

**Leis de Escala e *Crossovers* em
Modelos de Crescimento**
Sidiney Geraldo Alves

Leis de Escala e *Crossovers*
em
Modelos de Crescimento

Sidiney Geraldo Alves

Orientador: Prof. José Guilherme Moreira

Co-orientador: Prof. Silvio da Costa Ferreira Jr. (DPF/UFV)

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para
obtenção do grau de Doutor em Física.

Outubro - 2006

Aos meus pais,
Danilo Bento Alves
Maria José Alves
e à minha amada esposa, Leticia.

Agradecimentos

Aos meus pais, sem os quais esse momento não seria possível. Pelas cobranças e pelos exemplos ao longo de toda minha vida.

À Leticia, minha amada esposa, pelo seu amor e companheirismo.

Aos orientadores, professores José Guilherme e Silvio (DPF/UFV) pelos preciosos ensinamentos e discussões.

Aos professores do DF/UFMG, por todos os ensinamentos que recebi. Em especial, aos professores do grupo de Física Estatística por trabalharem em função de equipar o laboratório sem o qual não seria possível a realização de todos os trabalhos dessa tese de doutoramento, e particularmente ao professor Jafferson pelo tempo dedicado a administração do mesmo.

Aos funcionários do DF/UFMG, por todos os serviços prestados.

Aos colegas, agradeço a todos os colegas da pós-graduação, em particular àqueles do laboratório de Física Estatística.

Aos professores do DPF/UFV, pela hospitalidade e amizade. Em especial, aos professores Marcelo e José Arnaldo pela leitura do capítulo de revisão da tese.

À comunidade que desenvolve o Linux e softwares livres (Latex, Grace, FORTRAN, Xfig, Gnome, etc.), através dos quais todos os trabalhos dessa tese foram desenvolvidos.

Ao CNPq, pelos quatro anos de bolsa.

Resumo

Nesta tese de doutoramento, estudamos leis de escalas e *crossovers* em modelos de crescimento de agregados e interfaces. Nossa abordagem consiste em uma análise de modelos discretos por meio de simulações com o objetivo de investigar suas classes de universalidade e o aparecimento de *crossovers*. Na primeira parte da tese, analisamos as propriedades de escala em interfaces. O primeiro modelo de crescimento de interfaces estudado foi construído para capturar os efeitos da competição entre a deposição e difusão de partículas. Encontramos uma transição no comportamento da rugosidade, que exhibe um expoente de crescimento referente à classe de universalidade de Mullins-Hering (MH) para tempos curtos e à classe de Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) para tempos longos. Em seguida, investigamos o modelo de Wolf-Villain com uma modificação na regra de crescimento introduzida para estudar *crossovers*. Concluímos esta parte da tese analisando estruturas com simetria radial, com atenção particular a detalhes associados à estratégia de medida da rugosidade que podem levar a conclusões equivocadas dos expoentes e, conseqüentemente, da classe de universalidade dos sistemas considerados. Na parte seguinte, consideramos transições morfológicas em modelos de agregação de partículas. Estudamos generalizações do modelo de agregação limitada por difusão (DLA). Na primeira, consideramos o efeito de uma tendência nas trajetórias das partículas. Mostramos que os agregados apresentam uma transição morfológica entre o modelo DLA e o modelo de agregação balística (BA) e caracterizamos quantitativamente essa transição por meio do comprimento característico. Em seguida, estudamos a anisotropia em agregados obtidos no modelo DLA através de uma generalização que inclui uma probabilidade de crescimento às regras de evolução e da aplicação da técnica de redução de ruído. Esse modelo apresenta um rico comportamento quando variamos os parâmetros envolvidos. Finalizamos essa tese com um modelo de agregação o qual consiste de uma mistura de partículas que executam caminhadas aleatórias e trajetórias balísticas. Neste modelo, encontramos uma transição suave de agregados semelhantes àqueles do modelo DLA para os do BA.

Abstract

In this doctoral thesis, we studied, through simulations of discrete models, the scaling laws, universality classes and crossovers in aggregation processes and interfaces growth. In the first part of the thesis, we analyzed the interfaces scaling in growth models. Initially, a interface growth model that captures the effects of the competition between particle deposition and diffusion was studied. We found a transition in the roughness behavior, which presents a growth exponent related to the Mullins-Hering (MH) universality class for short times and the Villain-Lai-Das Sarma class for long times. In addition, we investigated a modified Wolf-Villain model aiming to study the crossovers found in this model. We conclude this part of the thesis by analyzing structures with radial symmetry, with particular attention to the details associated to the roughness measure strategy, which can lead to erroneous conclusions about the exponents and, consequently, the universality class of the considered system. In the second part, we considered morphological transitions in modified diffusion-aggregation growth models. In the first one, the effect of a bias in the particle trajectories was studied. We show that the aggregates exhibit a morphological transition between DLA and ballistic aggregation (BA) models and characterized quantitatively this transition through the characteristic length. In the next work, the anisotropy of aggregates obtained with the DLA model was deeply analyzed through the inclusion in its evolution rules of a neighborhood dependent growth probability and the application of noise reduction technique. This model exhibit a rich behavior when we vary the involved parameters. We concluded the thesis with the investigation of an aggregation model which consist of a mixture of Brownian and ballistic wandering particles. In this model, we found a smooth transition from DLA to BA-like aggregates.

