

Modelos de Crescimento de Interfaces Rugosas

Tales José da Silva

Novembro de 2001

**Modelos de Crescimento
de
Interfaces Rugosas**

TALES JOSÉ DA SILVA

Orientador: Prof. JOSÉ GUILHERME MOREIRA

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS
GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de
DOUTOR EM FÍSICA.

Novembro de 2001

Agradecimentos

Ao José Guilherme, pela orientação;

À Cláudia, pelo carinho;

À família e aos amigos, pelo apoio e incentivo;

Ao Jafferson, Américo e Alcides pela manutenção das máquinas;

Ao pessoal do LCC/CENAPAD, pelas várias horas de computação;

Ao CNPq, pela ajuda financeira.

Índice

RESUMO

ABSTRACT

1	INTRODUÇÃO	1
2	Dinâmica de Crescimento de Interfaces Rugosas	5
2.1	Introdução	5
2.2	Relação de Escala	5
2.3	Equações de Crescimento, Simetrias e Equação de Edwards-Wilkinson . . .	11
2.4	A equação de Kardar-Parisi-Zhang	16
2.4.1	Existência de dois termos não-lineares: a equação KPZ anisotrópica	18
2.4.2	Invariantes do estado transiente em $d = 1$	19
2.4.3	Invariantes do estado estacionário em $d = 1$	23
2.5	Efeitos de tamanho finito	24
3	Modelos de Crescimento de Interfaces	26
3.1	Introdução	26
3.2	Deposição Aleatória - Modelo DA	26
3.3	Modelo com Relaxação Superficial - EW	28
3.3.1	Simulações em $d = 1$	30

3.3.2	Simulações em $d = 2$	32
3.4	Modelo com Recusa - KK	34
3.4.1	Simulações em $d = 2$	38
3.5	Modelo de Deposição Balística - DB	40
3.6	Classes de Universalidade	45
4	<i>Crossover na equação KPZ</i>	46
4.1	Introdução	46
4.2	O diagrama de fases	46
4.3	O modelo PJ	47
4.4	O modelo AF	48
4.5	O modelo YKS	51
4.6	Argumentos de Escala para o crossover em $d = 1$	53
4.7	Argumentos de Escala para $\omega(L, t, \frac{D\lambda}{\nu})$	55
5	Modelo com Relaxação Restrita	57
5.1	Introdução	57
5.2	Descrição do modelo	57
5.3	Comportamento de escala em $d = 1$	58
5.4	Comportamento do Estado Transiente em Sistemas Grandes	61
5.5	Estado transiente em $d = 2$	66
6	MODELO EW-KK	68
6.1	Introdução	68
6.2	Simulações em $d = 1$	69
6.2.1	Simulações em pequena escala	69

6.2.2	Simulações em larga escala	72
6.2.3	Comportamento de t_c em função da não-linearidade	75
6.3	Simulações em $d = 2$	77
6.3.1	Simulações em pequenas escalas	78
6.3.2	Simulações do estado transiente em $L = 2000$ sítios	86
7	Modelo DB-KK	87
7.1	Introdução e Motivação	87
7.2	Descrição do Modelo DB-KK	89
7.3	<i>Crossover</i> no modelo DB-KK	89
7.4	A simetria <i>up-down</i> em $p = p^*$	94
7.5	Correções Logarítmicas para $\omega(L, t) \sim t^\beta$ em $p = p^*$	95
8	Deposição em Bicamadas	99
8.1	Introdução	99
8.2	Resultados em $d = 1$	101
8.2.1	Resultados em pequenas escalas	101
8.2.2	Simulações em larga escala	103
8.3	Simulações em $d = 2$	105
9	Conclusões e Perspectivas	108
A	Momentos e Cumulantes de uma distribuição	111
	REFERÊNCIAS	114

Resumo

O evolução temporal da rugosidade de interfaces geradas durante processos de crescimento geralmente apresenta três comportamentos distintos: quando as primeiras camadas são depositadas, o crescimento temporal da rugosidade indica ausência de correlações laterais; para tempos curtos, ocorre um crescimento com o tempo de deposição segundo uma lei de potência, com denominado expoente de crescimento; e em tempos longos o sistema atinge o estado estacionário. Neste estado, a rugosidade permanece constante em um valor de saturação que depende do tamanho do sistema também como uma lei de potência, que define o expoente da rugosidade. Estes dois expoentes indicam qual classe de universalidade um processo pertence. Estudamos, através de simulação computacional em $(1 + 1)$ e $(2 + 1)$ dimensões, processos que contêm duas cinéticas ou dois tipos de partículas. O nosso principal interesse é o estudo do *crossover* entre a classe de universalidade de Edwards-Wilkinson (EW) e a classe de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). No limite contínuo, estas classes são definidas por uma equação diferencial estocástica linear, a EW e não-linear, a KPZ. Resultados anteriores de simulação computacional mostram um *crossover* com uma variação contínua dos expoentes. Neste trabalho, obtivemos resultados semelhantes aos da literatura em simulações em pequenos tamanhos. Simulações para tamanhos suficientemente grandes revelam outra espécie de *crossover*, previamente observada em soluções numéricas da equação KPZ: o processo comporta-se na classe de universalidade EW em tempos curtos e, após um lento *crossover* atinge o comportamento característico da classe KPZ no limite assintótico. Além do comportamento temporal da rugosidade, comportamentos do coeficiente de assimetria *skewness* e da curtose dão suporte ao principal resultado deste trabalho.

Abstract

The temporal evolution of the interface roughness generated by growth processes generally shows three distinct behaviors. When the first layers are deposited, the roughness grows as a function of time indicating the absence of lateral correlations; for short times, there is a power-law growth as a function of the deposition time which is described through the growth exponent. In the steady state, where the roughness approaches a saturation value, there is a power-law dependence of roughness as a function of the system size with the roughness exponent. These exponents might predict which universality class a model belongs to. In this work, we do numerical simulations in (1+1) and (2+1) dimensions of processes that have two kinetics, or two kinds of particles. Our main goal is to observe the crossover between the Edwards-Wilkinson (EW) and the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) universality classes. In the coarse-grained limit, these classes are described through stochastic differential equations: the EW and KPZ equations. In the literature, there are some works with the same goal of this work, where the crossover between EW and KPZ classes is characterized by a continuous variation of the scaling exponents. In this work, we only observe continuous variations of the scaling behavior in small systems simulations. On the other hand, in large systems simulations, we find another kind of crossover, which was previously reported in numerical solutions of the KPZ equation: the EW growth exponent is found in short times and, in the asymptotic limit, the KPZ exponent appears for any value of the nonlinearity. The temporal behaviors of the asymmetry coefficient (skewness) and the kurtosis give support to the main result of this work.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

O estudo de superfícies e interfaces rugosas sob o ponto de vista da mecânica estatística e geometria fractal tem recebido considerável atenção nos últimos anos [1-7]. A morfologia de grande parte das interfaces que separam diferentes meios contém flutuações que dependem localmente de vários fatores. Tais interfaces aparecem desde a escala atômica, por exemplo, em processos de crescimento por epitaxia de feixe molecular (*molecular beam epitaxy*-MBE) [3], até a escala quilométrica em perfis montanhosos [8].

Grande parte das superfícies rugosas apresentam flutuações na altura que são invariantes por escala. A grandeza que mede diretamente essas flutuações é a rugosidade, ou largura da interface. Na formação dessas superfícies, a rugosidade cresce com o tempo segundo uma lei de potência (com o expoente denominado expoente de crescimento) até o valor de saturação, encontrado quando o sistema atinge o estado estacionário. O valor de saturação da rugosidade depende do tamanho linear do sistema também segundo uma lei de potência com o expoente da rugosidade. A dependência do tempo de saturação com o tamanho do sistema define o expoente dinâmico sistema. Há ainda um quarto expoente, denominado expoente de Hurst, que está relacionado com o caráter fractal (auto-afim) [9, 10] da interface de crescimento. O expoente de Hurst é definido através do comportamento da rugosidade com a escala de comprimento e está relacionado com a dimensão fractal do perfil [11]. Geralmente, e em todos os modelos deste trabalho, o expoente de Hurst é igual ao expoente da rugosidade. Os expoentes de crescimento, dinâmico e da rugosidade definem a classe de universalidade do processo em estudo.

O conceito de universalidade desempenha um papel importante no estudo de interfaces rugosas. Inicialmente desenvolvido no estudo de transições de fase e fenômenos críticos, a universalidade reúne processos que possuem características fundamentais semelhantes, como simetrias e interações entre partículas vizinhas. Os expoentes do comportamento

de escala da rugosidade indicam a universalidade do processo, pois dependem de características fundamentais e não de detalhes, como pequenas variações entre alguns parâmetros físicos, geometria de rede, etc. Portanto tais expoentes possibilitam a importante relação entre teoria, simulação computacional e experimentos.

Simulações computacionais de vários modelos revelam os comportamentos da rugosidade descritos acima. Exemplos são o modelo de deposição aleatória com relaxação superficial [12, 13], modelo de deposição com recusa [14], modelo de deposição balística (DB) [15, 16], o modelo de Eden [17], de difusão (Wolf-Villain) [18], etc. Muitos modelos tem sido propostos com motivação experimental, como processos modelos para MBE [3] e ataque químico em superfícies (“*etching*”) [19, 20].

Experimentalmente, graças aos avanços das técnicas de espalhamento de raios-X rasante, de microscopia (tunelamento e força atômica) e de vídeo-microscopia, os comportamentos da rugosidade (espacial e/ou temporal) tem sido observados em várias situações [21]. Através de microscopia de tunelamento (*scanning tunneling microscopy*-STM), comportamentos auto-afins da rugosidade foram observados em experimentos de ataque iônico em superfície de grafite [22] e de ferro [23] e em processos de deposição de vapor de ouro [24]. Através de microscopia de força atômica (*atomic force microscopy*-AFM), destacamos as análises do comportamento de escala da rugosidade em experimentos de crescimento epitaxial de *GaAs* [25], eletrodeposição de prata [26] e de cobre [27], ataque químico em superfícies de silício [28] e crescimento de filmes de diamante [29]. Estudos através de espalhamento de raios-X rasantes também fornecem informações sobre o comportamento de escala da rugosidade em várias situações, como por exemplo, em crescimento de multi-camadas de *GaAs/AlGaAs* por MBE [30], multicamadas de *W/Si* [31] e *Fe/Au* [32] crescidas por *sputtering*. Através de vídeo-microscopia, algumas interfaces propagando-se em meios desordenados podem ser estudadas, como combustão direcionada de papel [33] e também em experimentos de eletrodeposição [34].

Do ponto de vista teórico, processos de crescimento podem ser descritos por equações diferenciais estocásticas que procuram descrever as flutuações existentes na superfície. Tais equações podem ser lineares, como a equação de difusão com um termo aleatório, que chamaremos de equação de Edwards-Wilkinson, EW [12], ou não-lineares, como a equação de Kardar-Parisi-Zhang [35] conhecida como equação KPZ. Equações de crescimento definem as classes de universalidade. Os expoentes que definem os comportamentos estático e dinâmico da rugosidade podem ser obtidos das através de análise de Fourier, para as equações lineares, e grupo de renormalização, para a equação KPZ em $d = 1$. Em muitos casos, os expoentes só são obtidos através de soluções numéricas.

Este trabalho apresenta resultados de simulação computacional de modelos de crescimento de interfaces rugosas. Em geral, simulações são realizadas com partículas obedecendo uma única cinética. Porém, grande parte de processos reais de deposição envolvem mais de uma cinética ou várias espécies de partículas, o que justifica um estudo nessa direção. O interesse em simulações contendo dois ou mais tipos de partículas está registrado em vários

trabalhos, onde destacamos Shapir *et al.* [36], El-Nashar e Cerdeira [37] e Horowitz *et al.* [38, 39]. Neste trabalho, apresentamos resultados de simulação computacional de modelos de crescimento discretos envolvendo mais de uma cinética ou dois tipos de partículas. O nosso principal objetivo é estudar o comportamento de escala da rugosidade no *crossover*¹ entre um modelo linear e um modelo não-linear, onde a não-linearidade de interesse é a de Kardar-Parisi-Zhang. Acreditamos que, no limite contínuo, estes processos podem ser descritos pela equação KPZ com a magnitude do termo não-linear variável.

A principal questão é: qual o comportamento dos expoentes de um sistema pertencente à classe de universalidade da equação KPZ em função da magnitude do termo não-linear? Resultados de soluções numéricas [40, 41] apontam para um *crossover* caracterizado pela variação contínua dos expoentes. Também, nesta linha, alguns trabalhos de simulação de modelos de crescimento [42, 43] também apontam o mesmo resultado. Já este trabalho analisa o *crossover* entre os comportamentos linear e não-linear através de simulações de sistemas com tamanho médio, onde resultados existentes na literatura são recuperados, e em grandes escalas, onde observamos uma outra espécie *decrossover* em que para tempos curtos o sistema comporta-se na classe de universalidade linear e, em tempos assintóticos, na não-linear. O comportamento efetivo ora observado em sistemas com tamanho médio deve-se principalmente aos fortes efeitos do tamanho finito do sistema, uma vez que o estado estacionário é atingido mais rapidamente neste limite, o que torna, então, impossível, a obtenção do tipo de *crossover* visto quando o tamanho do sistema é suficientemente grande.

Este trabalho está dividido em mais 8 capítulos e 1 apêndice. O Capítulo 2 introduz os conceitos teóricos necessários para a compreensão dos resultados.

O Capítulo 3 introduz os modelos discretos de nosso interesse e a obtenção de suas classes de universalidade, baseada em grandezas definidas no Capítulo 2.

O Capítulo 4 traz uma revisão dos trabalhos que estão na mesma direção que este, especialmente o trabalho de Grossmann *et al.*, onde este *crossover* foi estudado teoricamente, através de análise de escala. Ainda neste capítulo, apresentamos uma adaptação nesse cálculo de análise de escala para envolver grandezas que são obtidas em nossas simulações.

No Capítulo 5, apresentamos o modelo com relaxação restrita, que é um processo de deposição envolvendo apenas um tipo de partícula, seus resultados de simulação nos guiaram para a interpretação geral deste trabalho

O Capítulo 6 apresenta o modelo EW-KK, que é um processo de crescimento que envolve um processo de deposição linear (EW) e um processo pertencente à classe KPZ, não-linear.

O Capítulo 7 apresenta o modelo DB-KK, onde cinéticas com não-linearidades de sentidos opostos são combinadas.

¹mudança de comportamento entre dois regimes

O Capítulo 8 introduz o modelo bicamadas, proposto com a motivação em processos reais de deposição em bicamadas.

O Capítulo 9 apresenta as principais conclusões e sinaliza algumas perspectivas de continuação deste trabalho.

O apêndice A mostra as definições de algumas grandezas estatísticas utilizadas neste trabalho.

Capítulo 2

Dinâmica de Crescimento de Interfaces Rugosas

2.1 Introdução

Neste capítulo, os principais conceitos teóricos envolvendo crescimento de superfícies rugosas são apresentados. Abordamos a validade da relação de escala de Family-Vicsek e sua importância na determinação da classe de universalidade. Examinamos também a descrição dos processos de crescimento no limite contínuo, particularizando para as classes de universalidade de nosso interesse. Posteriormente, introduzimos os coeficientes que medem assimetrias nas distribuições de flutuações de altura os quais estão relacionados com as simetrias do processo de crescimento e, dessa forma, com as classes de universalidades.

2.2 Relação de Escala

Considere um processo de crescimento de superfícies rugosas (*roughening*) genérico onde partículas incidem normalmente sobre um substrato. As partículas encontram a superfície de crescimento (ou o substrato, em condições iniciais) e ficam sujeitas a interações que por sua vez introduzem correlações no sistema, geralmente suavizando a interface. O comportamento dinâmico de tais correlações constituem o objeto de nosso interesse e podem ser quantificadas usando conceitos de mecânica estatística e geometria fractal. A Figura 2.1 ilustra uma situação genérica onde novas partículas são depositadas e passam a fazer parte da interface. Devido às correlações entre as colunas, tais partículas devem se alocar em sítios vizinhos com o objetivo de suavizar a interface.

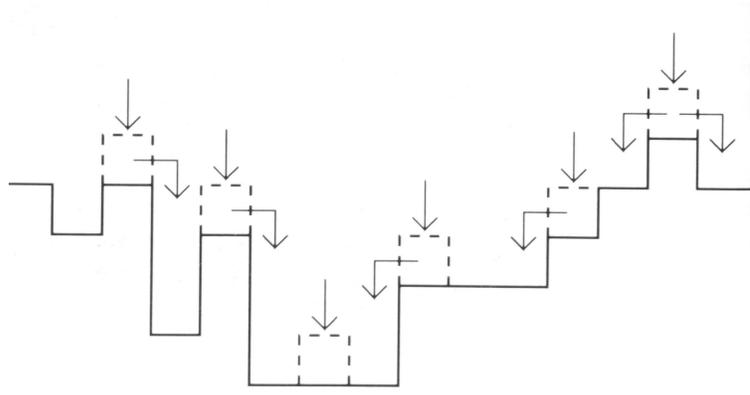


Figura 2.1: Processo genérico de deposição de partículas onde há suavização da interface de crescimento. Extraído de Barabási e Stanley [3].

Nos modelos computacionais para processos de crescimento [1-7], a interface de crescimento é definida pelo conjunto discreto $\{h_i(t)\}$ que é a altura no sítio i no tempo t , medida no referencial do substrato. O tamanho L do sistema é um parâmetro importante e limita o sistema a L^d sítios, onde d é a dimensão do substrato.

A altura média no tempo t , considerando uma distribuição uniforme de deposição, é dada por

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} h_i(t) \quad , \quad (2.1)$$

e a dispersão do conjunto $\{h_i(t)\}$, chamada rugosidade ω , é definida por

$$\omega^2(L, t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^{L^d} (h_i - \bar{h})^2 \quad . \quad (2.2)$$

O principal interesse não se encontra no valor da rugosidade de um sistema mas sim no comportamento temporal e espacial desta grandeza. Quando iniciamos o crescimento, partindo de uma superfície lisa, as correlações ainda são pequenas o que faz com que o sistema siga decorrelacionado como uma deposição aleatória, onde a rugosidade cresce como uma lei de potência da forma [3]

$$\omega \sim t^{1/2} \quad . \quad (2.3)$$

Já em tempos intermediários, quando o sistema vai se correlacionando, a rugosidade passa a se comportar como

$$\omega \sim t^\beta \quad \text{com} \quad \beta \neq 1/2 \quad , \quad (2.4)$$

onde β é denominado expoente de crescimento. Geralmente $\beta < 1/2$, pois as interações existentes entre sítios vizinhos levam à suavização da superfície, o que torna o crescimento temporal de ω mais lento que o caso decorrelacionado. Caso, contrário, quando $\beta > 1/2$, o sistema pode atingir uma situação instável [3].

As correlações são quantificadas por dois comprimentos de correlação ξ_{\perp} e ξ_{\parallel} que são os comprimentos nas direções perpendicular e paralela ao substrato, respectivamente. O comprimento ξ_{\parallel} cresce com o tempo e, quando atinge o tamanho L do sistema, faz com que a rugosidade sature em ω_{sat} . É esperado, pelo comportamento de ξ_{\parallel} , que o valor de ω_{sat} dependa do tamanho L do sistema. Tal dependência é também na forma de lei de potência

$$\omega_{sat}(L) \sim L^{\alpha} . \tag{2.5}$$

O expoente α é denominado expoente da rugosidade e, nos casos que estudaremos, é igual ao expoente de Hurst do perfil auto-afim gerado.

A Figura 2.2 mostra o resultado da simulação para um modelo com relaxação superficial (que será descrito no capítulo 3) em um substrato com $L = 100$ sítios, onde podemos ver os três comportamentos distintos da rugosidade. Em (a), vemos o caráter decorrelacionado inicial, correspondente à equação 2.3; em (b), a rugosidade cresce mais lentamente com o tempo do que em (a), mas ainda como lei de potência, e em (c) temos o estado estacionário, onde a rugosidade satura em ω_{sat} .

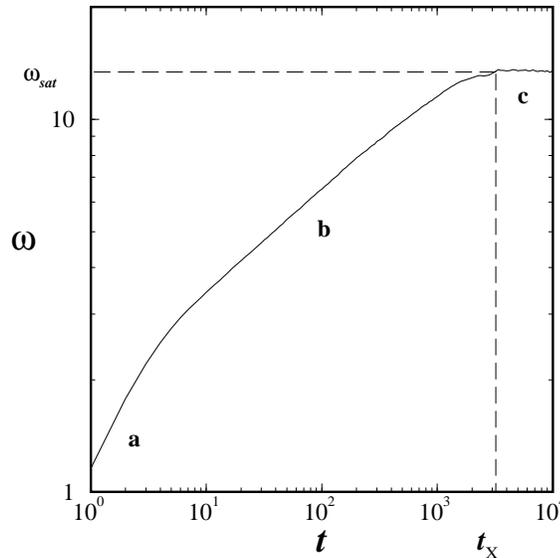


Figura 2.2: Comportamento temporal típico da rugosidade. A região **a** mostra o limite decorrelacionado inicial, em **b** vemos o comportamento temporal de ω como (2.4), para em **c** atingir a saturação, valor que depende do tamanho do sistema através de (2.5). Esta curva é resultado da simulação do modelo com relaxação superficial, que será introduzido na seção 3.3.

