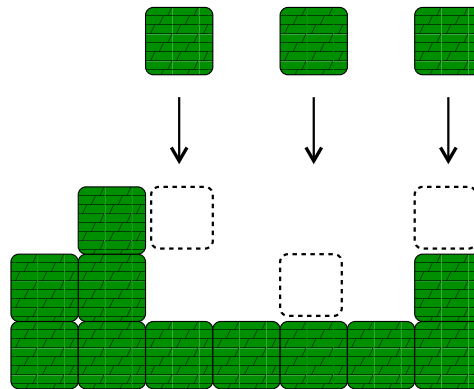


Übungen zur Computerorientierten Physik

1 Ballistische Deposition

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

- 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 → es können Lücken entstehen.



- 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), darunter liegende Lücken werden ignoriert.
- Eine Funktion `void depose(int size, int h[])` die genau ein Atom fallen lässt.
- 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 mittlere Höhe $\langle h \rangle$ und Rauigkeit $W = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2}$ auszuwerten. Dabei ist $\langle \dots \rangle$ 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 Rauigkeit als Funktion der Sweeps. Führen Sie dazu 100 Läufe (oder mehr) mit jeweils 1000 sweeps für kleine Systeme wie $L = 50, 100, 200$ (oder größere) durch. Leiten Sie die Ergebnisse in Dateien um z.B. mit
`ballistic 50 1000 100 > rough50.dat.`
- Benutzen Sie das Programm *gnuplot*, um sich die Ergebnisse anzusehen.
(Wenn in der Datei `rough50.dat` die Rauigkeit (4. Spalte) mit Fehler (5. Spalte) als Funktion der Sweepzahl (1. Spalte) steht, kann man mit Eingabe von
`plot "rough50.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 Rauigkeit?
Benutzen Sie die *gnuplot fit* Funktion um für die Rauigkeit das Verhalten für kurze Zeiten zu bestimmen.
Wie verhält sich die Rauigkeit für lange Zeiten als Funktion der Systemgröße L ?