

**Übungen zur Vorlesung „Physik auf dem Computer“
Sommersemester 2018**

Übungsgruppenleiter:

Robin Bardakcioglu – rhb@itp1.uni-stuttgart.de; Do. 14:00 – 15:30 Uhr, 5.331

Johannes Reiff – jreiff@itp1.uni-stuttgart.de; Di. 14:00 – 15:30 Uhr, 4.141

Matthias Feldmaier – fem@itp1.uni-stuttgart.de; Do. 14:00 – 15:30 Uhr, 4.141

Übungsblatt 7 Ausgabe: 06. Juni 2018

Dienstagsübung: schriftliche Abgabe 10.06.18, Besprechung 12.06.18

Donnerstagsübungen: schriftliche Abgabe 12.06.18, Besprechung 14.06.18

Aufgabe 18: Diffusionsbeschränktes Wachstum

In dieser Übung sollen Ideen der Zufallsbewegung mit solchen des Wachstums auf einem Gitter kombiniert werden. Das Modell, das wir im folgenden untersuchen werden, ist unter dem Namen *diffusion limited aggregation* (DLA) bekannt. Wir stellen uns etwa vor, dass Atome unter thermischem Einfluss auf einer Kristalloberfläche umherwandern können. Diese Wanderung modellieren wir durch einen *random walk*. Ein Atom *random walker* kann sich jetzt an einen Wachstumskeim anlagern, d. h. einen der Nachbarplätze *growth sites* eines bereits besetzten Gitterplatzes belegen, der zu Programmbeginn im Zentrum eines Gitters angelegt wurde. Dadurch kann z. B. zweidimensionales Kristallwachstum simuliert werden.

Da ein aus dem Unendlichen kommendes Teilchen einen Kreis mit minimalem Radius um diesen ‘Kristall’ an einer zufälligen Stelle durchstößt, beginnen wir die *random walks* direkt auf diesem kleinstmöglichen Kreis. Zeit geht allerdings dadurch verloren, dass der *walk* sich wieder vom Aggregat entfernen kann und es unter Umständen lange dauern kann, bis er wieder zurückkehrt. Daher wird er verworfen und neu gestartet, sobald er sich genügend weit vom wachsenden Aggregat entfernt hat (bei uns der doppelte Aggregatradius).

Ein Programmgerüst, welches das oben beschriebene Modell implementiert, finden Sie in der Datei *dla.cc* auf der Website der Vorlesung.

ToDo: Vervollständigen Sie das Programm und stellen Sie einige Aggregate graphisch dar.

(5 Punkt(e), Votier)

Aufgabe 19: Fraktale Dimension

Erweitern Sie das Programm für die Berechnung der Ausdehnung des Objekts, gegeben durch den Gyrationradius

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \langle \vec{r} \rangle_N)^2} \quad (1)$$

und geben Sie in jedem Wachstumsschritt die Masse M (= Teilchenzahl N) und den Radius R_g in eine Datei aus.

ToDo: Tragen Sie in doppelt-logarithmischer Darstellung die Masse des wachsenden Objektes als Funktion des Radius auf. Bestimmen Sie dann die fraktale Dimension d_f als asymptotische Steigung (in logarithmischer Darstellung $\log M$ über $\log R_g$) für ausreichend große Radien:

$$M \sim R_g^{d_f} \quad (2)$$

(5 Punkt(e), Votier)

Machen Sie eine Kopie der Ausgabedaten, denn Sie werden noch in der nächsten Aufgabe benötigt.

Aufgabe 20: Modellvarianten

(1): Endliche Anlagerungswahrscheinlichkeit.

Fügen Sie eine Änderung in das Programm ein, so dass eine Anlagerung an das wachsende Aggregat nur noch mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit p stattfindet. Der Einfachheit halber wollen wir zulassen, dass ein *walker* sich auch auf bereits belegten Plätzen weiterbewegen kann.

ToDo: Beschreiben Sie in Ihren Worten die morphologische Änderungen für kleiner werdendes p (etwa $p = 0.5$, $p = 0.3$, $p = 0.15$). Bestimmen Sie wiederum d_f aus einer Darstellung der Masse gegen den Radius. Machen Sie sich im Zweifel die Änderungen dadurch deutlicher, dass Sie die neuen Daten zusammen mit denjenigen aus Aufgabe 30 auftragen. Was fällt Ihnen bezüglich Masse bei gleichem Radius sowie Verhalten der Masse als Funktion des Radius auf?

(5 Punkt(e), Votier)

(2): Kleinerer Entweichradius.

Setzen Sie die Anlagerungswahrscheinlichkeit wieder auf den Wert $p = 1$. Ändern Sie den Radius des Kreises, jenseits dessen die *random walks* verworfen und wieder neu gestartet werden, auf kleinere Werte (bis in die unmittelbare Nähe des Startkreises).

ToDo: Welche Änderungen ergeben sich an der Form der Aggregate? Wiederholen Sie die Analyse der Masse aus 2(ii) und beschreiben Sie das Resultat.

(5 Punkt(e), Votier)