A passagem do comportamento da região **b** para a região **c**, ocorre no tempo característico

t_{\times} que depende do tamanho do sistema L como

$$t_{\times}(L) \sim L^z \quad , \quad (2.6)$$

onde $z = \alpha/\beta$ é o expoente dinâmico.

A Figura 2.3a mostra o comportamento temporal da rugosidade do modelo com relaxação superficial (ver capítulo 3) para vários tamanhos L . O expoente β pode ser obtido da curva com $L = 800$ no intervalo longe da saturação, e o expoente α é extraído do gráfico da Figura 2.3b, que é o comportamento de $\omega_{sat}(L)$ vs. L .

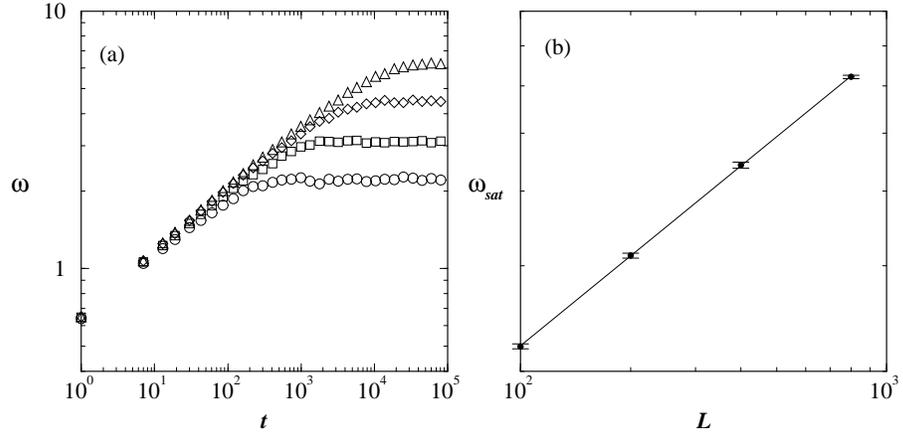


Figura 2.3: Em (a), gráfico de $\omega(L, t)$ vs. t para $L = 100(\circ), 200(\square), 400(\diamond), 800(\triangle)$ do modelo com relaxação restrita (detalhado no capítulo 3). Em (b), mostramos o comportamento da rugosidade no estado estacionário.

Em 1984, Family e Vicsek [44] propuseram uma relação de escala para a rugosidade que é a forma de colapsar os dados da figura 2.3a em uma mesma curva, mostrando o caráter universal (independente de L) do comportamento da rugosidade. Se estas colapsarem em uma única curva com os expoentes α e z significa que estes expoentes podem definir uma classe de universalidade.

A seguir, verificaremos a validade da relação de escala de Family-Vicsek, FV daqui para a frente, nos resultados de simulação apresentados na figura 2.3.

Inicialmente dividimos a rugosidade $\omega(L, t)$ pelo seu valor no estado estacionário $\omega_{sat}(L)$ para cada tamanho L . Este processo fará com que as curvas para os vários comprimentos L se concentrem no mesmo patamar quando $t \rightarrow \infty$, como mostrado na Figura 2.4a. A seguir, dividimos o tempo t pelo tempo característico t_{\times} de forma que todas as curvas saturem no mesmo tempo e colapsem, como mostra a Figura 2.4b. Se realmente houver

um colapso das curvas, significa que

$$\frac{\omega(L, t)}{\omega_\infty(L)} = f\left(\frac{t}{t_\times}\right) , \quad (2.7)$$

onde $f(x)$ é independente de L . Usando as relações (2.5) e (2.6), obtemos a relação de

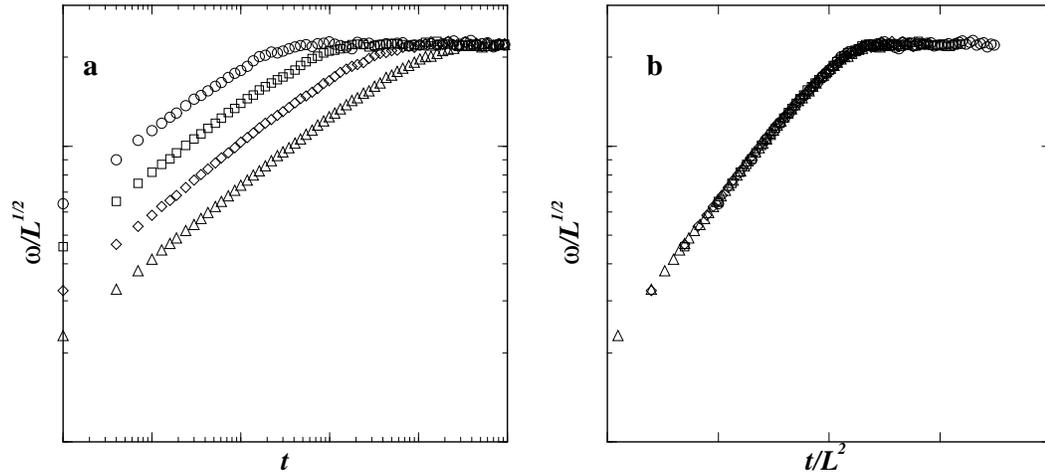


Figura 2.4: Obtenção da relação de escala de Family-Vicsek para o modelo com relaxação restrita, onde $\alpha = 1/2$ e $z = 2$.

escala FV

$$\omega(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) . \quad (2.8)$$

A função $f(x)$ é denominada função de escala e comporta-se como

$$f(x) \sim \begin{cases} x^\beta, & \text{para } 0 \ll x \ll 1; \\ \text{const}, & \text{para } x \gg 1 . \end{cases} \quad (2.9)$$

Alternativamente, a relação de escala para a rugosidade é obtida através da suposição de que a função $\omega(L, t)$ é homogênea no estado estacionário. Ao aplicar as transformações de auto-afinidade

$$L \rightarrow L' \equiv bL , \quad t \rightarrow t' \equiv b^z t , \quad \text{e } \omega \rightarrow \omega' \equiv b^\alpha \omega , \quad (2.10)$$

geramos superfícies estatisticamente indistinguíveis e, no estado estacionário, podemos escrever

$$\omega(bL, b^z t) \equiv b^\alpha \omega(L, t) \quad , \quad (2.11)$$

que deve ser válida para qualquer valor de b . Em particular, quando $b = 1/L$, eliminamos uma variável da função do lado esquerdo o que resulta em

$$\omega\left(1, \frac{t}{L^z}\right) = \left(\frac{1}{L}\right)^\alpha \omega(L, t) \quad , \quad (2.12)$$

ou

$$\omega(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad ,$$

que é a relação de Family-Vicsek, (2.8).

Podemos também escolher um outro valor para b , de modo que $b^z t = 1$. Isto leva a uma outra relação de escala

$$\omega(L, t) \sim t^\beta g\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad , \quad (2.13)$$

onde, para garantir os comportamentos temporal e espacial de $\omega(L, t)$ observados, a função $g(x)$ deve comportar-se como

$$g(x) \sim \begin{cases} \text{const}, & \text{para } 0 \ll x \ll 1; \\ x^{-\beta} & \text{para } x \gg 1 \end{cases} \quad . \quad (2.14)$$

Essa relação é equivalente à relação FV. É interessante verificar o poder da relação de escala em prognosticar os expoentes α , β e z , mostrando como um bom colapso é afetado em função de pequenas variações nos expoentes. A figura 2.5 mostra o colapso das mesmas curvas da figura 2.3a, mas com uma variação de 10% nos expoentes α e z . Os índices superescritos + e - representam as variações de 10% acima e abaixo dos respectivos expoentes. Assim, $\alpha^+ = 0.55$; $z^+ = 2.2$ e $\alpha^- = 0.45$; $z^- = 1.8$ desfazem o bom colapso obtido com os expoentes certos. Observe que a variação de apenas um expoente compromete a qualidade do colapso das curvas.

Através das relações de escala (2.8) ou (2.13) pode-se obter a classe de universalidade de um modelo. O conceito de classe de universalidade é bastante usado em toda mecânica estatística e, particularmente, em modelos de crescimento, agrupa processos cujas simetrias são semelhantes.

Alguns modelos de crescimento, como o modelo de deposição balística, há uma maior dificuldade [56] de se realizar os ajustes dos comportamentos temporais da rugosidade através de (2.8) devido, possivelmente à porosidade da estrutura e à não-linearidade.

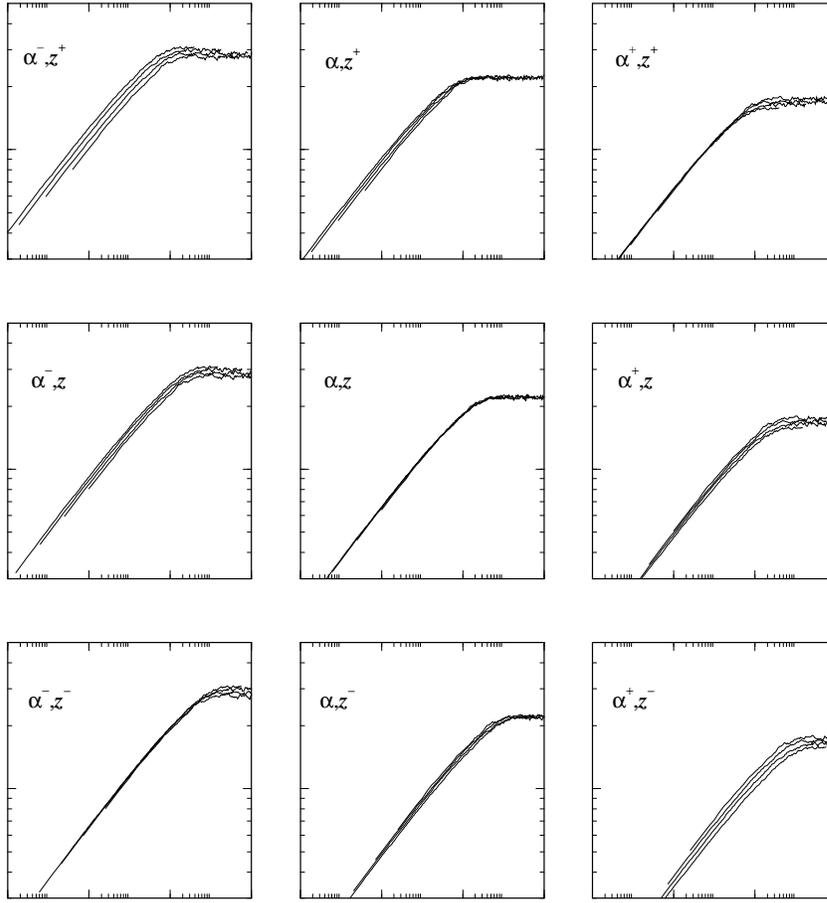


Figura 2.5: Relação de escala de Family-Vicsek obtida com as curvas da Figura 2.2a onde os expoentes foram variados em 10% em valor. Então $\alpha^+ = 0.55$; $z^+ = 2.2$ e $\alpha^- = 0.45$; $z^- = 1.8$.

2.3 Equações de Crescimento, Simetrias e Equação de Edwards-Wilkinson

Apresentamos nesta seção a abordagem no limite contínuo dos processos de crescimento em que estes são descritos através de equações do tipo Langevin. Para isto, torna-se necessário uma função contínua $h(\mathbf{x}, t)$, que irá descrever a altura no ponto \mathbf{x} no tempo t . No limite contínuo, somente flutuações de superfície com grande comprimento de onda¹ são consideradas. Neste limite, denominado em inglês *coarse-grained* (granulado grosso), cada processo individual envolve um número considerável de partículas.

Para um processo de deposição, a evolução da interface é escrita genericamente como

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v_0 + \eta(\mathbf{x}, t) + \zeta(\mathbf{x}, t) \quad , \quad (2.15)$$

¹em que esse comprimento de onda é muito maior que o parâmetro de rede.

onde v_0 é o fluxo médio de deposição de partículas, $\eta(\mathbf{x}, t)$ é o ruído que contém flutuações rápidas na taxa de deposição e $\zeta(\mathbf{x}, t)$ é o termo que contém as correlações de superfície, geradas pelas interações entre as partículas.

O ruído é branco, ou seja, satisfaz as propriedades

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (2.16)$$

e

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = D \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \quad , \quad (2.17)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa uma média sobre configurações independentes.

Consideraremos a seguir algumas simetrias importantes e desejáveis para um processo de crescimento [3]. Lembre-se que estamos interessados em interfaces unívocas, sem reentrâncias, como as exemplificadas na Figura 2.6.

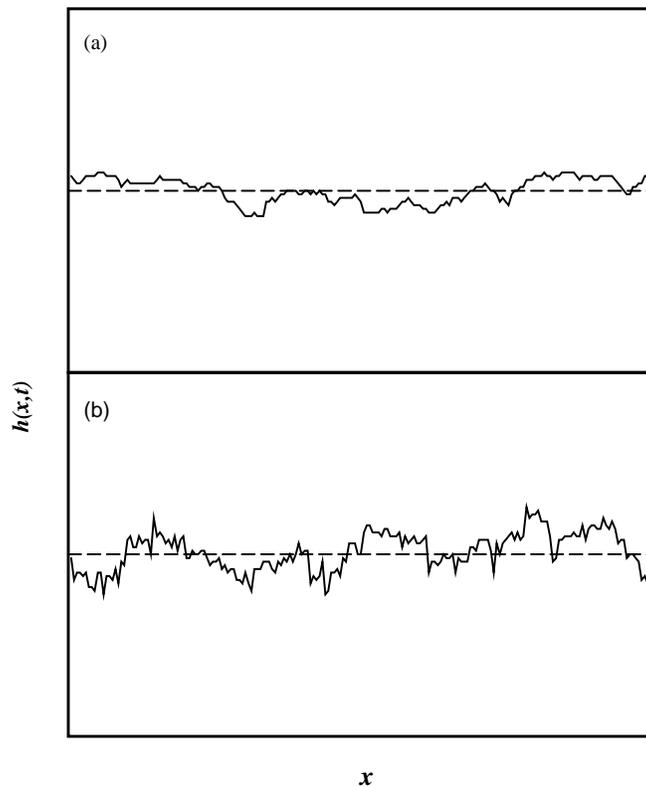


Figura 2.6: Interfaces típicas em $d = 1$. As linhas tracejadas mostram a posição da altura média nos dois casos. Em (a) temos uma morfologia gerada por um processo de crescimento linear. Em (b), o processo de crescimento é não-linear.

Por ser linear, os expoentes α , β e z podem ser obtidos por análise de Fourier através dos comportamentos em tempos curtos e longos da função correlação [45, 46]

$$C_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} = \langle h(\mathbf{q}, t) h(\mathbf{q}', t) \rangle \quad , \quad (2.29)$$

onde \mathbf{q} é o vetor de onda.

Alternativamente, como (2.28) deve ser invariante a transformações de escala auto-afins com os expoentes corretos, obtém-se interfaces estatisticamente indistinguíveis ao aplicarmos na direção horizontal

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' \equiv b\mathbf{x} \quad , \quad (2.30)$$

verticalmente

$$h \rightarrow h' \equiv b^\alpha h \quad , \quad (2.31)$$

e no tempo

$$t \rightarrow t' \equiv b^z t \quad . \quad (2.32)$$

Para o termo aleatório, as transformações de escala são realizadas a partir de (2.17). Assim, aplicando (2.30), (2.31) e (2.32) temos

$$\langle \eta(b\mathbf{x}, b^z t) \eta(b\mathbf{x}', b^z t') \rangle = D \delta^d(b\mathbf{x} - b\mathbf{x}') \delta(b^z t - b^z t') \quad . \quad (2.33)$$

Com a seguinte propriedade das funções delta, $\delta^d(a\mathbf{x}) = a^{-d} \delta^d(\mathbf{x})$, a equação anterior pode ser escrita como

$$\langle \eta(b\mathbf{x}, b^z t) \eta(b\mathbf{x}', b^z t') \rangle = b^{(-d+z)} \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle \quad . \quad (2.34)$$

Então, sob as transformações de auto-afinidade, a equação EW torna-se

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + b^{\frac{-d}{2} + \frac{z}{2} - \alpha} \eta(\mathbf{x}, t) \quad , \quad (2.35)$$

que tem que ser independente de b , pois uma transformação auto-afim leva o sistema à uma outro ponto onde o comportamento de escala é exatamente o mesmo. Retiramos a

dependência em b do termo da relaxação superficial fazendo com que o expoente dinâmico seja

$$z = 2 . \quad (2.36)$$

Da independência de b do termo que acompanha o ruído e do expoente dinâmico $z = 2$, tem-se

$$\alpha = \frac{2-d}{2} \text{ e } \beta = \frac{2-d}{4} . \quad (2.37)$$

Em $d = 1$, $\beta = 1/4$, $\alpha = 1/2$ e $z = 2$. Para $d = 2$, $\alpha = \beta = 0$ o que significa comportamento logarítmico para tempos curtos e longos,

$$\omega^2(L, t) \sim \log t \text{ para } t \ll \tau \quad (2.38)$$

e

$$\omega_\infty^2(L) \sim \log L \text{ para } t \gg \tau \quad (2.39)$$

Para $d > 2$, os expoentes são negativos. Isto implica em uma superfície sempre lisa. Qualquer flutuação que gere rugosidade será totalmente amortecida pelo termo de relaxação superficial.

2.4 A equação de Kardar-Parisi-Zhang

A equação EW, discutida anteriormente, é bastante simplificada no sentido de não se levar em conta situações onde a taxa de crescimento depende da normal local, fato que ocorre em vários processos de deposição. Em 1986, Kardar, Parisi e Zhang, levando em conta tal dependência, propuseram uma equação mais geral que a equação EW, porém com a desvantagem de ser não-linear. A figura 2.7 mostra a origem de não-linearidade quando se leva em conta o favorecimento de crescimento na direção das normais locais.

Considere em um dado ponto uma inclinação ∇h . Neste ponto, diferença de altura δh devido à evolução da interface em um tempo δt é dada por ([3, 6])

$$\delta h = \sqrt{(v\delta t)^2 + (v\delta t\nabla h)^2} = v\delta t\sqrt{1 + (\nabla h)^2} , \quad (2.40)$$

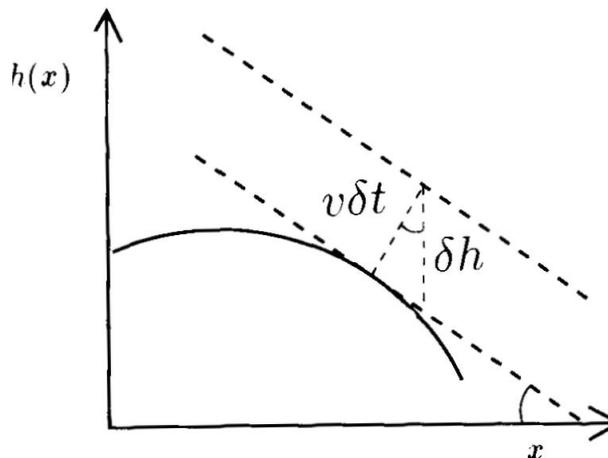


Figura 2.7: Origem do termo não-linear na equação KPZ, que leva em conta o crescimento na direção da normal local em cada ponto. Extraído de Barabási e Stanley [3].

que pode ser expandido em uma aproximação para pequenos gradientes como

$$\delta h = v\delta t \left(1 + \frac{1}{2}(\nabla h)^2 + \dots \right) . \quad (2.41)$$

Então, tem-se

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 , \quad (2.42)$$

que somado à contribuição da relaxação superficial e do termo aleatório, resulta na bem conhecida equação KPZ

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2 + \eta(\mathbf{x}, t) , \quad (2.43)$$

onde $h \rightarrow h - vt$. Note que a equação KPZ não é invariante à transformação de simetria *up-down*, Eq. (2.23).

