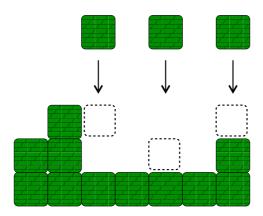
## Übungen zur Computerorientierten Physik

## 1 Ballistische Deposition

Einfaches Modell für Sputter Deposition von Atomen auf Oberfläche, hier eindimensional. Es ist charakterisiert durch

- $\bullet\,$ Eine Systemgröße L=laterale Ausdehnung der Oberfläche.
- Teilchen fallen an zufällig ausgewählten Spalten runter.
- Sie stoppen, wenn sie erstmals ein Teilchen unten/links/rechts berühren  $\rightarrow$  es können Lücken entstehen.



- $\bullet$  Ein Sweep bedeutet: L Teilchen fallen.
- Es gelten periodische Randbedingungen: Spalte 0 und L-1 sind benachbart.

Laden Sie dazu ballistic\_fragment.c vom StudIP. Das Programm enthält:

- Realisierung des Gitters: ein Array h[...] der Größe L um Höhen zu speichern (initial alle 0): nur die obersten Atome werden gespeichert (SOS=solid on solid model).
- Eine Function void depose(int size, int h[]) die genau ein Atom fallen lässt.
- ullet Ein geeignetes vollständiges Hauptprogramm main(). Die Systemgröße L, die Zahl der Sweeps, sowie die Zahl der unabhängigen Simulationsläufe werden als Parameter übergeben.

Aufgaben:

- Verstehen Sie das vorhandene Programm.
- Implementieren Sie eine Struktur, die als Elemente zwei Fließkommazahlen mean und roughness enthält.
- Programmieren Sie eine Funktion analysis(...) um die die mittlere Höhe  $\langle h \rangle$  und Rauhigkeit  $W = \sqrt{\langle h^2 \rangle \langle h \rangle^2}$  auszuwerten. Dabei ist  $\langle ... \rangle$  das Mittel über alle Spalten. Die beiden Ergebnisse sollen in der Struktur zurückgegeben werden. Überlegen Sie sich, welche Aufrufparameter die Funktion benötigt.
- Messen Sie die Rauhigkeit als Funktion der Sweeps. Führen Sie dazu 100 Läufe mit jeweils 100 sweeps (oder mehr) für kleine Systeme wie L=10,20,50 (oder größere) durch.
- Benutzen Sie das Programm gnuplot, um sich die Ergebnisse anzusehen.

  (Wenn in der Datei rough10.dat die Rauhigkeit (4. Spalte) mit Fehler (5. Spalte) als Funktion der Sweepzahl (1. Spalte) steht, kann man mit Eingabe von plot "rough10.dat" using 1:4:5 w e in gnuplot das Ergebnis plotten. Entsprechend für die mittlere Höhe)
- Welches Verhalten beobachten Sie für mittlere Höhe und Rauhigkeit?

  Benuten Sie die gnuplot fit Funktion um für die Rauhigkeit das Verhalten für kurze Zeiten zu bestimmen.

Wie verhält sich die Rauhigkeit für lange Zeiten als Funktion der Systemgröße L?