1995), 9350.
- [17] T. Luczak und J.C. Wierman, *J. of Phys. A* **21** (1988), 3131.

- [18] S. van der Marck, *Phys. Rev. E* **55** (1997), 1514.
- [19] S. van der Marck. *The site and bond percolation thresholds of the Archimedean lattices and their duals* (2003). Private communication.
- [20] K. Mecke und A. Seyfried, *Europhys. Lett.* **58** (2002), 28.
- [21] K.R. Mecke: *Integralgeometrie in der Statistischen Physik*. Verlag Harri Deutsch, 1994.
- [22] K.R. Mecke und H. Wagner, *J. Stat. Phys.* **64** (1991), 843.
- [23] R. Meester und R. Roy: *Continuum percolation*. Cambridge University Press, 1996.
- [24] M.V. Men'shikov und K.D. Pelikh, *Matematicheskie Zametki* **46** (1989), 38.
- [25] S. Mertens, *J. Stat. Phys.* **58** (1990), 1095.
- [26] J. Milnor: *Morse Theory*. Princeton University Press, 1969.
- [27] M. Newman und R. Ziff, *Phys. Rev. E* **64** (2001), 016706.
- [28] L. Santaló: *Integral Geometry and Geometric Probability*. Addison-Wesley, 1976.
- [29] H. Scher und R. Zallen, *J. Chem. Phys* **53** (1970), 3759.
- [30] D. Stauffer und A. Aharony: *Perkolationstheorie*. VCH, 1995.
- [31] P. Suding und R. Ziff, *Phys. Rev. E* **60** (1999), 275.
- [32] M. Sykes und J. Essam, *J. of Math. Phys.* **5** (1964), 1117.
- [33] Y.Y. Tarasevich und S. van der Marck, *Int. J. of Modern Physics C* **10** (1999), 1193.
- [34] U. Alon, I. Balberg und A. Drory, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991), 2879.
- [35] J.A. Šaškin: *Ecken, Kanten, Flächen*. Verlag Harri Deutsch, 1989.
- [36] H. Wagner und K. Mecke. *Euler Characteristic for Archimedean lattices* (2002). Private communication.
- [37] R. van de Weygaert: *Voids and the Geometry of large scale Structure*. Phd. thesis, 1991.
- [38] J.C. Wierman, *J. Phys. A.* **17** (1984), 1525.
- [39] J.C. Wierman. In *Disorder in Physics – A Volume in Honour of John M. Hammersley*, herausgegeben von G. R. Grimmett und D. J. A. Welsh. Clarendon Press (1990), Seiten 349–360.
- [40] J.C. Wierman, *Combinatorics, Probability and Computing* **4** (1995), 181.

- [41] M. Yanuka und R. Englman, *J. Phys. A* **23** (1990), L339.
- [42] F. Yonezawa, S. Sakamoto, S. Nosé und M. Hori, *J. of Non-Crystalline Solids* **106** (1988), 262.
- [43] R. Zallen: *The Physics of Amorphous Solids*. John Wiley & Sons, 1983.



# Danksagung

Zuvorderst gebührt mein Dank Herrn Prof. Wagner für die interessante Aufgabenstellung und die intensive Betreuung. Seine vielfältigen Ideen und Anregungen haben entscheidend zu dieser Arbeit beigetragen.

Claus Beisbart bin ich für das sorgfältige Lesen der Arbeit und viele sprachliche wie inhaltliche Korrekturen sehr dankbar. Während des gesamten Jahres haben fruchtbare Diskussionen mit ihm der Arbeit immer wieder neue Impulse gegeben. Auch mit Klaus Mecke vom MPI für Metallforschung aus Stuttgart habe ich während seiner Aufenthalte in München interessante Diskussionen geführt und wertvolle Anregungen erhalten, für die ich ihm danken möchte. Desweiteren möchte ich allen anderen Mitarbeitern des Lehrstuhls für die freundliche Atmosphäre und das angenehme Arbeitsumfeld danken. Das gilt im Besonderen für Stefano Cerrito, der ein Jahr mit mir ein Büro geteilt hat.

Steven van der Marck hat mir seine unveröffentlichten Simulationsergebnisse für die bond-Perkolationsschwellen archimedischer Gitter und die site-Perkolationsschwellen der modifizierten Quadrat- und Kagomé-Gitter überlassen. Erst mit diesen Daten konnten überzeugende Gegenbeispiele gefunden werden. Der Kontakt zu van der Marck ist über Robert Ziff zustande gekommen. Beiden möchte ich an dieser Stelle dafür danken.

Meinen Eltern möchte ich für ihre langjährige finanzielle und ideelle Unterstützung danken. Ohne diese Unterstützung hätten finanzielle Sorgen mein Studium beträchtlich verlängert und ein intensives Studium erschwert, wenn nicht gar unmöglich gemacht.