Como se trata de uma equação não-linear, a solução por análise de Fourier torna-se inviável. Por invariância galileana, pode-se mostrar [47] que a relação

$$\alpha + z = 2 , \quad (2.44)$$

é válida para todo d . Além disso, Kardar *et. al* [35] mostraram por grupo de renormalização em $d = 1$, que

$$\beta = 1/3, \quad \alpha = 1/2 \quad \text{e} \quad z = 3/2 , \quad (2.45)$$

e a amplitude c_4 , medida apenas com o modelo *Single-Step*,

$$c_4 = 0.020 \pm 0.002 \quad . \quad (2.61)$$

Os invariantes são definidos como razões entre cumulantes, ou seja, como razões entre as amplitudes universais. O primeiro invariante é o coeficiente de assimetria $S(L, t)$, conhecido como *skewness*. Este parâmetro mede assimetrias da distribuição de alturas em relação ao valor médio, portanto é utilizado como medida indireta da presença de simetria *up-down*. É definido pela razão

$$S(L, t) = \frac{\langle [h_i - \bar{h}]^3 \rangle_c}{\left(\langle [h_i - \bar{h}]^2 \rangle_c \right)^{3/2}} = \frac{\langle [h_i - \bar{h}]^3 \rangle}{\left(\langle [h_i - \bar{h}]^2 \rangle \right)^{3/2}} \quad . \quad (2.62)$$

Usando (2.59) no estado transiente, tem-se

$$S(L, t \ll L^z) = \frac{a_3}{a_2^{3/2}} = \frac{c_3}{c_2^{3/2}} \quad . \quad (2.63)$$

Observe que os coeficientes a_2 e a_3 não são universais, mas a razão $a_3/a_2^{3/2}$ é independente de qualquer parâmetro do modelo, sendo universal. Dessa forma o coeficiente de assimetria vale

$$S(L, t \ll L^z) = 0.28(5) \quad , \quad (2.64)$$

sendo uma assinatura de um sistema na classe KPZ.

A curtose está relacionada com os desvios do comportamento gaussiano das flutuações de altura próximo ao ponto de máximo (modo) da distribuição e é definida por

$$K(L, t) = \frac{\langle [h_i - \bar{h}]^4 \rangle_c}{\left(\langle [h_i - \bar{h}]^2 \rangle_c \right)^2} \quad . \quad (2.65)$$

O quarto cumulante $\langle [h_i - \bar{h}]^4 \rangle_c$ é escrito em função dos momentos através de

$$\langle [h_i - \bar{h}]^4 \rangle_c = \langle [h_i - \bar{h}]^4 \rangle - 3 \left(\langle [h_i - \bar{h}]^2 \rangle \right)^2 \quad , \quad (2.66)$$

comporta-se como

$$\Delta v(L, t) \sim -\lambda t^{-\eta_t}, \quad \text{para } t \ll L^z, \quad (2.73)$$

e

$$\Delta v(L, t) \sim -\lambda L^{-\eta_L}, \quad \text{para } t \gg L^z. \quad (2.74)$$

Os expoentes η_t e η_L estão relacionados com os expoentes α e z da seguinte forma

$$\eta_L = 2(1 - \alpha) \quad \text{e} \quad \eta_t = 2(1 - \alpha)/z. \quad (2.75)$$

O sinal da correção é determinado pelo sinal de λ . Dessa forma, olhando-se o comportamento de Δv , pode-se fazer previsões quanto à não-linearidade de um sistema, sendo de grande importância nas análises que faremos nos capítulos posteriores.

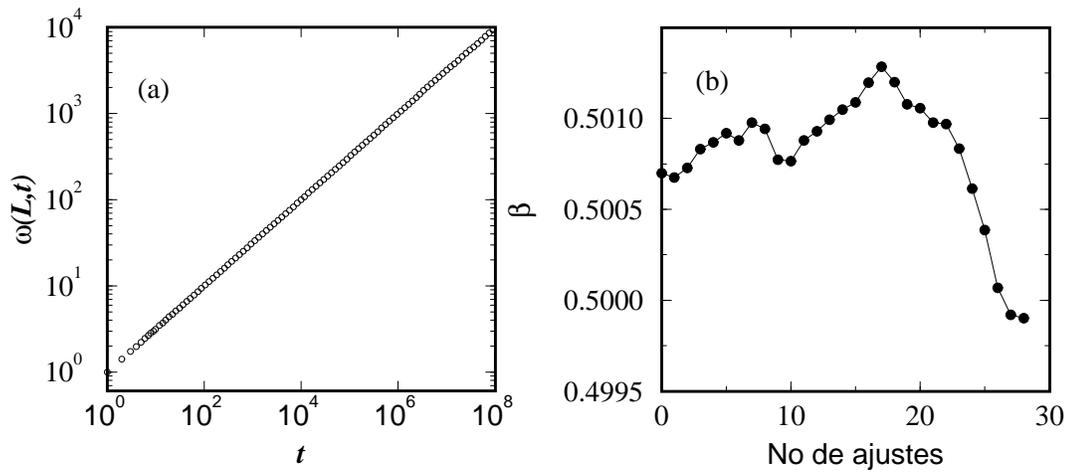


Figura 3.1: Comportamento da rugosidade no modelo DA. Em (a) temos o comportamento temporal para $L = 10000$ sítios e em (b) temos os valores de β obtidos pelo método de inclinações consecutivas, com retas locais de $\Delta = 50$ pontos.

3.3 Modelo com Relaxação Superficial - EW

Em um processo real de deposição quase sempre o sítio onde a partícula é depositada não é o sítio “energeticamente” mais favorável. Family [13], em 1986 propôs um modelo na rede, baseado na descrição teórica de Edwards e Wilkinson [12], que permite que partículas que não estão em suas posições energeticamente favoráveis realizem uma **relaxação superficial**. Esse processo constitui-se da remoção de partículas que estão em sítios com altura elevada, e conseqüentemente proibidos, para um mínimo local. Isto faz com que a rugosidade do perfil não cresça indefinidamente, como no caso anterior.

O modelo com relaxação superficial, que chamaremos de modelo EW, foi o primeiro modelo que procura reproduzir as restrições de ausência de evaporação e de formação de defeitos, presentes na deposição ideal por MBE. Superfícies em baixas temperaturas [54, 55] são o limite de aplicabilidade desse modelo, como apontado por J. Krug [2].

O algoritmo EW, de fácil implementação, é o seguinte.

- Substrato com L^d sítios, altura inicial nula e condições periódicas de contorno;
- Sorteia-se um sítio i ;
- $h_i \rightarrow h_i + 1$ se $h_i - h_{\{j\}} < m$, onde $\{j\}$ representa os primeiros vizinhos do sítio i e o parâmetro m é o máximo de diferença altura permitido;
- Caso contrário, a partícula será removida para um mínimo local; Caso os dois vizinhos possuam mesma altura, as duas direções de relaxação têm mesma probabilidade.
- Sorteia-se outro sítio ...

3.3.2 Simulações em $d = 2$

O fato do modelo EW estar na classe da equação linear em $d = 1$ leva à discussão se isto ocorre também em $d = 2$. Conforme vimos, nesta dimensão, a equação linear fornece comportamentos logarítmicos

$$\omega^2(L, t) \sim \log t \quad (3.6)$$

para tempos curtos, e

$$\omega_{sat}^2(L) \sim \log L \quad (3.7)$$

para tempos longos, mas com $z = 2$.

Simulamos o modelo EW em uma rede quadrada. A processo de relaxação é o mesmo que em $d = 1$, inclusive com relaxação aleatória em caso de mínimos vizinhos com alturas iguais.

Como referência de simulação deste modelo nesta dimensão, conhecemos apenas o trabalho de Pal e Landau [58], que caracterizaram o comportamento de escala pela relação

$$\omega^2(L, t) = A \ln \left[L f \left(\frac{t}{L^z} \right) \right] , \quad (3.8)$$

onde z é o expoente dinâmico. A função $f(x)$ comporta-se como $f(x) \sim x^\gamma$ para $t \ll L^z$ e $f(x) \sim \text{constante}$, para $t \gg L^z$. Para o comportamento da rugosidade em tempos curtos ser independente de L , devemos ter

$$\gamma z = 1 . \quad (3.9)$$

Portanto, em tempos curtos, é válido o comportamento

$$\omega^2(L, t) = A\gamma \log t , \quad (3.10)$$

enquanto para tempos longos

$$\omega_{sat}^2(L) - A \ln L \sim \text{const} . \quad (3.11)$$

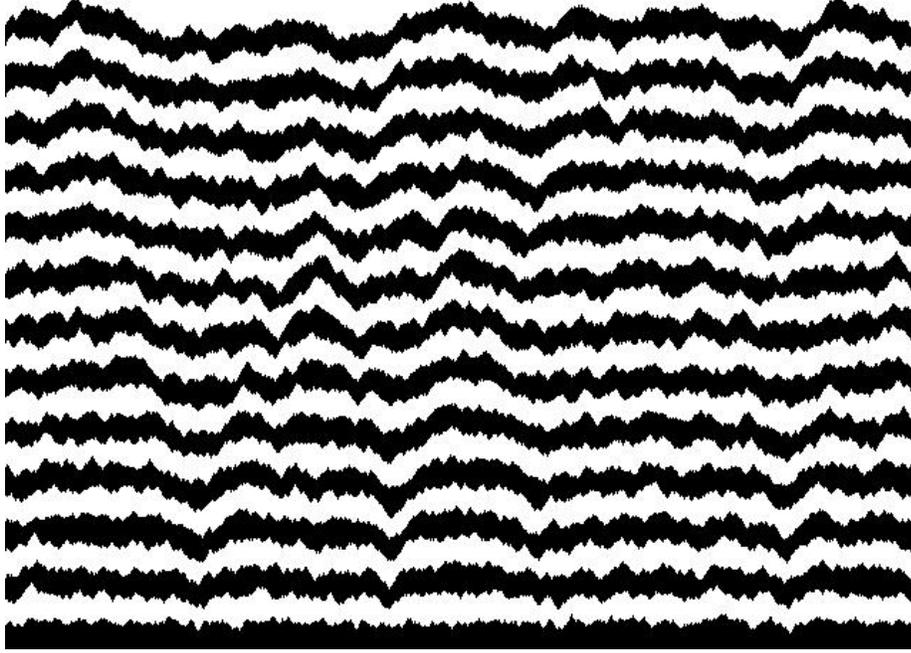


Figura 3.9: Seqüência de perfis da deposição *KK*. Compare a diferença entre esta morfologia e a morfologia do modelo *EW*, Figura 2.6.

A ausência da simetria *up-down* no estado transiente em $d = 1$ pode ser vista através dos comportamentos temporais da rugosidade, do coeficiente de assimetria e da curtose para o modelo *KK* para vários tamanhos de L , como mostra a Figura 3.10. O comportamento de $S(L, t)$ (gráfico b) possui o valor transiente $S \approx -0.28$ e, depois estabiliza-se em $S \approx 0$ no estado estacionário. Embora as curvas com os tamanhos inferiores ainda apresentem considerável ruído, a curva com $L = 50000$ confirma o comportamento acima descrito e já estabelecido na literatura. Na figura 3.10c, o comportamento com o tempo da curtose K mostra que no estado transiente temos $K \approx 0.15$ enquanto no estado estacionário, onde as flutuações da distribuição de alturas deve ser gaussiana, $K \approx 0$. Os valores de S e K no estado estacionário reforçam a universalidade KPZ deste modelo, em $d = 1$.

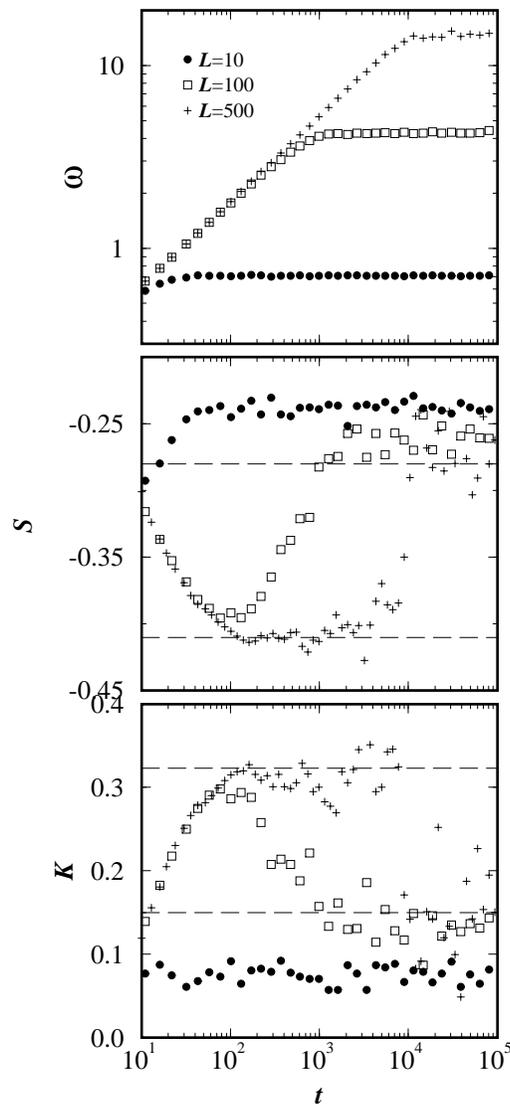


Figura 3.12: Comportamentos temporais da rugosidade, coeficiente de assimetria e coeficiente de curtose para o modelo KK em $d = 2$ para $L = 10; 100; 500$. As linhas tracejadas em (b) sinalizam os valores $S = -0.28$ e $S = -0.41$, enquanto em (c) mostram os valores $K = 0.15$ e $K = 0.32$.

3.5 Modelo de Deposição Balística - DB

O modelo de Deposição Balística foi proposto em 1959 por M. Vold [15] para simular a estrutura de sedimentos formada na deposição de pequenas partículas em dispersão coloidal. O interesse inicial se concentrava no cálculo de densidade do depósito, onde os modelos iniciais forneciam valores irreais, bem menores do que os valores experimentais.

O modelo fora da rede consiste da deposição de discos rígidos em $d = 1$ (ou esferas em $d = 2$) em um substrato horizontal. Na versão original, cada partícula cessa seu movimento de queda quando encontra um primeiro contato com o depósito, fazendo, então, parte do mesmo.

Trabalhos posteriores de simulação fora da rede [60] incluíram o processo de reestruturação

(difusão) nas dinâmicas com o objetivo de aumentar a densidade do depósito, tornando-a mais real.

Simulações do modelo na rede [44, 16] reduzem o tempo computacional, permitindo um número maior de partículas depositadas e a análise de *scaling*. O modelo pode ser estudado nas versões NN (*nearest-neighbor*) e NNN (*next-nearest-neighbor*) [3].

O modelo na rede NN constitui-se do seguinte algoritmo trivial.

- Substrato com L^d sítios, altura inicial nula e condições periódicas de contorno;
- Sorteamos um sítio;
- $h'_i = \max(h_i + 1, h_{\{j\}})$, onde $\{j\}$ são os vizinhos próximos;
- Sorteamos outro sítio ...

A Figura 2.8 mostra os sítios ocupados (escuros) e os sítios ativos (\times). Quando um sítio é ocupado, como o sítio (\otimes), ocorre a geração de novos sítios ativos (\circ).

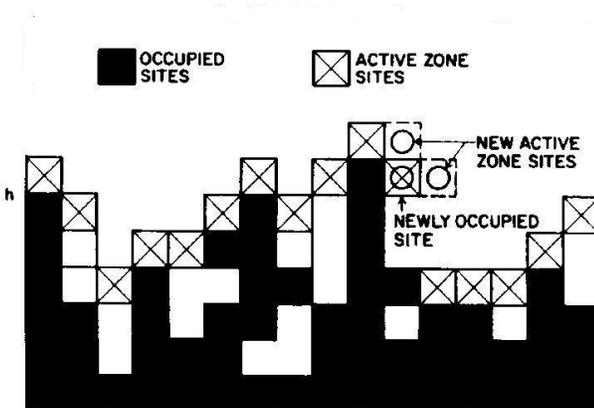


Figura 3.13: Representação em pequena escala do modelo de Deposição Balística. Os sítios escuros estão ocupados e os sítios com um X são ativos. Extraído de Meakin et al. [16].

Assim, como nas seções anteriores, mostramos na Figura 3.12 uma seqüência de perfis do modelo DB onde pode ser observado a evolução da rugosidade de sua superfície e também a porosidade de seu volume.

Family e Vicsek, em 1985, [44] encontraram os expoentes em $(1+1)$ -dimensões

$$\beta = 0.30 \pm 0.02 \quad e \quad \alpha = 0.42 \pm 0.03, \quad (3.22)$$

além de uma razoável obediência da relação de escala, apesar dos tamanhos reduzidos estudados.

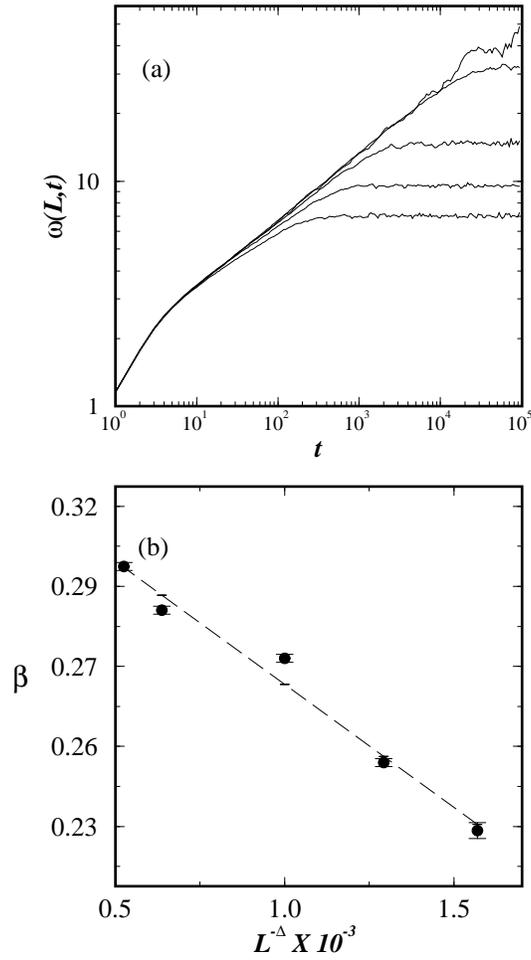


Figura 3.15: Em (a), temos o gráfico de $\omega(L, t)$ vs t para o modelo DB com $L = 200; 400; 1000; 5000; 10000$. Em (b), temos a análise de tamanho finito com $\Delta = 0.28$, cuja extrapolação fornece $\beta = 0.332(6)$.

Em $d = 2$, Meakin *et al.* encontraram

$$\beta \approx 0.24 \quad \alpha \approx 0.333 . \tag{3.25}$$

Comparando estes expoentes com os obtidos para o modelo KK, equação (3.18), vemos que há uma boa concordância no expoente de crescimento β , mas o expoente da rugosidade é bem diferente.

3.6 Classes de Universalidade

Nesta seção, resumimos os valores dos expoentes e dos invariantes que definem as classes de universalidade envolvidas neste trabalho. A Tabela 3.1 mostra os resultados obtidos através de simulação computacional.

modelo	d	β_∞	z	$S(t \ll L^z)$	$S(t \gg L^z)$	$K(t \ll L^z)$	$K(t \gg L^z)$
EW	1	0.25(2)	2.0(2)	-0.03(2)	-0.002(2)	0.002(6)	0.03(5)
EW	2	0(log)	1.9(2)	-0.001(1)	-0.001(1)	-0.05(1)	-0.05(1)
KK	1	0.33(2)	1.5(2)	-0.25(5)	-0.0005(1)	0.11(1)	-0.008(5)
KK	2	0.236(1)	1.6(1)	-0.41(1)	-0.26(3)	0.32(1)	0.14(2)
DB	1	0.332(6)	1.5(1)	0.26(1)	-0.004(2)	0.12(1)	0.004(1)

Tabela 3.1: Valores dos expoentes e dos invariantes dos processos de crescimento contidos neste trabalho.

A Tabela 3.2 resume os valores de soluções das equações estocásticas EW e KPZ. Os valores nulos dos invariantes no estados estacionários são devido ao caráter gaussiano das soluções.

equação	d	β_∞	z	$S(t \ll L^z)$	$S(t \gg L^z)$	$K(t \ll L^z)$	$K(t \gg L^z)$
EW	1	1/4	2	0	0	0	0
EW	2	0(log)	2	0	0	0	0
KPZ	1	1/3	3/2	-	0	-	0

Tabela 3.2: Expoentes e invariantes obtidos teoricamente para as classes de universalidade EW e KPZ.

p	$L : 20 - 40$	$L : 40 - 60$
1.0	0.25(2)	0.30(4)
0.8	0.29(2)	0.22(6)
0.6	0.27(2)	0.30(5)
0.4	0.29(2)	0.22(6)
0.2	0.15(3)	0.07(4)
0.0	0.0018	0.0010

Tabela 4.1: Comportamento do expoente da rugosidade α vs p para o modelo YKS em $d = 3$. Extraído de Yan et al. [42].

Em $d = 2$, a análise de escala é mais complexa. Para $p = 0$, o comportamento $\omega_{sat} \sim (\log L)^{1/2}$ foi encontrado, conforme esperado. Porém, quando $p = 0.1$ e $p = 0.2$, foram ajustados comportamentos do tipo

$$\omega_{sat} \sim (\log L)^\gamma, \quad (4.5)$$

onde $\gamma = 3/4$ e $\gamma = 1$, para $p = 0.1$ e $p = 0.2$, respectivamente.

A Figura 4.6 mostra ajustes no estado estacionário no regime de baixa não-linearidade para $d = 2$. No detalhe, temos um ajuste do tipo lei-de-potência realizado para $p = 0.2$.

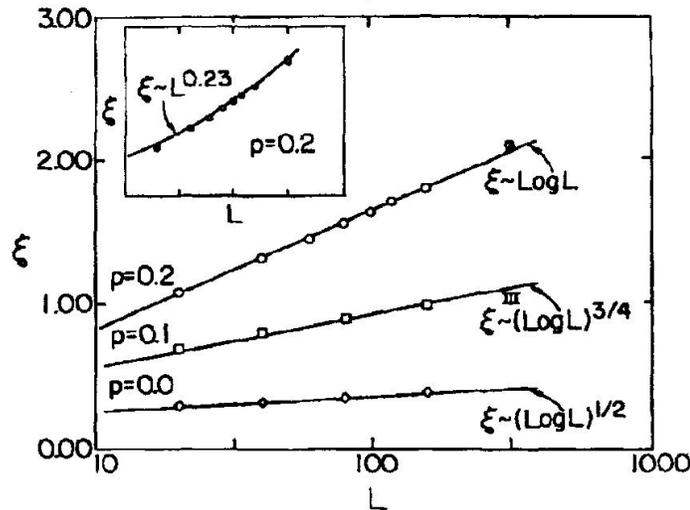


Figura 4.6: Comportamentos da rugosidade de saturação ω_{sat} (ξ no gráfico) vs o tamanho L para o modelo YKS em $d = 2$. Extraído de Yan et al. [42]

Observe que em $p = 0.2$, os autores mostraram que ambos os ajustes são bons, o que mostra a dificuldade de tratamento do comportamento de escala nesta dimensão. Os resultados sugerem um *crossover* na região $0.2 \leq p \leq 0.4$, ou seja, para $\lambda \neq 0$ assim como em $d = 3$. Posteriormente, Kim [66] mostrou que a não-linearidade do modelo YKS na

região $p < 0.4$ é extremamente pequena comparada à da região $p > 0.4$, sugerindo que o *crossover* realmente ocorre para $\lambda \approx 0$, assim como no modelo AF.

4.6 Argumentos de Escala para o crossover em $d = 1$

Sabemos que a relação de escala FV é válida para processos de crescimento que estão em classes de universalidades bem definidas. No *crossover* entre os regimes linear e não-linear, segundo Grossmann *et al.* [41], pode-se esperar que seja válida uma relação de escala do tipo

$$\omega(L, t, \lambda) \sim t^{\beta_0} g(tL^{-z_0}, t\lambda^\phi) \quad , \quad (4.6)$$

onde β_0 e z_0 são os expoentes do regime linear e ϕ está relacionado com a natureza do *crossover*. Como na relação FV, a variável tL^{-z_0} define o tempo característico t_\times e a variável $t\lambda^\phi$ define outro tempo característico, t_c , que separa os comportamentos linear e não-linear e comporta-se como

$$t_c \sim \lambda^{-\phi} \quad . \quad (4.7)$$

Na região $t_c \ll t \ll t_\times$, espera-se encontrar um comportamento não-linear, enquanto para $t \ll t_c$, o comportamento linear domina. O expoente ϕ está relacionado com a natureza deste *crossover* e mede, para um certo tempo fixo t_m , como a rugosidade depende da não-linearidade.

Quando $t \ll L^{z_0}$, a equação [4.6] pode ser escrita simplesmente como

$$\omega \sim t^{\beta_0} G(t\lambda^\phi) \quad . \quad (4.8)$$

Quando λ é suficientemente grande, os expoentes $\beta_{k_{pz}}$ e $\alpha_{k_{pz}}$ dominam e o comportamento de escala da rugosidade pode ser escrito como

$$\omega \sim t^{\beta_{k_{pz}}} \sim t^{\beta_0} G(t\lambda^\phi) \quad . \quad (4.9)$$

Fazendo $u = t\lambda^\phi$, temos que

$$G(u) = u^{\beta_{k_{pz}} - \beta} \quad , \quad (4.10)$$

para valores suficientemente grandes de u .

Ao substituir [4.10] na relação de escala [4.8], encontra-se

$$\omega \sim t^{\beta_0} \left(t\lambda^\phi\right)^{\beta_{kpz}-\beta_0} \ , \quad (4.11)$$

que, com a substituição dos valores dos expoentes, torna-se

$$\omega \sim t^{1/3} \lambda^{\phi/12} \ . \quad (4.12)$$

A equação [4.12] permite a obtenção do expoente ϕ de uma maneira independente da Eq. [4.8] e será utilizada por nós em capítulos posteriores.

O valor do expoente ϕ pode ser obtido por argumentos de escala aplicados à equação KPZ. Aplicando as transformações [2.30], [2.31] e [2.32] de maneira semelhante à apresentada no Capítulo 2 para a equação KPZ temos

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu' b^{z-2} \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda'}{2} b^{\alpha+z-2} (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2 + b^{-\frac{d}{2}+\frac{z}{2}-\alpha} \eta(\mathbf{x}, t) \ , \quad (4.13)$$

o que faz com que os parâmetros ν , D e λ sejam reescalados por

$$\nu \rightarrow \nu' b^{z-2} \ , \quad (4.14)$$

$$D \rightarrow D' b^{-\frac{d}{2}+\frac{z}{2}-\alpha} \quad (4.15)$$

e

$$\lambda \rightarrow \lambda' b^{\alpha+z-2} \ . \quad (4.16)$$

Agora, sabemos como cada parâmetro da relação de escala [4.6] é reescalado sob as transformações de auto-afinidade. No capítulo 2, obtivemos a relação de escala FV com o uso da hipótese de que $\omega(L, t)$ é uma função homogênea no estado estacionário. Da mesma forma Grossmann *et al* [41] supuseram que $\omega(L, t, \lambda)$ também deve ser uma função homogênea.

A segunda hipótese é que ao longo do *crossover*, quando λ não é suficientemente grande, as transformações de escala devem ser realizados com os expoentes do regime linear (α_0, β_0, z_0) . Então

$$\omega'(L', t', \lambda') = b^{\alpha_0} \omega(L, t, \lambda) \quad (4.17)$$

ou

$$\omega(L, t, \lambda) = b^{-\alpha_0} \omega'(bL, b^{z_0} t, \lambda b^{2-\alpha_0-z_0}) \quad (4.18)$$

que deve ser válida para todo b , em particular quando $b^{z_0} t = 1$, que fornece $b = (1/t)^{1/z_0}$. Assim temos a relação

$$\omega(L, t, \lambda) = t^{\beta_0} F \left(t^{-\frac{1}{z_0}} L, \lambda t^{-\frac{2-\alpha_0-z_0}{z_0}} \right) . \quad (4.19)$$

A relação de escala [4.19] define dois comportamentos característicos distintos

$$t \sim L^{z_0} \quad \text{e} \quad t \sim \lambda^{-z_0/\alpha_0+z_0-2} , \quad (4.20)$$

que define o expoente ϕ como

$$\phi = \frac{z_0}{\alpha_0 + z_0 - 2} . \quad (4.21)$$

Embora a análise de escala indique $\phi = 4$ em $d = 1$, Grossmann *et al.* obtiveram através de soluções numéricas $\phi \approx 3$, valor posteriormente encontrado por Forrest e Toral [67] através do mesmo método em uma análise mais detalhada.

4.7 Argumentos de Escala para $\omega(L, t, \frac{D\lambda}{\nu})$

Nos trabalhos de solução numérica discutidos anteriormente, o parâmetro ν foi mantido constante e λ foi variado. No trabalho que apresentaremos, o controle individual de cada parâmetro da equação é impossível. Além disso, o método que usamos para a obtenção da não-linearidade (seção 2.6) fornece o valor da não-linearidade efetiva

$$\mathcal{F} = \frac{D\lambda}{\nu} . \quad (4.22)$$

Assim, faz-se necessário verificar se o parâmetro \mathcal{F} pode ser introduzido na relação de escala como λ foi anteriormente. Em caso afirmativo, a análise de escala pode nos retornar um novo valor para ϕ .

O fator de escala para \mathcal{F} sob as transformações de escala auto-afins, Eqs (2.30,2.31,2.32), é

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}' b^{\frac{z_0}{2}-\frac{d}{2}} . \quad (4.23)$$

Capítulo 5

Modelo com Relaxação Restrita

5.1 Introdução

Neste capítulo introduzimos e apresentamos os resultados de simulação do modelo com relaxação restrita em $d = 1$ e $d = 2$. Nosso objetivo com este modelo é a motivação central deste trabalho: verificar o comportamento das propriedades de escala ao longo do *crossover* entre um modelo linear e um modelo não-linear. O modelo com relaxação restrita é diferente dos outros modelos que serão tratados em capítulos posteriores por envolver deposição de apenas um tipo de partícula. Inicialmente, discutimos a validade de relação de escala de Family-Vicsek ao longo do *crossover* e, posteriormente, os resultados para sistemas grandes. Assim, confrontamos os resultados de simulação em redes pequenas com os de redes grandes.

5.2 Descrição do modelo

Vimos que o modelo com relaxação superficial (EW) consiste da deposição aleatória de partículas com uma restrição entre alturas de primeiros vizinhos. A partícula depositada no sítio i com altura h_i cuja restrição

$$h_i - h_j < m \tag{5.1}$$

não seja satisfeita, deve realizar uma relaxação superficial a fim de encontrar um mínimo local para suavizar a interface.

No modelo com recusa (KK), partículas cuja altura não satisfazem a restrição acima têm seus sorteios recusados.

O modelo com relaxação restrita (RR) possui uma cinética intermediária a esses casos:

- Substrato com L^d sítios, altura inicial nula e condições periódicas de contorno;
- Sorteamos um sítio;
- $h_i \rightarrow h_i + 1$ se $h_i - h_{\{j\}} < m$;
- Caso contrário, é iniciado o processo de relaxação superficial, sendo que a partícula pode relaxar por s unidades de rede.
- Se um mínimo local for encontrado até s passos, a partícula é depositada neste sítio;
- Caso contrário, ou seja, se em s passos nenhum mínimo local foi encontrado, o sorteio deve ser recusado.
- Sorteamos outro sítio...

Quando $s = 0$, o modelo KK é recuperado e, à medida que o parâmetro s é aumentado, as propriedades de escala do modelo linear vão sendo recuperadas, sendo que para $s \rightarrow \infty$ retorna-se ao modelo EW.

5.3 Comportamento de escala em $d = 1$

Apresentamos nesta seção as propriedades de escala do modelo RR em $d = 1$. Escolhemos os parâmetros $s = 1$ e $s = 2$ e procuramos ajustar os comportamentos temporais de $\omega(L, t)$ na relação de escala do tipo Family-Vicsek. No regime transiente, ajustamos a forma genérica

$$\omega(L, t) \sim t^{\beta_{ef}} \tag{5.2}$$

nos intervalos $20 \leq t \ll L^z$ para vários tamanhos de L .

A Figura 5.1 mostra as curvas de β_{ef} vs $L^{-1/z}$ com $z = 2$ para $L = 200; 400; 1000; 5000$ e 10000. As linhas horizontais tracejadas estão indicando os valores $\beta = 1/4$ e $\beta = 1/3$. Para $s = 1$, $\beta_{ef} = 0.254$, para $L = 200$, e $\beta = 0.311$, para $L = 10^4$, ou seja, está havendo uma acentuada dependência de β_{ef} com o tamanho do sistema. Para $s = 2$, a dependência do expoente de crescimento com o tamanho do sistema é ainda mais forte ($\beta_{ef} = 0.214$, para $L = 200$, e $\beta_{ef} = 0.263$, para $L = 10^4$). Observe que nos modelos puros, β não depende tão fortemente do tamanho do sistema como neste caso.

A curva com $s = 1$ mostra que $\beta_{ef} \rightarrow 1/3$ quando $L \rightarrow \infty$, ou seja, o sistema já está praticamente na classe de universalidade KPZ, porém o mesmo não ocorre quando $s = 2$, o

tamanhos suficientemente pequenos do sistema, os efeitos de saturação da interface são extremamente relevantes no sistema que possui o expoente dinâmico z , o que reduz o valor do expoente de crescimento efetivo.

De posse dos comportamentos de $\omega(L, t)$ nos estados transientes e estacionários para vários valores do tamanho do sistema, tentamos colapsar as curvas com a relação de escala de Family-Vicsek. A Figura 5.2 mostra os colapsos com os parâmetros $s = 1$ e $s = 2$ para os tamanhos $L = 200; 400; 1000; 2000; 5000$. As curvas para $L = 200$ e $L = 5000$ estão destacadas em negrito.

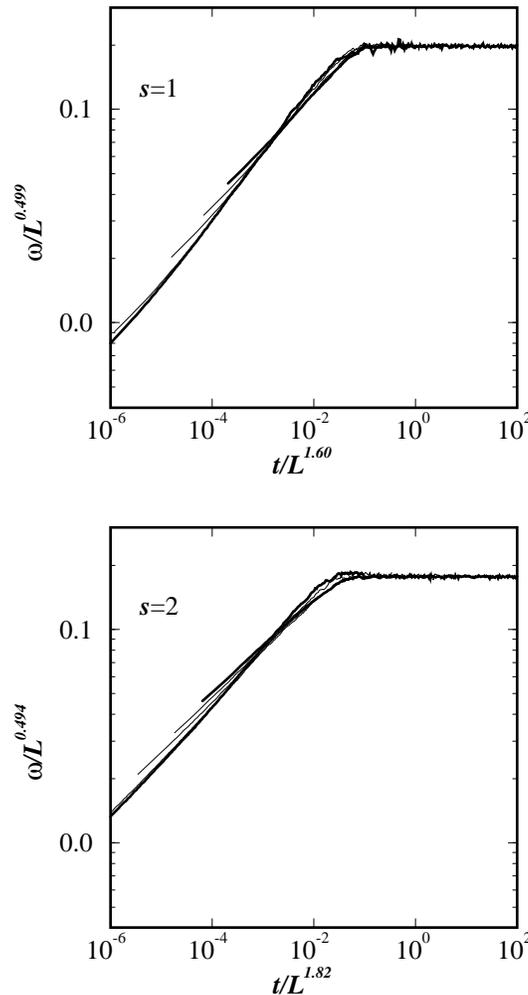


Figura 5.2: Gráfico de ω/L^α vs t/L^z para o modelo RR com $s = 1$ (em cima) e $s = 2$ (em baixo). As curvas em negrito representam $L = 200$ e $L = 5000$.

Nesta situação, à quebra do colapso deve-se exclusivamente a forte dependência do expoente β_{ef} com o tamanho do sistema, uma vez que os estados estacionários estão perfeitamente colapsados. Assim, a relação de escala de Family-Vicsek não é a melhor caracterização deste sistema, uma vez que os estados transientes não são caracterizados por um único expoente β , como nos sistemas puros.

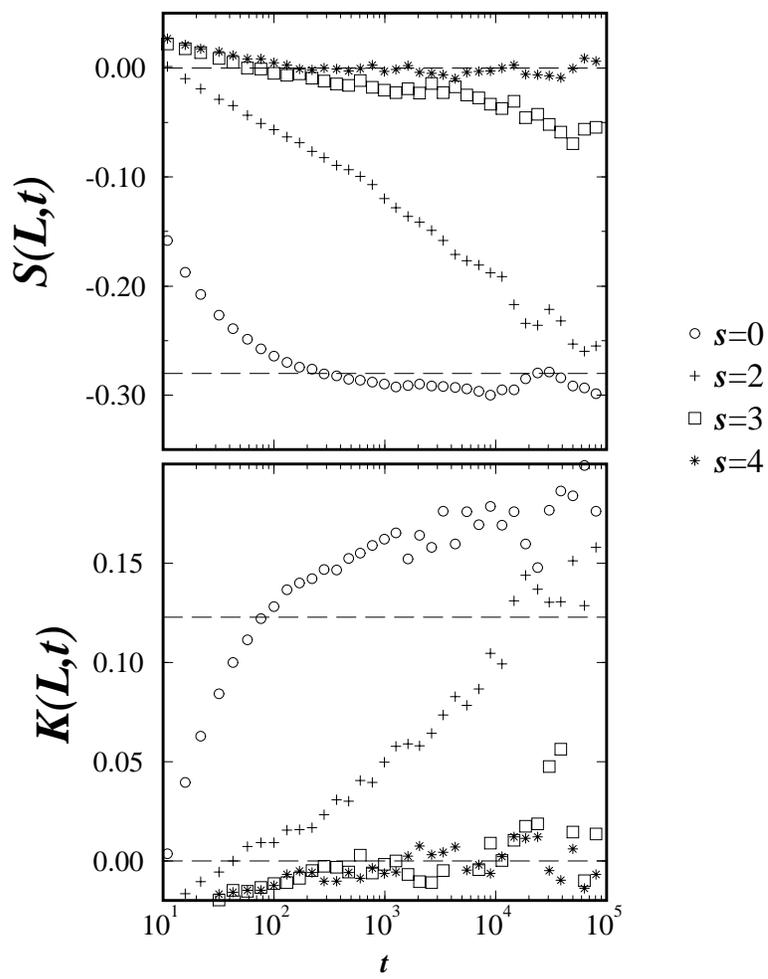


Figura 5.6: Comportamentos temporais de $S(L, t)$ e $K(L, t)$ para $s = 0; 2; 4$ e $L = 10^5$.

Os comportamentos temporais de $S(L, t)$ e $K(L, t)$ dão suporte ao principal resultado deste capítulo: o comportamento assintótico da rugosidade do modelo RR em $d = 1$ é do tipo KPZ, e o comportamento inicial é linear. O tempo de *crossover* t_c depende da não-linearidade efetiva do modelo, aqui controlada pelo parâmetro s . Além disso, este comportamento também é suportado pelo resultado teórico de Natterman *et al.* [45] e por soluções numéricas da equação KPZ com não-linearidade variável [41, 67].

O fato das simulações em pequenas escalas mostrarem a grande dependência do expoente de crescimento com o tamanho do sistema, sugere o estudo em sistemas maiores. Contudo, conforme veremos no capítulo seguinte, este quadro nem sempre ocorre em pequenas escalas.

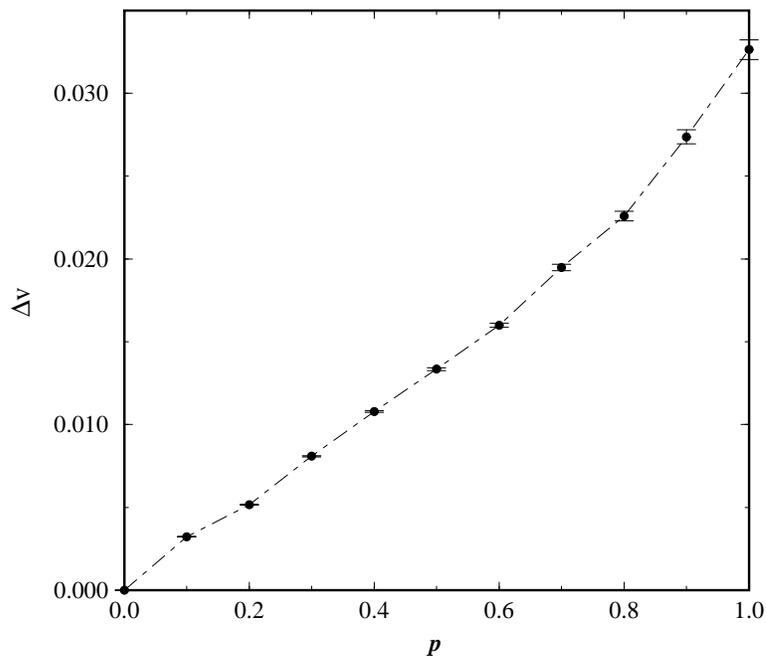


Figura 6.3: Gráfico de $\Delta v = v_{L=10} - v_{\infty}$ vs. p . Cada ponto é uma média sobre 100 amostras e as barras de erro são os desvios-padrão de cada medida.

6.2.2 Simulações em larga escala

Motivados pelos resultados de simulação em larga escala do modelo com relaxação restrita em $d = 1$, onde o estado transiente apresenta um *crossover* suave entre $\beta = 1/4$ e $\beta = 1/3$, realizamos simulações em larga escala com o objetivo de observar se há algum comportamento semelhante ao observado na seção 5.4. Guiados pela experiência anterior, escolhemos $L = 10^5$, uma vez que este tamanho proporciona um bom estado transiente com até cinco décadas do tempo.

A Figura 6.4 mostra o gráfico de $\omega(L, t)/t^\beta$ vs t para $L = 10^5$, para os expoentes $\beta = 1/4$ (a) e $\beta = 1/3$ (b).

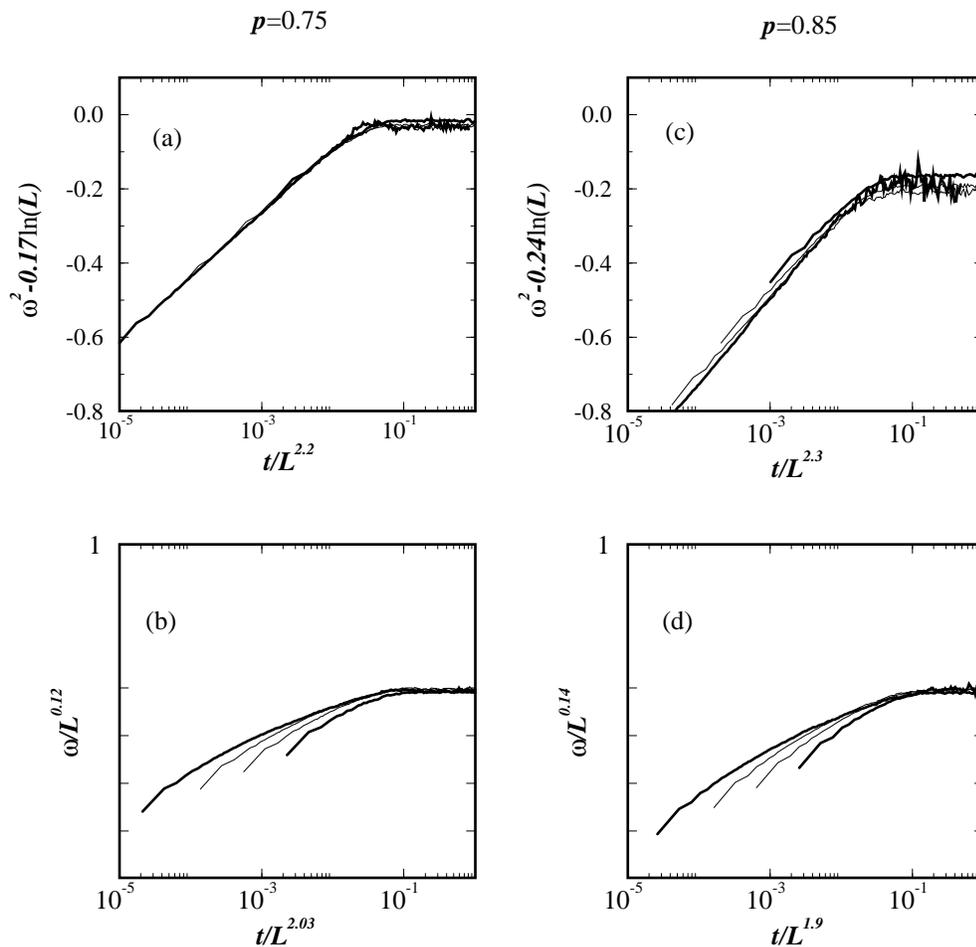


Figura 6.12: Tentativas de colapsos em $p = 0.75$ (a e b) e $p = 0.85$ (c e d) para $L = 20; 40; 80; 200$. Nos dois de cima, comportamentos logarítmicos da rugosidade em tempos curtos e longos foram assumidos. Nos dois de baixo, assumimos comportamentos em lei de potência.

A Figura 6.13 mostra a análise com a relação de escala de Family-Vicsek para $p = 0.90$ e $p = 0.98$, confirmando que, à medida que nos distanciamos da região onde ocorre o *crossover*, esta relação de escala vai tornando-se válida. Em $p = 0.95$ ainda temos um colapso pobre no estado transiente. Apenas para $p = 0.98$ encontramos um razoável colapso com a relação de Family-Vicsek.

Esta mudança brusca no comportamento da rugosidade deste modelo em $d = 2$ nos levou a observar como a não-linearidade efetiva $D\lambda/\nu$ está variando com o parâmetro p . Para isto, utilizamos o método das correções de tamanho finito para a velocidade de crescimento $v(L)$, descrito na seção 2.5. Escolhemos o tamanho inferior $L = 10$ e o superior $L = 320$. Assim

$$\Delta v = v(L) - v_\infty \sim -\frac{D\lambda}{\nu} L^{-\eta_L} \quad , \quad (6.12)$$

onde assumimos que $v_\infty = v_{L=320}$ e $\eta_L = 2(1 - \alpha)$.

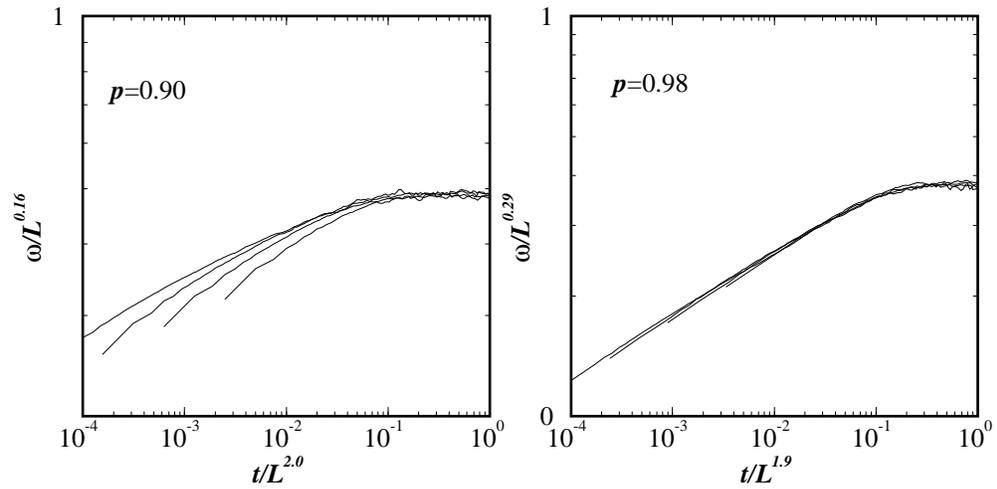


Figura 6.13: Tentativas de colapsos com a relação de escala de Family-Vicsek para $p = 0.90$ e $p = 0.98$. As curvas são para $L = 20; 40; 80; 200$.

A Figura 6.14 mostra o gráfico de $\Delta v = v_{L=10} - v_{L=320}$ vs p . No destaque, temos o comportamento de $\Delta v L^n$ na região do *crossover*. Pela equação (6.12), esta grandeza está diretamente relacionada com a não-linearidade efetiva \mathcal{F} , que cresce abruptamente na a partir de $p = 0.95$.

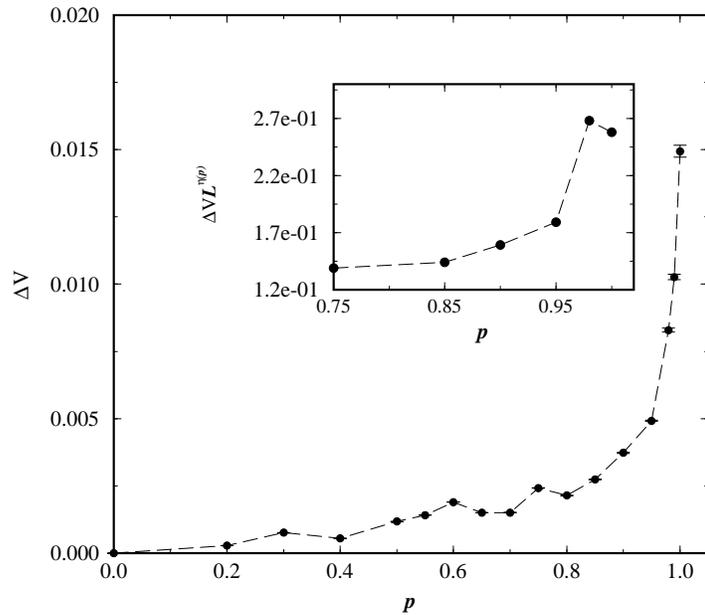


Figura 6.14: Comportamento de Δv vs p para o modelo EW-KK em $d = 2$. No destaque vemos como $\Delta v \times L^n$ varia com p na região do *crossover*.

6.3.2 Simulações do estado transiente em $L = 2000$ sítios

Motivados pelo que já observamos ocorrer em $d = 1$ nos modelos com relaxação restrita e neste modelo, onde no limite assintótico do estado transiente o crescimento temporal da rugosidade ocorre com o expoente $\beta = 1/3$, procuramos evidências deste tipo de comportamento também em $d = 2$. Esperamos que em sistemas grandes, onde ocorre grandes estados transientes, possa ocorrer um *crossover* entre os comportamentos logarítmicos para lei de potência em um t_c para qualquer valor da não-linearidade. Trabalhamos com $L = 2000$ e com um tempo de deposição $t = 10^4$, bem longe de efeitos de saturação. Esta tarefa torna-se inconveniente de ser realizada em redes maiores e em tempos maiores de deposição, devido ao grande esforço computacional.

A Figura 6.15 mostra o comportamento temporal de $(\omega^2 - B)/\ln t$ em (a) e o comportamento temporal de $\omega^2/t^{2\beta}$ em (b). Observe em (a) que, para $p = 0.90$, temos um comportamento inicial horizontal, indicando que há um comportamento logarítmico da rugosidade em tempos curtos e um lento *crossover* inicia-se em $t \approx 10^3$. Para $p > 0.90$, os comportamentos transientes revelam-se semelhantes ao comportamento em $p = 1$. Em (b), observamos o comportamento KPZ assintótico para $p = 0.99$ e $p = 0.985$ e a tendência para os outros valores de p atingirem a classe KPZ em $t > 10^4$. Este resultado acima indica a ocorrência do mesmo tipo de *crossover* que ocorre em $d = 1$, indicando que o comportamento de escala da rugosidade no limite assintótico ocorre com os expoentes da equação KPZ.

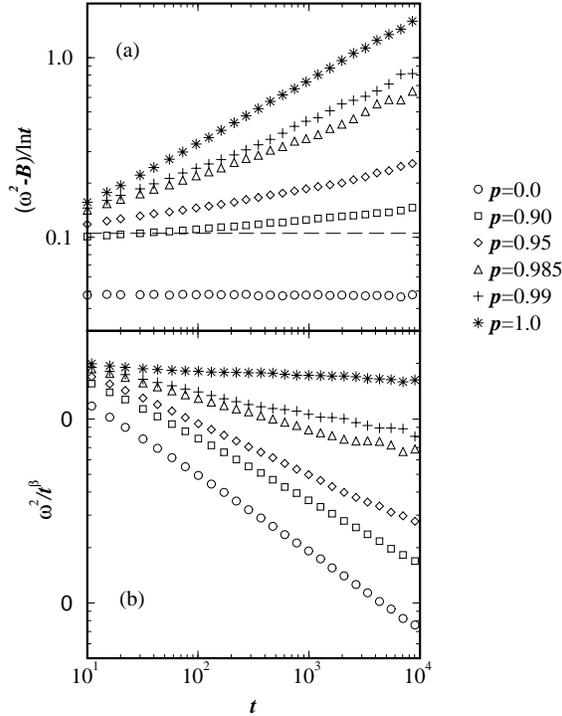


Figura 6.15: Comportamentos temporais de $(\omega^2 - B)/\ln t$ em (a) e $\omega^2/t^{2\beta}$ em (b) para vários valores de p para $L = 2000$. A linha tracejada em (a) é apenas uma guia para os olhos.

Capítulo 7

Modelo DB-KK

7.1 Introdução e Motivação

A motivação inicial para este trabalho ¹ encontra-se no estudo, por simulação computacional, das propriedades de escala do modelo de deposição por *spray*, proposto por Bernardes *et al.* [69]. Nesse modelo, agregados de partículas de tamanhos variados são incididas aleatoriamente sobre um substrato frio. Ao tocarem nesse substrato, tais agregados vão se deformando e gerando, coletivamente, um processo de relaxação superficial. A Figura 6.1 mostra a deposição de alguns agregados no substrato, em $d = 1$.

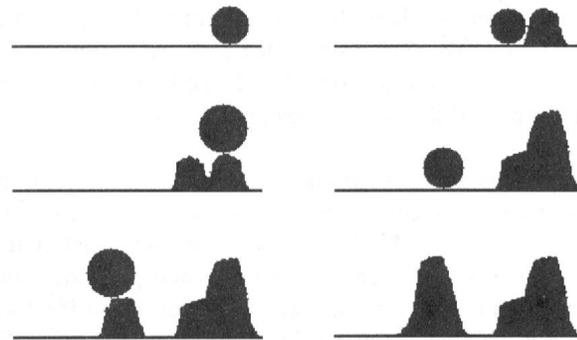


Figura 7.1: Esquema mostrando a evolução temporal da simulação do modelo de deposição por *spray*. Em cada quadro, um novo agregado é adicionado ao sistema. Extraído de Bernardes *et al.* [69].

Se a temperatura das partículas não é suficiente para gerar grandes deformações e preencher a camada anterior, a criação de vacâncias no volume é favorecida, assim como no modelo DB. Os autores, ao estudar o comportamento de escala, encontraram em $(1 + 1)$ -

¹Os resultados deste trabalho já foram publicados [68]

dimensões a rugosidade do perfil comportando-se com o tempo como

$$\omega(L, t) \sim t^\beta , \tag{7.1}$$

com $\beta \approx 0.26$. Este valor está indicando que o modelo pode ser descrito pela equação linear, mesmo com a presença das vacâncias. A Figura 6.2 mostra uma estrutura típica gerada pelo modelo de deposição por *spray* em baixa temperatura [69].



Figura 7.2: Quadro 200×200 mostrando uma estrutura gerada pela simulação computacional do modelo de deposição por *spray* com partículas de raio médio $\bar{r} = 10$ e $T = 2.5$. Extraído de Bernardes et al. [69].

No modelo DB, a compreensão da presença de crescimento lateral e geração de vacâncias (porosidade) é facilmente entendida. Tais fatos, conforme discussões anteriores, são responsáveis pela quebra de simetria *up-down*. Pela semelhança entre as morfologias do modelo DB, Figura 3.14, e do modelo de deposição por *spray*, Figura 6.2, poder-se-ia supor a quebra da simetria *up-down* e o aparecimento do termo não linear $(\nabla h)^2$ na equação de crescimento do modelo de deposição por *spray*. Como já vimos, a presença efetiva do termo não-linear leva ao expoente de crescimento $\beta = 1/3$, em $d = 1$, enquanto que os autores obtiveram $\beta \approx 1/4$ que corresponde à classe de universalidade linear.

Propusemos então o modelo DB-KK, que combina de forma probabilística os modelos DB e KK. Esses modelos têm não-linearidades de sinais opostos que podem se anular para algum valor do parâmetro de controle e gerar um crescimento linear ou bem próximo da linearidade. Assim, talvez se obtenha uma morfologia característica de um processo não-linear, uma vez que este cancelamento aconteceria para um valor do parâmetro de controle que gera crescimento com vacâncias e crescimento lateral.

7.2 Descrição do Modelo DB-KK

O modelo DB, em $d = 1$ no limite contínuo, é descrito pela equação KPZ

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \eta(\mathbf{x}, t) + \nu_{DB} \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda_{DB}}{2} \left(\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \right)^2 . \quad (7.2)$$

Este modelo possui velocidade de crescimento v maior do que a taxa de deposição e o responsável por isso é a quantidade de vacâncias em sua estrutura. Isto causa uma não-linearidade positiva, $\lambda_{DB} > 0$. Ao contrário, o modelo KK, que também é descrito pela mesma equação não-linear

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \eta(\mathbf{x}, t) + \nu_{KK} \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda_{KK}}{2} \left(\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \right)^2 , \quad (7.3)$$

tem, devido ao processo de recusa, o gerador de não-linearidade negativa, $\lambda_{KK} < 0$.

O modelo DB-KK gera uma deposição com uma concentração p de partículas KK e concentração $(1 - p)$ de partículas DB. Logo, em um mesmo processo, estão participando duas cinéticas de não-linearidades que possuem sinais contrários. É de se esperar que, variando-se os valores de p , apareça uma região com o termo não-linear efetivo praticamente desprezível, ou totalmente nulo. A principal questão a ser discutida nessa região é qual o comportamento temporal da rugosidade no regime transiente e qual a morfologia das interfaces.

7.3 Crossover no modelo DB-KK

As simulações do modelo DB-KK foram realizadas em $d = 1$ e $L = 50000$. Esse tamanho reduz bastante os efeitos de tamanho finito do sistema na medida do expoente de crescimento β , que são muito importantes devido à lenta convergência do modelo DB [16]. Além disso, podemos depositar mais camadas, avançando mais no tempo sem os efeitos de saturação da interface.

A Figura 6.2a mostra o comportamento temporal da rugosidade $\omega(L, t)$ para os valores extremos de p , $p = 0$ e $p = 1$. Observe que, até o tempo estudado $t = 10^4$, não foi observado nenhum efeito de saturação da interface. A Figura 6.2b mostra o gráfico de $\omega(L, t)/t^{1/3}$ vs t indicando que $\beta \approx 1/3$ é o expoente de crescimento para os dois modelos, ou seja, estão na mesma classe de universalidade em $d = 1$, o que já havíamos afirmado no capítulo 3.

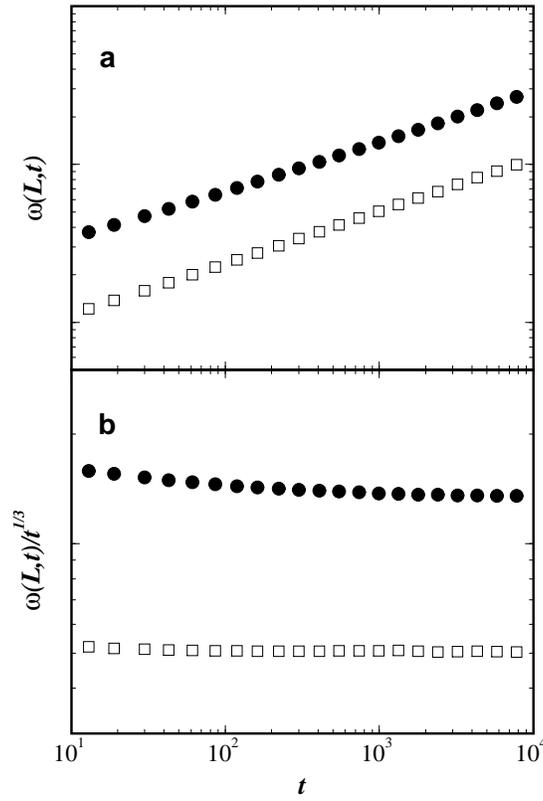


Figura 7.3: Simulações para $L = 50.000$. Gráfico $\omega(L, t)$ vs. t (a) e $\omega(L, t)/t^{1/3}$ vs. t (b) para $p = 0.0$ (•) e $p = 1.0$ (□). Observe que o comportamento do modelo DB ($p = 0$) ainda está com um pouco de efeito do tamanho finito do sistema, devido à sua lenta convergência.

No modelo EW-KK, estudado no capítulo 6, o *crossover* foi inicialmente caracterizado pelo gráfico do expoente de crescimento β vs p . A primeira caracterização neste modelo também foi realizada dessa forma, pois ainda não temos previsão alguma sobre o comportamento da não-linearidade em função do parâmetro de controle p . Para vários valores de p , medimos o expoente β no intervalo $20 \leq t \leq 10^4$. A Figura 6.4 mostra o gráfico de β_{ef} vs p em $d = 1$ para $L = 5000$ e $L = 50.000$ de onde concluímos que este *crossover* é bastante abrupto na região $0.7 \leq p \leq 1$, quando comparado com o gráfico β_{ef} vs p do modelo EW-KK.

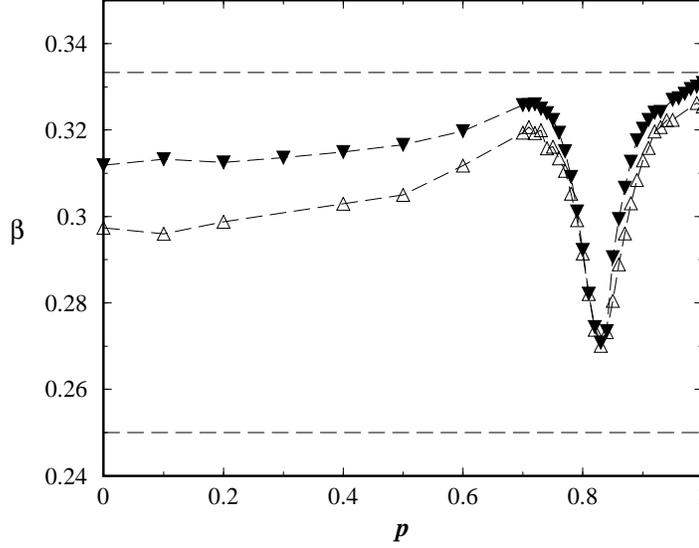


Figura 7.4: Gráfico β_{ef} vs p para $L = 5.000$ (triângulos vazios) e $L = 50.000$ (triângulos cheios) indicando que, quando $p \approx 0.8$, a não linearidade KPZ efetiva torna-se pequena. As duas linhas horizontais tracejadas mostram os valores $\beta = 1/4$ e $\beta = 1/3$.

A região mais próxima ao comportamento DB puro evidencia a forte dependência de β_{DB} com o tamanho do sistema devido a difícil convergência do modelo DB para a classe KPZ, conforme discussão da seção 3.???. Tal fato não ocorre com o modelo KK. A região mais próxima da linearidade ocorre em $p^* \approx 0.80$. Para os dois tamanhos do sistema, encontramos $\beta_{ef}(p^*) \approx 0.27$ e a diferença entre as curvas β_{ef} vs p , em função do tamanho, sugerem uma posterior análise deste comportamento com o tamanho do sistema.

Assim como no modelo EW-KK, a análise de tamanho finito das velocidades de crescimento foi realizada, de onde obtemos informação direta sobre a magnitude da não-linearidade efetiva $\lambda D/\nu$. O modelo DB ($\lambda_{DB} > 0$) possui $\Delta v < 0$ e o contrário ocorre na região dominada pelo modelo KK. Portanto esperamos que diferença

$$\Delta v(L, t) = v(L, t) - v_\infty \sim -\lambda L^{-\eta_L} \quad (7.4)$$

mude de sinal quando $p \approx p^*$. A Tabela 6.1 mostra, para alguns valores de p , os valores de v_∞ obtidos pelas interseções das retas $v(L)$ vs $1/L$ com o eixo y para vários valores de L . Observe que para $p = 0.5$, temos $v_\infty > 1$ enquanto para $p = 0.6$, $v_\infty < 1$. Embora v_∞ mude de sinal nesta região, temos o expoente de crescimento $\beta \approx 1/3$ indicando ainda a presença do termo não-linear.

p	v_∞	β
0.0	2.14(1)	0.297(3)
0.1	1.9437(7)	0.296(3)
0.2	1.7463(5)	0.299(2)
0.3	1.5489(6)	0.301(2)
0.4	1.3523(4)	0.303(1)
0.5	1.1553(7)	0.305(1)
0.6	0.9590(6)	0.312(1)
0.7	0.7685(4)	0.320(1)
0.8	0.5926(5)	0.291(1)
0.9	0.4756(1)	0.313(1)
1.0	0.4189(2)	0.329(1)

Tabela 7.1: Velocidades de crescimento v_∞ e expoentes de crescimento β para vários valores de p .

Assim, calculamos as diferenças $\Delta v = v_{L=10} - v_\infty$ em função de p , mostradas na Figura 6.5. Quando $p \approx 0.80$, $\Delta v \approx 0$ e isto indica que a não-linearidade KPZ efetiva é desprezível próximo a esse valor p^* . O gráfico inserido detalha melhor a região onde ocorre a mudança de sinal em λ e sugere $p^* = 0.812$. Então, em $p^* = 0.812(1)$, $\beta_{ef} \approx 0.27$ e a não-linearidade KPZ realmente vai a zero. Note que $\beta_{ef} \approx 0.27$ também é semelhante ao encontrado por Bernardes *et al.* [69] no modelo de deposição por spray.

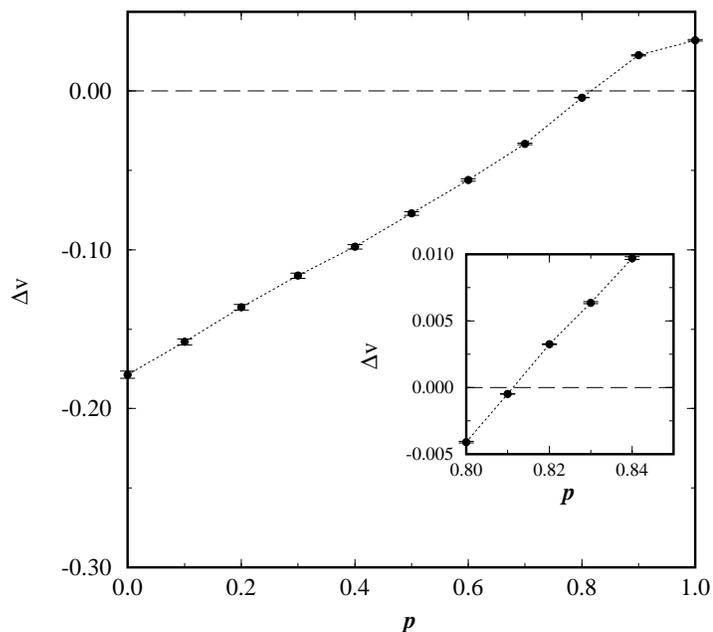


Figura 7.5: Gráfico de $\Delta v = v_{L=10} - v_\infty$ vs p para o modelo DB-KK, mostrando que a não-linearidade efetiva $\lambda D/\nu$ tende a zero quando $p \approx 0.8$. O detalhe mostra que $p^* = 0.812(1)$, exatamente quando λ muda de sinal. Cada ponto é uma média sobre 200 amostras.

Devido à natureza abrupta do *crossover*, detalhamos a região próxima a p^* . A Figura 6.4 mostra o gráfico β_{ef} vs p na região $0.7 \leq p \leq 1.0$, para $L = 2000$, 10000 e $50\,000$, onde podemos ver que a posição de mínimo está razoavelmente próxima à encontrada pelo método anterior.

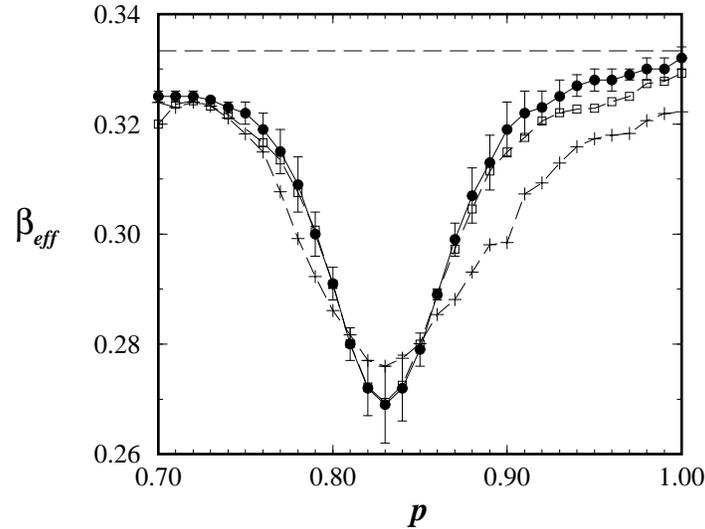


Figura 7.6: O expoente β_{ef} vs p para $L = 50000$ (círculos cheios com barras de erro), $L = 10000$ (quadrados vazios) e $L = 2000$ (cruzes). A linha tracejada indica o valor $\beta = 1/3$.

Todos os valores de β_{ef} foram medidos no intervalo $20 < t < 10000$ através do método de inclinações consecutivas, de onde as barras de erro da curva para $L = 50000$ foram avaliadas. Do comportamento de β_{ef} vs p da Figura 6.5, três observações são imediatamente feitas. A primeira observação repousa no comportamento da largura da região de mínimo em função de L , uma vez que observamos que esta se torna mais estreita com o aumento do tamanho do sistema. Porém, tal tendência saturou-se quando $L = 50000$. Para verificar este fato, realizamos simulações com $L = 200000$ para $p = 0.75; 0.80; 0.85; 0.90$ que vieram a confirmar este resultado. Observamos também que as curvas são melhor ajustadas pela lei de potência $\omega(L, t) \sim t^\beta$ nas regiões distantes do mínimo do que próximo a p^* , o que sugere uma análise mais cuidadosa do comportamento de escala nesta região. Uma terceira observação está relacionada com presença/ausência de simetria *up-down* do sistema quando $p = p^*$, onde o termo de não-linearidade KPZ é desprezível e a morfologia da superfície pode ser semelhante a de um sistema regido pela equação KPZ, uma vez que em $p = p^*$, ainda é considerável a quantidade de vacâncias na estrutura.

7.4 A simetria *up-down* em $p = p^*$

No capítulo 2, introduzimos as possíveis simetrias que uma equação de crescimento pode conter. Vimos também que a simetria *up-down*, que é a simetria sob a transformação $h \rightarrow -h$, está intimamente relacionada com a ausência da não-linearidade do tipo KPZ.

A verificação do tipo de morfologia na superfície e no volume gerada pelo modelo DB-KK quando $p = p^*$, é a motivação central deste trabalho: gerar uma superfície com vacâncias no volume e crescimento lateral, mas com propriedades de escala de um sistema quase linear, uma vez que no modelo de Bernardes *et al.* [69] isso está acontecendo.

Em $p = p^*$, aproximadamente 18% dos sorteios obedecem à cinética DB e são os responsáveis pelo ainda grande número de vacâncias no volume, conforme mostra a Figura 6.7. Dessa forma, a criação de vacâncias e crescimento lateral ainda são processos dominantes neste caso, o que poderia nos fazer pensar na validade da classe KPZ com $\beta = 1/3$ neste limite.

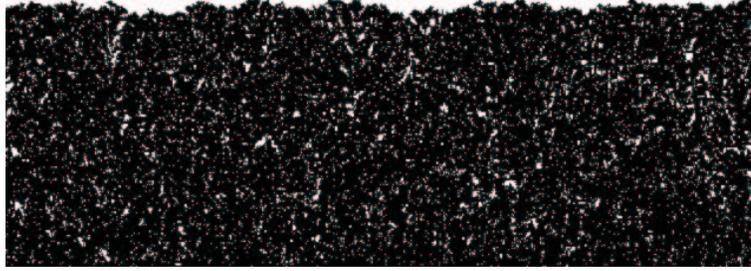


Figura 7.7: Simulação do modelo DB-KK com $p = p^*$. $L = 640$ e $t_{max} = 500$. As regiões pretas são partículas depositadas e as brancas são vacâncias. Veja como a morfologia da superfície ainda é um pouco semelhante à do modelo DB, Figura 3.14.

A dúvida sobre a conservação da simetria *up-down* é retirada com o comportamento temporal do coeficiente de assimetria $S(L, t)$. Conforme já vimos, se $S(L, t) = 0$, significa que

$$\sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^3 = 0 \quad (7.5)$$

e o perfil possui simetria *up-down*. Para $S(L, t) \neq 0$, o sistema não deve ter tal simetria. Em $d = 1$, para sistemas na classe de universalidade da equação KPZ, o estado transiente ($t \ll L^z$) é marcado pelo valor $S(L, t) \approx 0.28$ e, no estado estacionário, $S(L, t) = 0$. E, para a equação linear, $S(L, t) = 0$ para todo tempo. A Figura 6.8 mostra o comportamento do coeficiente de assimetria $S(L, t)$ vs t para o modelo DB-KK em $p = 0.0$, 1.0 e $p = p^*$.

Como comparação, mostramos também o comportamento temporal de $S(L, t)$ para o modelo linear EW.

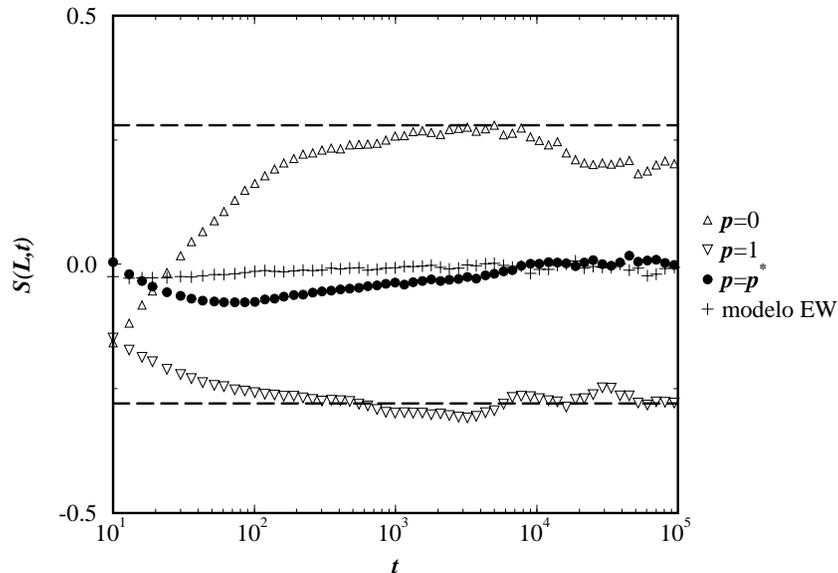


Figura 7.8: Comportamento temporal de $S(L, t)$ para o modelo DB-KK para $L=50000$. Para $p = 0$ e $p = 1$, S tende para o valor universal $S \approx |0.28|$ da classe KPZ, indicado pelas duas linhas tracejadas. Porém, quando $p = p^*$, a simetria up-down é recuperada, pois $S \approx 0$.

Em p^* , embora a morfologia seja característica de um sistema não linear, conforme Figura 6.7, o comportamento de $S(L, t)$ tende a zero, indicando que a simetria up-down é recuperada.

7.5 Correções Logarítmicas para $\omega(L, t) \sim t^\beta$ em $p = p^*$

Nesta seção, iremos procurar evidências da presença de termos não-lineares de ordem superior, em particular, termos ímpares na equação de crescimento em p^* . A motivação para tal tarefa encontra-se no fato do comportamento temporal de $\omega(L, t)$ no modelo de Bernardes *et al* [69] apresentar correções logarítmicas próximas ao comportamento linear

$$\omega(L, t) \sim t^{1/4} \quad . \quad (7.6)$$

Em nosso trabalho, a segunda motivação para se procurar outras formas de escala em p^* ou correções ao comportamento $\omega(L, t) \sim t^\beta$, é o aumento das barras de erro na medida de β_{ef} próximo a p^* .

O comportamento temporal de $\omega(L, t)$, em $d = 1$ apresenta uma correção logarítmica próxima à linearidade da forma [70, 71, 72]

$$\omega(L, t) \sim t^{1/4}(\log t)^{1/8} \quad (7.7)$$

quando, para tempos curtos, a equação de crescimento permitir termos não-lineares de ordem ímpar do tipo

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \eta(x, t) + \nu \frac{\partial^2 h(\mathbf{x}, t)}{\partial x^2} + \sum_{2n+1} \lambda_{2n+1} \left(\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \right)^{2n+1}, \quad (7.8)$$

para $n = 1, 2, \dots$. Soluções perturbativas de (7.8), obtidas por Grupo de Renormalização, levam à correção (7.7), que é originada de um ponto fixo marginalmente estável próximo a $\beta = 1/4$.

A confirmação desta hipótese para o sistema em p^* foi realizada ao verificarmos a validade de correções logarítmicas multiplicativas, Eq.(7.7), no comportamento temporal da rugosidade em p^* .

Para verificarmos se (7.7) realmente está descrevendo o comportamento temporal de $\omega(L, t)$ com aqueles expoentes, reescrevemos esta equação como

$$\omega(L, t) \sim t^\delta (\log t)^\gamma \quad (7.9)$$

e realizamos pequenas variações em torno dos valores exatos $\delta = 1/4$ e $\gamma = 1/8$, observando o comportamento da função $Y(t, \delta, \gamma)$ definida por

$$Y(t, \delta, \gamma) = \frac{\omega(L, t)}{t^\delta (\log t)^\gamma}, \quad (7.10)$$

que deve estar mais próximo de uma constante quanto melhores forem δ e γ . A grandeza por nós adotada para medir a qualidade deste “ajuste” é o erro relativo $\Delta Y / \langle Y \rangle$. A Figura 7.9 mostra o gráfico de $Y(t, \delta, \gamma)$ vs t para: (a) $\delta = 1/4$ e pequenas variações em torno de $\gamma = 1/8$; (b) $\gamma = 1/8$ e pequenas variações em torno de $\delta = 1/4$. As curvas em negrito mostram o comportamento de $Y(t, \delta = 1/4, \gamma = 1/8)$ vs t em ambos os casos. Os gráficos detalhados em cada caso, mostram o comportamento do erro relativo em função do parâmetro variado. Observe em (a), que o menor erro relativo de Y ocorre quando $\gamma = 1/8$ e, em (b), quando $\delta = 1/4$, sugerindo que a melhor descrição para o comportamento temporal da rugosidade do modelo BD-KK em p^* é realmente a equação (7.7) com os expoentes $\delta = 1/4$ e $\gamma = 1/8$.

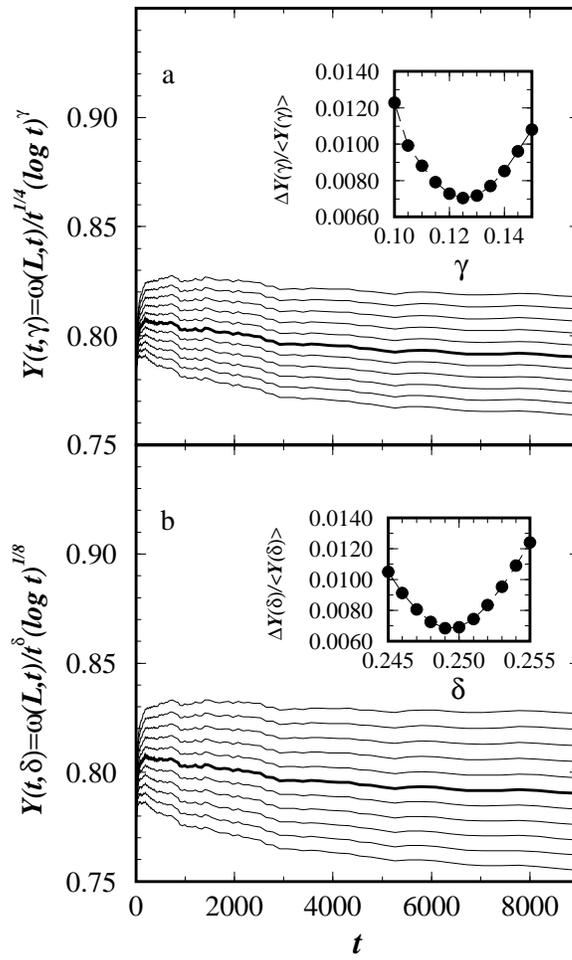


Figura 7.9: Gráficos da função $Y(t, \gamma, \delta)$ vs t . (a) $\delta = 1/4$ e pequenas variações em γ foram feitas. (b) $\gamma = 1/8$ e pequenas variações em δ foram feitas. As curvas em negrito mostram o comportamento temporal da função $Y(t, 1/8, 1/4)$. Os gráficos em destaque mostram o erro relativo $\Delta Y / \langle Y \rangle$ em função do expoente variado em cada caso.

Além disso, comparamos o comportamento do erro relativo de $Y(t, \delta, \gamma)$ em função de pequenas variações em δ e γ com o comportamento do erro relativo de

$$Y(t, \beta) = \omega(L, t) / t^\beta \quad (7.11)$$

em função de pequenas variações em torno de $\beta_{ef} = 0.27$. A Figura 7.10 mostra as curvas de $\Delta Y / \langle Y \rangle$ em função das variações nos parâmetros. As duas curvas inferiores são os erros relativos de $Y(t, \gamma, \delta)$. Os quadrados e os círculos simbolizam as variações em γ e δ , respectivamente. A curva com losangos está mostrando o erro relativo de (7.11) em função de pequenas variações em torno de β_{ef} .

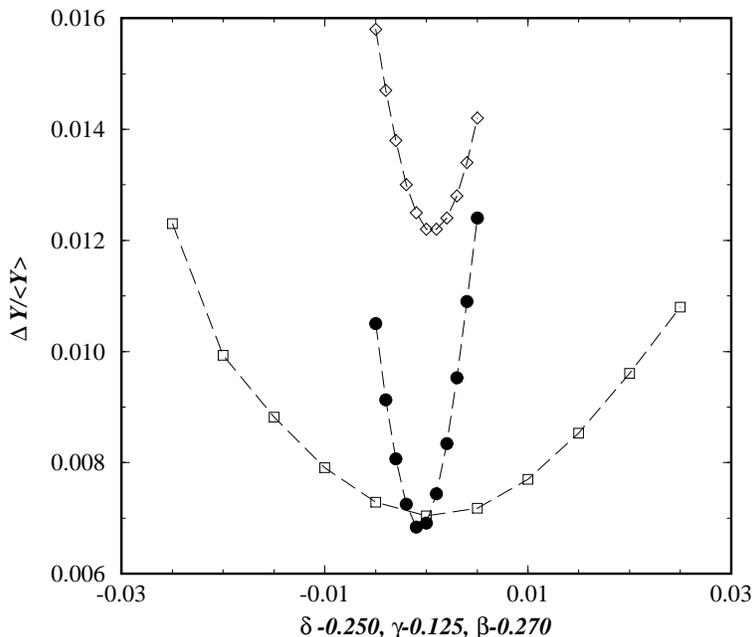


Figura 7.10: Comparação entre os erros relativos de $Y(t, \delta, \gamma)$ correspondentes ao ajuste do tipo $\omega(L, t) \sim t^\delta (\log t)^\gamma$ (variação em γ está representado por quadrados e a variação em δ por círculos) e os erros relativos de $Y(t, \beta)$ correspondentes ao ajuste do tipo $\omega(L, t) \sim t^\beta$.

Concluimos que $\omega(L, t) \sim t^{\beta_{ef}}$, com $\beta_{ef} \approx 0.27$, pode descrever o comportamento temporal da rugosidade em p^* , porém a descrição dada por (7.7) apresenta erro relativo bem menor, o que nos leva a concluir que esta é a melhor descrição para o sistema e, conseqüentemente, a equação não-linear com termos cúbicos pode estar regindo o sistema no limite *coarse-grained*. Para finalizar, vale comentar que (7.8) é invariante sob a transformação $h \rightarrow -h$, o que não invalida a discussão sobre a presença da simetria *up-down* em p^* .

Na seção 2.4.2, discutimos os resultados da equação KPZ anisotrópica, (Eq.2.46) onde participam termos não-lineares de sinais opostos. Enquanto naquele caso, as soluções numéricas e de grupo de renormalização de (2.46) indicam um comportamento de escala linear quando os sinais das não-linearidades são opostos, no modelo DB-KK o comportamento de escala depende das magnitudes dos termos não-lineares.

Capítulo 8

Deposição em Bicamadas

8.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos o *crossover* entre o comportamento linear e o não-linear em um modelo onde as cinéticas EW e KK ocorrem em camadas. Nossa principal motivação é o trabalho de Paniago *et al.* [32], onde multicamadas de Fe/Au foram crescidas por *sputtering* sobre substratos de MgO em temperaturas inferiores a 300°C . As propriedades de escala da rugosidade das interfaces deste processo foram obtidas através de medidas de espalhamento de raio-X rasante e do formalismo teórico de Sinha *et al.* [73].

Os autores caracterizaram quatro amostras. Uma amostra contendo apenas Fe depositado em MgO a 200°C (amostra A). As amostras B e C são deposições de Fe/Au a 200°C , enquanto a amostra D é uma deposição realizada em 40°C . Segundo os autores, em temperaturas abaixo de 300°C , ocorre segregação dos átomos de Au : esta espécie tende a migrar para a superfície e, devido a sua grande mobilidade sobre a superfície de Fe , ocorre um decréscimo no valor da rugosidade. Na faixa de temperaturas em que o experimento foi realizado, não ocorre interdifusão entre as camadas de Fe e de Au , o que leva a um crescimento alternado dos dois elementos.

As medidas de espalhamento de raio-X indicaram, como uma média sobre os resultados das amostras A, B e C ($t = 200^\circ\text{C}$), o expoente da rugosidade

$$\alpha = 0.43(5) \quad , \quad (8.1)$$

e o expoente dinâmico da amostra D

$$z = 1.61(15) \quad . \quad (8.2)$$

O expoente dinâmico foi também obtido para outras amostras, porém o resultado de melhor qualidade foi com a amostra D. Para esta amostra, onde $\alpha = 0.49(3)$, a relação $\alpha + z = 2$, (Eq.2.47) é válida.

Estes resultados sugerem que as flutuações de altura no processo de crescimento de multicamadas de Fe/Au podem ser descritas pela equação KPZ. Este estudo mostra também que a deposição do surfactante Au não é um fator dominante no comportamento de escala da rugosidade, pois o resultado líquido deste processo é sempre rugoso.

Em 1993, Barabási [74] apresentou um modelo contínuo para o crescimento de interfaces rugosas na presença de surfactantes que leva a um expoente da rugosidade $\alpha \leq 0$, ou seja, as interfaces geradas são sempre lisas. Entretanto, não conhecemos nenhum modelo de crescimento discreto que possua expoente da rugosidade negativo em $d = 2$, e que simule os efeitos de um surfactante na superfície.

Neste capítulo, introduzimos um modelo com o objetivo de estudar as propriedades de escala de um processo em $d = 2$ onde há uma alternância de processos: um que possui $\alpha > 0$ e outro com $\alpha = 0$. Nosso modelo constitui-se da deposição alternada das cinéticas EW e KK. Estes processos ocorrem com durações de tempo Δt_{EW} e Δt_{KK} , e o parâmetro

$$\delta = \frac{\Delta t_{KK}}{\Delta t_{EW}} \quad (8.3)$$

está intimamente relacionado com a não-linearidade do sistema. Apesar da ausência de um processo que gere interfaces realmente lisas ($\alpha \leq 0$), esperamos que o modelo bicamadas forneça informações sobre o comportamento temporal e espacial da rugosidade, indicando qual processo realmente é dominante.

Em outra direção, entretanto com processo de crescimento semelhante a este, Shapir *et al* [36] estudaram numericamente deposições periódicas envolvendo dois tipos de partículas, com motivação em experimentos de eletrodeposição. Este estudo foi realizado em $d = 1$, com os modelos de deposição aleatória, EW, KK e DT (Das Sarma e Tamborenea) [75]. O principal resultado deste trabalho foi a incorporação do número de ciclos de deposição n na relação de escala FV fazendo o papel do tempo de deposição. Neste trabalho, nenhum *crossover* foi observado entre os processos estudados.

Apresentamos resultados de simulações em $d = 1$ e $d = 2$, onde, em $d = 1$, seguindo o mesmo princípio dos capítulos anteriores, trabalhamos em pequenas e em grandes escalas. Em $d = 2$, apresentamos comportamentos temporais da rugosidade em sistemas com $L = 2000$.

8.2 Resultados em $d = 1$

As simulações em $d = 1$ deste processo são importantes pois fornecem informações básicas sobre os efeitos dos parâmetros Δt_i ($i = \text{EW}, \text{KK}$) e δ . Além disso, as simulações do comportamento assintótico nesta dimensão nos revela o *crossover* já observado em capítulos anteriores.

8.2.1 Resultados em pequenas escalas

Realizamos simulações com $L = 1000$ até o estado estacionário do sistema, variando o parâmetro Δt_i com $\delta = 1$ fixo. A primeira camada é EW, a posterior é KK, e assim por diante. A Figura 8.1a mostra o gráfico da rugosidade em função do tempo para vários valores de Δt_i . O bom colapso das curvas acima mostra a independência do comportamento de escala da rugosidade com o parâmetro Δt_i . Dados preliminares indicam que este colapso também ocorre para $\delta < 1$ e $\delta > 1$, mostrando que, em $d = 1$ δ deve ser o parâmetro de importância. A Figura 8.1b mostra o comportamento temporal inicial da rugosidade para $\delta = 4$ (primeira camada é EW, as quatro seguintes são KK, e assim por diante), onde as setas estão indicando os momentos de trocas das cinéticas. As oscilações ocorrem porque o modelo EW tende a gerar superfícies menos rugosas do que o modelo KK. Em $d = 2$, o comportamento temporal logarítmico da rugosidade do modelo EW gera oscilações bem mais evidentes do que este caso.

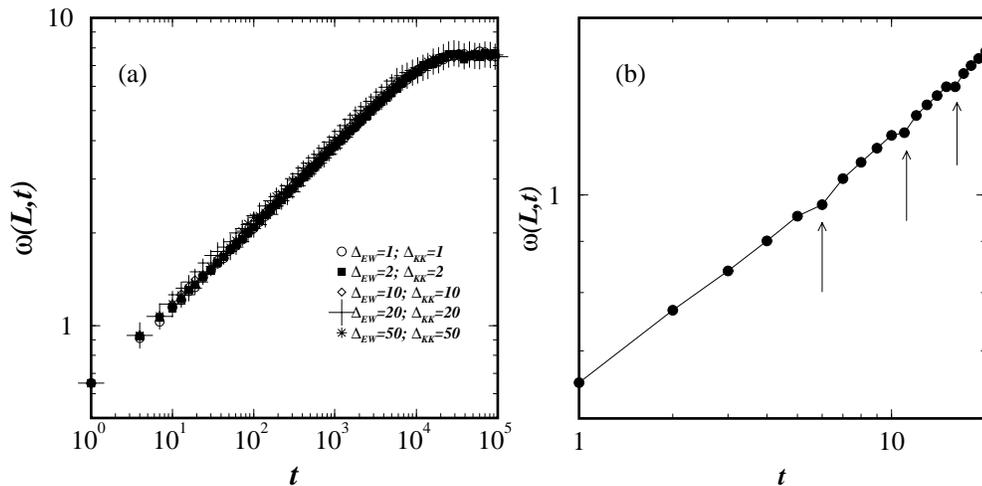


Figura 8.1: Em (a) temos comportamentos temporais da rugosidade para $\delta = 1$ e vários valores de Δt_i em um sistema com $L = 1000$ sítios. Em (b) temos o comportamento temporal em tempos curtos para $\delta = 4$, onde é possível observar as oscilações geradas pela troca de cinética.

conhecendo-se então a importância do parâmetro δ , estudamos seu efeito sobre o expoente de crescimento β e, conseqüentemente, sobre a não-linearidade do sistema.

A Tabela 8.1 mostra valores de β_{ef} em função de δ para um sistema com $L = 8000$.

δ	β_{ef}	r
1/7	0.251(1)	0.99995
1/5	0.252(1)	0.9997
1/3	0.259(1)	0.9998
1/2	0.264(1)	0.9997
1	0.281(1)	0.9998
2	0.306(1)	0.9998
3	0.310(1)	0.9997
5	0.314(1)	0.9998
7	0.313(1)	0.9998

Tabela 8.1: *Expoentes de crescimento para vários valores de δ . Os valores de β foram obtidos no intervalo $20 \leq t \leq 10^5$ em sistemas com $L = 8000$. A última coluna mostra o coeficiente de correlação para cada reta obtida.*

Para $\delta < 1$, temos $\beta \approx 1/4$ e, para $\delta > 1$, o sistema já apresenta comportamento não-linear, confirmando a íntima relação entre este parâmetro e a não-linearidade. Este resultado é melhor compreendido ao observar o comportamento da não-linearidade efetiva $D\lambda/\nu$ com o parâmetro δ .

A Figura 8.2 mostra o gráfico de $\Delta v = v_{L=10} - v_{L=1280}$ vs δ (a) e $1/\delta$ (b). A linha tracejada horizontal em (a) mostra o valor $\Delta v = 0.033$ para o modelo KK puro.

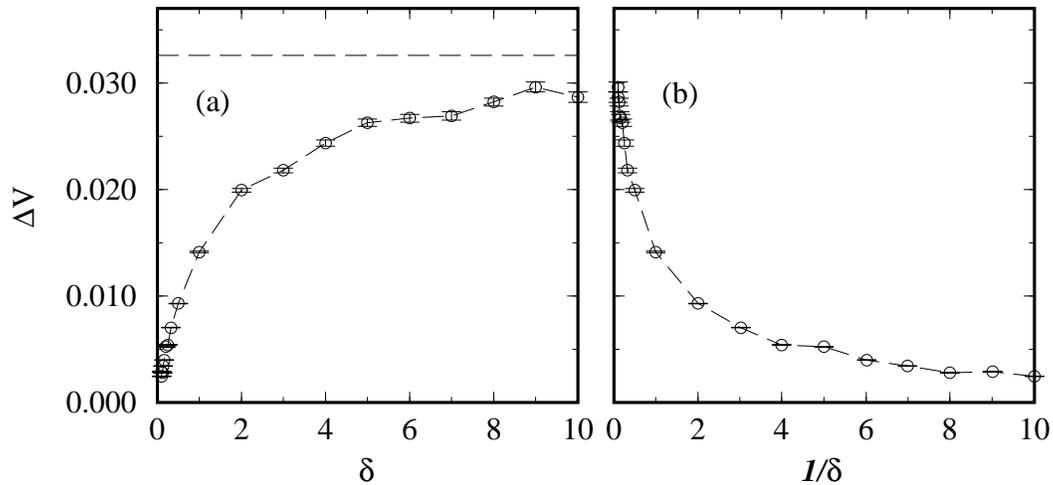


Figura 8.2: *Gráfico de $\Delta v = v_{L=10} - v_{L=1280}$ vs δ para o modelo bicamadas. Cada ponto é um resultado sobre 100 amostras independentes. As velocidades foram medidas através da inclinação de $\bar{h}(t)$ vs t no intervalo $100 \times 10^3 \leq t \leq 101 \times 10^3$.*

À medida que aumentamos δ , Δv tende assintoticamente para o valor do modelo KK puro, conforme mostra a Figura 8.2a. Um comportamento assintótico tendendo para $\Delta v = 0$ também é observado no limite linear (Figura 8.2b), quando $\delta \rightarrow 0$. Porém, próximo a $\delta = 1$, a não-linearidade depende fortemente de δ e isto é o responsável pelo brusca mudança em β_{ef} observada na região $\delta \approx 1$ na Tabela 8.1. Os resultados desta tabela e a experiência anterior fazem acreditar na existência de um *crossover* ocorrendo em um tempo t_c neste modelo.

8.2.2 Simulações em larga escala

Realizamos simulações do estado transiente do modelo bicamadas em redes com $L = 10^5$ sítios. A Figura 6.3 mostra os gráficos de $\omega(L, t)/t^\beta$ vs t para $\beta = 1/4$ e $\beta = 1/3$, forma que facilita a visualização do *crossover*. A curva com $\delta = 1$ está representada em negrito. Acima desta, temos $\delta = 2; 4$ e abaixo $\delta = 1/2; 1/4$. Esse resultado mostra a presença do

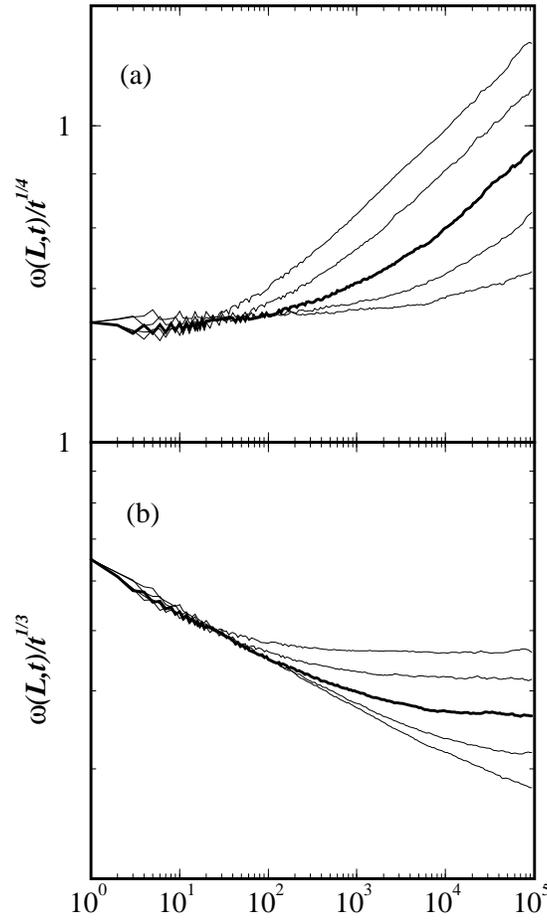


Figura 8.3: Gráficos de ω/t^β vs t para: $\beta = 1/4$ (a) e $\beta = 1/3$ (b). Para cada caso, a curva em negrito é para $\delta = 1$. Acima temos $\delta = 2; 4$ e abaixo $\delta = 1/2; 1/4$.

mesmo tipo de *crossover* que já conhecemos. A rugosidade comporta-se com $\beta \approx 1/4$ até um tempo característico t_c , de onde através de um lento *crossover*, o expoente $\beta = 1/3$ vai passando a dominar.

Devido à total semelhança deste comportamento com os anteriores, torna-se interessante verificar se os resultados teóricos da seção 4.8 continuam sendo válidos para este *crossover*. O tempo característico t_c possui uma dependência com os parâmetros D , λ e ν da forma

$$t_c \sim \left(\frac{D\lambda}{\nu} \right)^{-\phi}, \quad (8.4)$$

onde ϕ pode ser numericamente encontrado através da relação de escala

$$\omega(L, t, \Delta v) \sim t^{1/3} (\Delta v)^{\phi/12}, \quad (8.5)$$

onde $\Delta v = v_{L=10} - v_{L=1280}$.

A Figura 8.4 mostra o gráfico de $\omega(L, t_m)$ vs Δv para $t_m = 10000; 20000$, $L = 5000$ e $1/9 \leq \delta \leq 9$. As duas retas contínuas são guias para os olhos que possuem $\phi = 4$. O gráfico no interior mostra, no comportamento temporal da rugosidade, a região onde as medidas foram realizadas em curvas com $\delta = 1/8; 1; 8$, de baixo para cima.

Apesar da discutível qualidade desta análise, é válida a indicação preliminar do valor $\phi \approx 4$ para o modelo bicamadas. Há uma dificuldade na obtenção de ϕ neste modelo, ainda maior que no modelo EW-KK, devido à pequena região de valores, $1/9 \leq \delta \leq 9$ do parâmetro que controla a não-linearidade, onde é possível medi-lo. Acreditamos que simulações em sistemas maiores, possivelmente $L \gg 10^5$, possam garantir maior confiabilidade na medida deste expoente, pois ao garantir um maior estado transiente, proporciona uma escala maior de valores de δ que podem ser estudados.

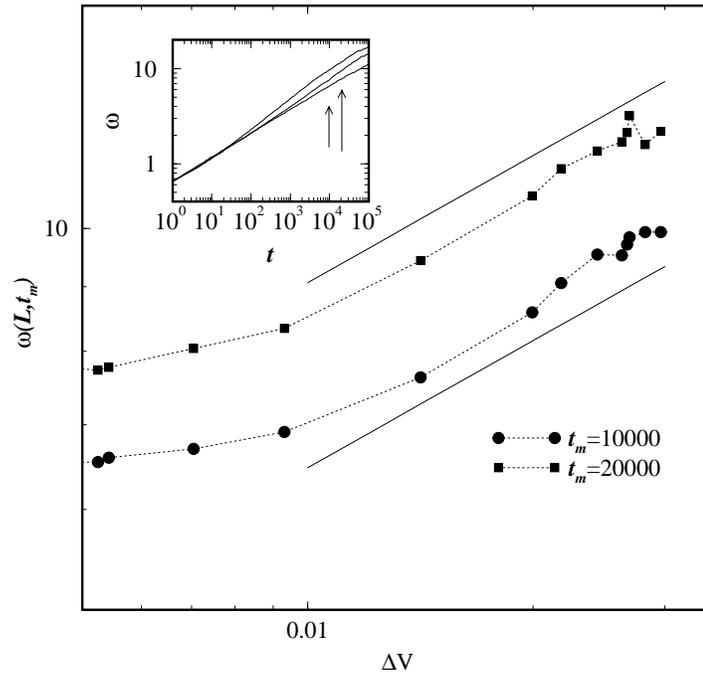


Figura 8.4: Comportamento de $\omega(L, t_m)$ em função de Δv para o modelo bicamadas com $L = 5000$ sítios. A não-linearidade foi variada na região $1/9 \leq \delta \leq 9$. O gráfico no interior mostra a região onde realizamos as medidas. Cada ponto é uma média sobre 200 amostras.

8.3 Simulações em $d = 2$

Nesta dimensão, as cinéticas EW e KK geram interfaces “lisas” e rugosas, respectivamente. Quando camadas da cinética EW são depositadas sobre camadas geradas pela cinética KK, ocorre redução do valor da rugosidade e o contrário ocorre na deposição de camadas KK sobre camadas EW. Assim a alternância das cinéticas causa oscilações (bem evidentes nesta dimensão) no comportamento temporal da rugosidade e no estado estacionário, conforme mostra a Figura 8.5, que é um gráfico da rugosidade em função do tempo. De baixo para cima mostramos: $\delta = 1$ com $\Delta t_i = 1$ e $L = 80$, onde é possível observar o início do estado estacionário; a seguir os mesmos parâmetros, mas $L = 2000$ e, a curva de cima, $\delta = 4$ e $L = 2000$.

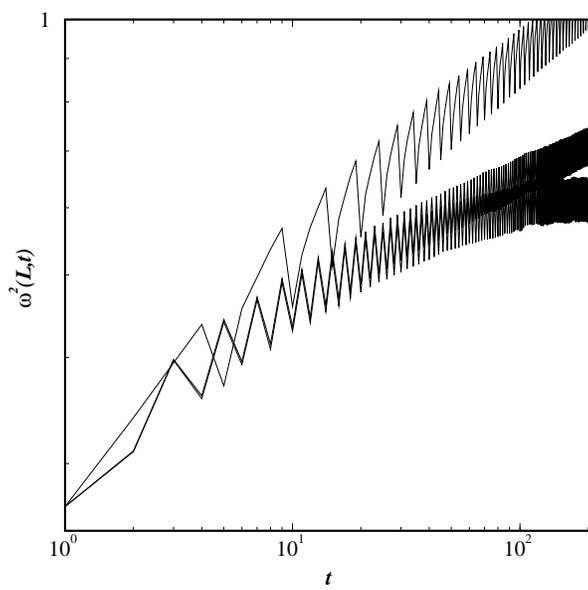


Figura 8.5: Gráfico de $\omega^2(L,t)$ vs t para o modelo bicamadas em $d = 2$. De baixo para cima mostramos: $\delta = 1$ com $\Delta t_i = 1$ e $L = 80$; $\delta = 1$ com $\Delta t_i = 1$ e $L = 2000$; $\delta = 4$ e $L = 2000$.

Observamos os amortecimentos periódicos que ocorrem no comportamento da rugosidade com o tempo não interferem no comportamento efetivo da rugosidade: há um valor médio no interior das oscilações que continua a crescer com o tempo até atingir um estado estacionário. O resultado experimental do crescimento das interfaces de *Fe/Au* mostra o mesmo cenário: a presença do surfactante não alterou o modo efetivo do crescimento da rugosidade.

Por último, é interessante verificar se há algum comportamento assintótico para a classe KPZ neste modelo. A Figura 8.6 mostra o gráfico de $\omega^2(L,t)/t^{0.50}$ vs t , onde uma reta horizontal é esperada quando $\beta = 0.25$. De baixo para cima temos $\delta = 1/4; 1; 4; 6; 8$, e o modelo KK puro.

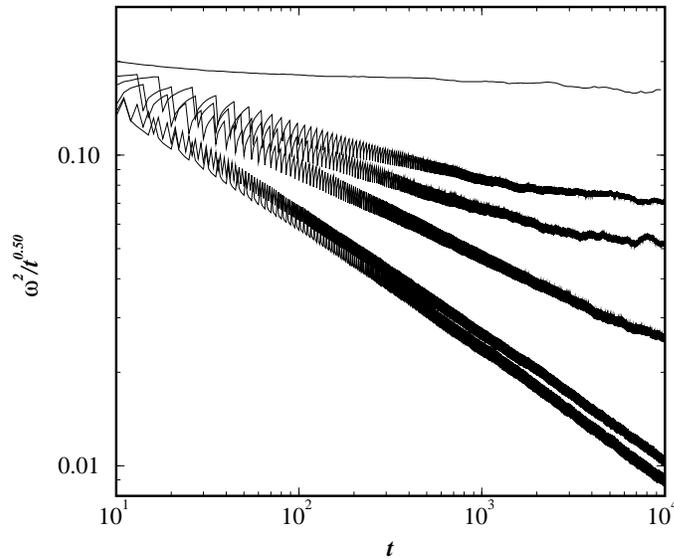


Figura 8.6: Gráfico de $\omega^2(L,t)/t^{0.50}$ vs t . De baixo para cima temos $\delta = 1/4; 1; 4; 6; 8$, e o modelo KK puro..

Observe que o comportamento efetivo da curva com $\delta = 6$ lentamente vai tornando-se horizontal, sinalizando que o comportamento efetivo assintótico pode ocorrer com $\beta \approx 0.25$. Para $\delta = 8$, a não-linearidade já é suficientemente grande, fazendo com que o tempo de *crossover* t_c seja bem pequeno. A situação oposta ocorre para os demais valores de δ , onde temos $t_c \gg 10^4$.

Apesar destes resultados sugerirem a convergência assintótica para a classe KPZ com $\delta = 6$, ressaltamos a necessidade de mais simulações com o objetivo de confirmar tal fato. Sugerimos também a obtenção de $S(L, t)$ que, conforme vimos, auxilia no estudo deste comportamento assintótico.

Capítulo 9

Conclusões e Perspectivas

Através de simulações computacionais de modelos de crescimento discretos, estudamos o *crossover* entre as classes de universalidade KPZ e EW em quatro versões distintas.

O modelo com relaxação restrita (RR) contém em sua cinética um parâmetro que controla a não-linearidade efetiva do sistema. Em $d = 1$, as simulações apontam para a existência de um expoente de crescimento efetivo. Porém, não obtivemos bons colapsos com a relação de escala FV, devido à grande dependência do expoente de crescimento com o tamanho do sistema. Simulações em larga escala, com $L = 10^5$, permitem um estado transiente extenso o suficiente para que o sistema alcance um verdadeiro comportamento assintótico. Neste limite, obtivemos um estado transiente apresentando, em tempos curtos, um expoente de crescimento $\beta \approx 1/4$, e em tempos intermediários, o valor assintótico $\beta \approx 1/3$, em acordo com o resultado teórico de Tang *et al.* [45] e de soluções numéricas da equação KPZ [41, 67]. Verificamos que o tempo de *crossover* que separa estes comportamentos de escala da rugosidade depende unicamente do parâmetro s , que por sua vez está ligado à quantidade de não-linearidade. Realizamos também simulações deste modelo em $d = 2$, com $L = 2000$, onde a razoável extensão do estado transiente nos permitiu verificar a ocorrência da mesma espécie de *crossover*.

O modelo EW-KK, e os seguintes, estão na classe de modelos cujo interesse de estudo tem crescido recentemente, pois envolve processos de deposição com dois tipos de partículas. No modelo EW-KK, o parâmetro p controla a não-linearidade. Em $d = 1$, encontramos um bom colapso da relação de escala FV em $p = 0.7$, em oposição com os resultados do modelo RR. Em larga escala, obtivemos resultados semelhantes aos encontrados no modelo anterior: o comportamento temporal da rugosidade se dá com o expoente β_{ef} em tempos curtos e, assintoticamente, com $\beta \approx 1/3$. Acreditamos que o expoente β_{ef} medido em tempos curtos seja efeito dos pequenos tempos de *crossover* t_c existentes para $p \geq 0.4$.

Assim, os comportamentos com $\beta = 1/4$ e $\beta = 1/3$ são observados com pequenos valores de p e grandes tempos de deposição, de forma que

$$1 \ll t_c \ll t_\times \quad . \quad (9.1)$$

Em $d = 2$, obtivemos, também em sistemas com $L = 2000$ um comportamento de escala que, qualitativamente, indica o mesmo tipo de *crossover*.

O modelo DB-KK combina os modelos de deposição balística e de recusa que, no limite contínuo, pertencem à classe de universalidade da equação KPZ, porém com termos não-lineares de sinais opostos. A combinação destes processos permite um cancelamento da não-linearidade efetiva. No limite quase linear, o processo não é SOS assim como o modelo EW, e isto foi a principal motivação desta proposta, pois isto também ocorre no modelo de deposição por spray proposto por Bernardes *et al* [69]. Testamos também a validade de correções logarítmicas no comportamento temporal da rugosidade que sugerem a presença de termos cúbicos não-lineares na equação de crescimento neste limite de pequena não-linearidade.

Por último, no modelo de crescimento em bicamadas, onde as cinéticas EW e KK ocorrem periodicamente, obtivemos novamente o mesmo tipo de *crossover* que ocorre nos modelos RR e EW-KK em $d = 1$. Em $d = 2$, devido ao comportamento temporal da rugosidade ser logarítmico para o modelo EW e lei de potência para o modelo KK, as oscilações na rugosidade devido às trocas de cinéticas são mais evidentes. Entretanto o valor médio da rugosidade entre estas oscilações segue um comportamento de escala que depende do parâmetro δ , que por sua vez depende da não-linearidade do sistema. Para alguns valores de δ , mostramos que a rugosidade apresenta um comportamento temporal assintótico do tipo KPZ.

Em resumo, os modelos RR, EW-KK e bicamadas apresentam o mesmo tipo de *crossover* em $d = 1$ e em $d = 2$. Este trabalho indica que o *crossover* contínuo entre as classes de universalidade EW e KPZ, observado através de variações contínuas do expoente de crescimento, é obtido em simulações com sistemas pequenos, onde o tempo de *crossover* não satisfaz as desigualdades (9.1). O *crossover* por nós observado está em acordo com resultados teóricos, obtidos por Nattermann *et al.*, da equação KPZ no limite de pequena não-linearidade.

Como perspectivas deste trabalho, pensamos que alguns modelos interessantes, como por exemplo o modelo de Amar e Family [63], possam ser revisitados, pois um *crossover* desta natureza pode estar ocorrendo e ser o responsável pelas variações contínuas nos expoentes de crescimento e da rugosidade observados. Além disso, há modelos recentes, como o trabalho de Blythe e Evans [79], onde a origem e comportamento da não-linearidade KPZ podem ser estudados com métodos utilizados neste trabalho.

Recentemente, técnicas de propagação de danos tem sido aplicadas em processos de cresci-

mento com objetivo de caracterizar a transição rugosa [80]. Resultados indicam que em superfícies lisas não ocorre a propagação de danos, e em superfícies rugosas sim. Embora em $d = 2$, os limites lineares de nossos modelos apresentem comportamentos logarítmicos da rugosidade em função do tempo t e do tamanho L , pode ser interessante estudar a morfologia dos modelos RR, EW-KK e bicamadas com esta técnica.

Apêndice A

Momentos e Cumulantes de uma distribuição

Discutimos neste apêndice o processo de geração dos cumulantes e momentos de uma distribuição estatística e a relação entre estas grandezas. Os coeficientes de assimetria S e de curtose K são definidos através de razões entre cumulantes. Entretanto, em simulações, temos acesso aos momentos das distribuições, o que torna necessário a transformação de momentos em cumulantes. Neste apêndice, introduzimos o método que possibilita tais transformações através da função característica [76].

Considere a variável aleatória contínua x e seja $p(x)$ a densidade de probabilidades associada a esta variável. O momento de ordem m desta distribuição é definido por

$$\mu_m = \langle x^m \rangle = \int_{\Omega} x^m p(x) dx \quad , \quad (\text{A.1})$$

onde Ω é o espaço amostral de $p(x)$. A distribuição é caracterizada pelo conjunto de seus momentos.

A função característica $g(k)$ é definida através da transformada de Fourier da densidade de probabilidades

$$g(k) = \int_{\Omega} p(x) e^{ikx} dx \quad . \quad (\text{A.2})$$

Desenvolvendo-se a exponencial em série de Taylor, tem-se

$$g(k) = \int_{\Omega} p(x) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} x^m dx = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \int_{\Omega} p(x) x^m dx \quad , \quad (\text{A.3})$$

que resulta em

$$g(k) = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m . \quad (\text{A.4})$$

A função característica também gera os cumulantes K_m , que são definidos por

$$g(k) = \exp \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} K_m \right) . \quad (\text{A.5})$$

As relações entre os momentos μ_m e os cumulantes K_m são obtidas igualando-se os logaritmos de (A.4) e (A.5),

$$\ln \left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} K_m . \quad (\text{A.6})$$

Expandindo o lado esquerdo em série de Taylor e tomando termos até quarta ordem em $t = ik$ tem-se [77, 78]

$$\begin{aligned} & \frac{t\mu_1}{1!} + \frac{t^2\mu_2}{2!} + \frac{t^3\mu_3}{3!} + \frac{t^4\mu_4}{4!} + \dots - \frac{1}{2} \left(\frac{t\mu_1}{1!} + \frac{t^2\mu_2}{2!} + \frac{t^3\mu_3}{3!} + \dots \right)^2 \\ & + \frac{1}{3} \left(\frac{t\mu_1}{1!} + \frac{t^2\mu_2}{2!} + \dots \right)^3 - \frac{1}{4} \left(\frac{t\mu_1}{1!} + \dots \right)^4 = \frac{tK_1}{1!} + \frac{t^2K_2}{2!} + \frac{t^3K_3}{3!} + \frac{t^4K_4}{4!} + \dots \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Reagrupando o lado esquerdo da equação anterior em ordem das potências de t e comparando com o lado direito, encontra-se as seguintes relações entre cumulantes e momentos

$$\begin{aligned} K_1 &= \mu_1 \\ K_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 \\ K_3 &= \mu_3 - 3\mu_1\mu_2 + 2\mu_1^3 \\ K_4 &= \mu_4 - 3\mu_2 - 4\mu_1\mu_3 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4 . \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

Quando as distribuições são centrais, como as distribuições de altura em nosso trabalho, a média $\mu_1 = 0$.

O coeficiente de assimetria definido por

$$S = \frac{K_3}{K_2^{3/2}} = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}} , \quad (\text{A.9})$$

é nulo quando uma distribuição é simétrica em relação à média. Quando a distribuição cai mais lentamente para os valores acima da média ($x > 0$) do que para $x < 0$, tem-se $S > 0$. Caso contrário, tem-se $S < 0$.

A curtose,

$$K = \frac{K_4}{K_2^2} = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} - 3 \quad , \quad (\text{A.10})$$

mede como $p(x)$ cai para pontos próximos ao ponto de máximo. Se $p(x)$ cair mais lentamente do que uma gaussiana, $K > 0$, caso contrário, $K < 0$.

Referências

- [1] P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1998).
- [2] J. Krug, *Adv. Phys.* **46**, 139 (1997).
- [3] A.-L. Barabási e H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1995).
- [4] T. Halpin-Healey and Y. C. Zhang, *Phys. Rep.* **254**, 215 (1995).
- [5] P. Meakin, *Phys. Rep.* **235**, 189 (1993).
- [6] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, World Sci, Singapore (1992).
- [7] F. Family and T. Vicsek, eds. *Dynamics of Fractal Surfaces*, World Sci, Singapore (1991).
- [8] D. Saupe, *The Science of Fractal Images*, Springer, Berlin (1988).
- [9] B. B. Mandelbrot, *Physica Scripta* **32**, 257 (1985)
- [10] Jens Feder, *Fractals* Plenum Publishing Corporation, New York, 1988.
- [11] J. G. Moreira, J. K. L. da Silva e S. O. Kamphorst, *J. Phys. A* **27** 8079 (1994).
- [12] S. F. Edwards e D. R. Wilkinson, *Proc. R. Soc. A* **381**, 17 (1982).
- [13] F. Family, *J. Phys. A* **19**, L441 (1986).
- [14] J. M. Kim e J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2289 (1989).
- [15] M. J. Vold, *J. Colloid Sci.***14**, 168 (1959); *J. Phys. Chem.* **63**, 1608 (1959).
- [16] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander e R. C. Ball, *Phys. Rev. A* **34** 5091 (1986).
- [17] M. Eden, *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, volume IV: *Biology and Problems of Health*, University of California Press, Berkeley (1961).
- [18] D. E. Wolf e J. Villain, *Europhys. Lett.* **13**, 389 (1990).

- [19] B. A. Mello, A. S. Chaves e F. A. Oliveira, *Phys. Rev. E* **63** No 41113 (2001).
- [20] R. Cafero, *Phys. Rev. E* **63** No 46108 (2001).
- [21] J. Krim e G. Palasantzas, *Int. J. Mod. Phys B* **9** 559 (1995).
- [22] E. A. Eklund, E. J. Snyder e R. J. Williams, *Surf. Sci.* **285** 157 (1993).
- [23] J. Krim, I. Heyvaert, C. Haesendonck e Y. Bruynseraede, *Phys. Rev. Lett.* **70** 57 (1993).
- [24] P. Herrasti, P. Ocón, L. Vásquez, R. C. Salvarezza, J. M. Vara e A. J. Arvia, *Phys. Rev. A* **45** 7440 (1992).
- [25] A. Ballestad, B. J. Ruck, M. Adamcyk, T. Pinnington e T. Tiedje, *Phys. Rev. Lett* **86** 2377 (2001).
- [26] L. Vázquez, R. C. Salvarezza e A. J. Arvia, *Phys. Rev. Lett* **79** 709 (1997).
- [27] S. Huo e W. Schwarzacher, *Phys. Rev. Lett* **86** 256 (2001).
- [28] M. E. R. Dotto e M. U. Kleinke, *Acta Microscópica* **10** 74 (2001).
- [29] M. C. Salvadori, M. G. Silveira e M. Cattani, *Thin Solids Films* **354** 1 (1999).
- [30] U. Klenradt, M. Funke, M. Fromm, B. Lengeler, J. Peisl e A. Förster, *Physica B* **221** 27 (1996).
- [31] T. Salditt, D. Lott, T. H. Metzger e J. Peisl, *Physica B* **221** 27 (1996).
- [32] R. Paniago, R. Forrest, P. C. Chow, S. C. Moss, S. S. P. Parkin e D. Cookson, *Phys. Rev. B* **56**, 13442 (1997).
- [33] J. Maunuksela *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **79** 1515 (1997); M. Myllys *at al*, *Phys. Rev. Lett.* **84** 1946 (2000).
- [34] P. L. Schilardi, O. Azzaroni, R. C. Salvarezza e A. J. Arvia, *Phys. Rev. B* **59** 4638 (1999).
- [35] M. Kardar, G. Parisi e Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
- [36] Y. Shapir, S. Raychaudhuri, D. G. Foster e J. Jorne, *Phys. Rev. Lett* **84**, 3029 (2000).
- [37] H. F. El-Nashar e H. A. Cerdeira, *Physica A* **283** 6 (2000); *Phys. Rev. E* **61** 6149 (2000); *Phys. Rev. E* **60** 1262 (1999); *Surf. Sci.* **415** 1 (1998).
- [38] C. M. Horowitz, R. A. Monetti e E. V. Albano, *Phys. Rev. E* **63** No. 066132 (2001).
- [39] C. M. Horowitz e E. V. Albano, *J. Phys. A* **34** 357 (2001).
- [40] K. Moser, J. Kertész e D. E. Wolf, *Physica A* **178**, 215 (1991).

- [41] B. Grossmann, H. Guo e M. Grant, *Phys. Rev. A* **43** 1727 (1991).
- [42] Hong Yan, David Kessler e L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 926 (1990).
- [43] Y. P. Pellegrini e R. Jullien, *Phys. Rev. A* **43**, 920 (1991).
- [44] F. Family e T. Vicsek, *J. Phys. A* **18**, L75 (1985).
- [45] T. Nattermann e L.-H. Tang, *Phys. Rev. A* **45**, 7156 (1992).
- [46] T. J. da Silva, *Modelos de Crescimento sobre Substratos Rugosos*, Dissertação de Mestrado, UFMG (1997); T. J. da Silva e J. G. Moreira, *Phys. Rev. E* **56** 4880 (1997).
- [47] J. Krug, *Phys. Rev. A* **36**, 5465 (1987).
- [48] J. Villain, *J. Phys. I* **1**, 19 (1991).
- [49] D. E. Wolf, *Phys. Rev. Lett* **67**, 1783 (1991).
- [50] T. Halpin-Healy e A. Assdah, *Phys. Rev. A* **46**, 3527 (1992).
- [51] J. Krug, P. Meakin e T. Halpin-Healy, *Phys. Rev. A* **45**, 638 (1992).
- [52] M. Plischke e Z. Rácz, *Phys. Rev. A* **32**, 3825 (1985).
- [53] J. Krug e P. Meakin, *J. Phys. A* **23**, L987 1990.
- [54] J. W. Evans, *Phys. Rev. B* **43**, 3897 (1991).
- [55] H. C. Kand e J. W. Evans, *Surf. Sci.* **271**, 321 (1992).
- [56] F. D. A. Aarão Reis, *Phys. Rev. E* **63** No. 056116 (2001).
- [57] Y. Shim e D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64** No 36110 (2001).
- [58] S. Pal e D. P. Landau, *Physica A* **267** 406 (1999).
- [59] D. E. Wolf e J. Kertész, *Europhys. Lett.* **4** 651 (1987).
- [60] P. Meakin e R. Jullien, *J. Physique* **48**, 1651 (1987).
- [61] J. M. Kim, J. M. Kosterlitz e T. Ala-Nissila, *J. Phys. A* **24** 5569 (1991).
- [62] T. Nagatani, *Phys. Rev. E* **58** 700 (1998).
- [63] J. G. Amar e F. Family, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 543 (1990).
- [64] J. M. Kim, T. Ala-Nissila e J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett* **64** 2333 (1990).
- [65] D. A. Huse, J. G. Amar e F. Family, *Phys. Rev. A* **41** 7075 (1990).
- [66] J. M. Kim, *Phys. Rev. Lett* **68** 1248 (1992).

- [67] B. M. Forrest e R. Toral, *J. Stat. Phys* **70** 703 (1992).
- [68] T. J. da Silva e J. G. Moreira, *Phys. Rev. E* **63** No 41601 (2001).
- [69] A. T. Bernardes, F. G. S. Araújo e J. R. T. Branco, *Phys. Rev. E* **58**, 1132 (1998).
- [70] M. Paczuski, M. Barma, S. Majumdar e T. Hwa, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2735 (1992).
- [71] P. Devillard e H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **66**, 1089 (1992).
- [72] P.-M. Binder, M. Pacsuski e M. Barma, *Phys. Rev. E* **49**, 1174 (1994).
- [73] S. K. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff e H. B. Stanley, *Phys. Rev. B* **38**, 2297 (1988).
- [74] A.-L. Barabasi, *Phys. Rev. Lett* **70**, 4102 (1993).
- [75] S. Das Sarma e P. Tamborenea, *Phys. Rev. Lett* **66**, 325 (1991).
- [76] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Editora Universidade de São Paulo (2001).
- [77] N. A. Rahman, *A Course in Theoretical Statistics*, Charles Griffin & Co. (1968).
- [78] J. K. Patel, C. H. Kapadia e D. B. Owen, *Handbook of Statistical Distributions*, Marcel Dekker Eds. (1976).
- [79] R. A. Blyte e M. R. Evans, *Phys. Rev. E* **64** No 51101 (2001).
- [80] Y. Kim, *Phys. Rev. E* **64** No 27101 (2001).