Sumário

1	Introdução	1
I	Leis de Escalas em Modelos de Crescimento	5
2	Leis de Escala e Modelos de Crescimento	6
2.1	Fractais e Leis de Escala	6
2.1.1	Auto-similaridade e Auto-afinidade	6
2.1.2	Caracterização de Estruturas Fractais	11
2.2	Modelos de Crescimento de Agregados	13
2.2.1	Agregação Limitada por Difusão	14
2.2.2	Agregação Balística	19
2.3	Classes de Universalidade em Interfaces	20
2.3.1	Caracterização de Interfaces	20
2.3.2	Equações Estocásticas	25
2.3.3	Correlações e <i>Crossover</i> em Interfaces	33
2.4	Modelos de Crescimento de Interfaces	36
2.4.1	Deposição Aleatória	36
2.4.2	Deposição Aleatória com Relaxação - Modelo de Family	36
2.4.3	Deposição Aleatória com Recusa - Modelo de Kim-Kosterlitz	38
2.4.4	Deposição Balística - Modelo de Vold	39
2.4.5	Deposição Aleatória com Difusão de Partículas	41
2.4.6	Modelos de Crescimento e Classes de Universalidade	42
II	Modelos de Crescimento de Interfaces	44
3	Efeito da Difusão em um Modelo de Crescimento de Interfaces	45
3.1	Introdução	45
3.2	Modelo	46

3.3	Resultados	48
3.3.1	Simulações em $d = 1 + 1$ dimensões	48
3.3.2	Simulações em $d = 2 + 1$ dimensões	53
3.4	Formação de Morros	56
3.5	Conclusões	58
4	Crossover no Modelo de Wolf-Villain	60
4.1	Introdução	60
4.2	O Modelo de Wolf-Villain	61
4.3	Regra de Evolução Probabilística	62
4.4	Resultados	63
4.4.1	Resultados em $1 + 1$ Dimensões	63
4.4.2	Resultados em $2 + 1$ Dimensões	68
4.5	Conclusões	72
5	Teoria de Escala em Sistemas com Simetria Radial	74
5.1	Introdução	74
5.2	O modelo de Eden Fora da Rede	75
5.3	Interface dos Agregados e Flutuações dos Centros de Massa	78
5.4	Modelos de crescimento na rede quadrada	82
5.5	Conclusões	84
III	Modelos de Agregação de Partículas	86
6	Transição Morfológica entre os Modelos DLA e BA	87
6.1	Introdução	87
6.2	Agregação de Partículas com Tendência nas Caminhadas	88
6.3	Modelo de Agregação de Caminhantes com Tendências Aleatórias	90
6.4	Caminhada e Otimização	93
6.5	Resultados	95
6.5.1	Validade do Algoritmo Otimizado	95
6.5.2	Caracterização da Transição Morfológica	96
6.5.3	Relações de Escala	101
6.6	Transição na Caminhada	101
6.7	Conclusões	104

7	Estudo da Anisotropia em um Modelo DLA Generalizado	105
7.1	Introdução	105
7.2	Redução de Ruído no Algoritmo de Bogoyavlenskiy	106
7.3	Algoritmo Generalizado	109
7.4	Conclusões	114
8	Agregação em uma Mistura de Partículas	117
8.1	Introdução	117
8.2	Modelo e Implementação Computacional	117
8.3	Distribuições Radial e Angular de Partículas	119
8.4	Conclusões	126
IV	Conclusões e Perspectivas	127
	Referências Bibliográficas	131

Capítulo 1

Introdução

Processos de crescimento naturais podem levar a estruturas complexas, que possuem irregularidades em diferentes escalas de observação. Tais processos, em sua maioria fora do equilíbrio, são encontrados nos mais diferentes fenômenos físicos. Como exemplos podemos citar eletrodeposições [1], formação de dedos viscosos (*viscous fingering*) em deslocamento fluido-fluido [2], crescimento de colônias de bactérias [3], crescimento de neurônios [4], etc. Todos estes fenômenos possuem uma característica em comum: um grande número de constituintes que interagem mutuamente de uma maneira muitas vezes simples e levam a estruturas complexas e/ou comportamentos não-lineares. Devido a essas características a compreensão de tais processos de crescimento não é uma tarefa fácil. As características dessas estruturas são determinadas por um conjunto de fenômenos que ocorrem durante seu processo de formação. Por exemplo, no crescimento de colônia de bactérias, se o meio é rico em alimento, o padrão gerado é compacto pois a competição por nutrientes não é agressiva (figura 1.1(a)). Já quando existe uma escassez de nutriente o padrão gerado é ramificado devido a instabilidades, o que maximiza a área de contato com o meio (figura 1.1(b)) e otimiza o processo de procura por nutriente.

Em alguns processos, podemos encontrar estruturas que apresentam a propriedade de invariância sob mudanças de escala de observação. Se o fator de escala usado nessa mudança é o mesmo para as diferentes direções dizemos que o objeto é auto-similar. As estruturas que apresentam a propriedade de auto-similaridade são conhecidas como objetos fractais [5, 6, 7, 8] e suas características podem ser estudadas usando a geometria fractal, introduzida por Mandelbrot [5].

Muitos processos de crescimento envolvem uma superfície de separação entre diferentes meios. Essas superfícies podem apresentar irregularidades em diferentes escalas de observação. Por exemplo, ao caminharmos sobre uma montanha podemos encontrar uma hierarquia de subidas e descidas de todos os tamanhos. Para quem caminha ao longo do perfil de uma montanha são visíveis estruturas (subidas e descidas) em uma enorme faixa de escalas que

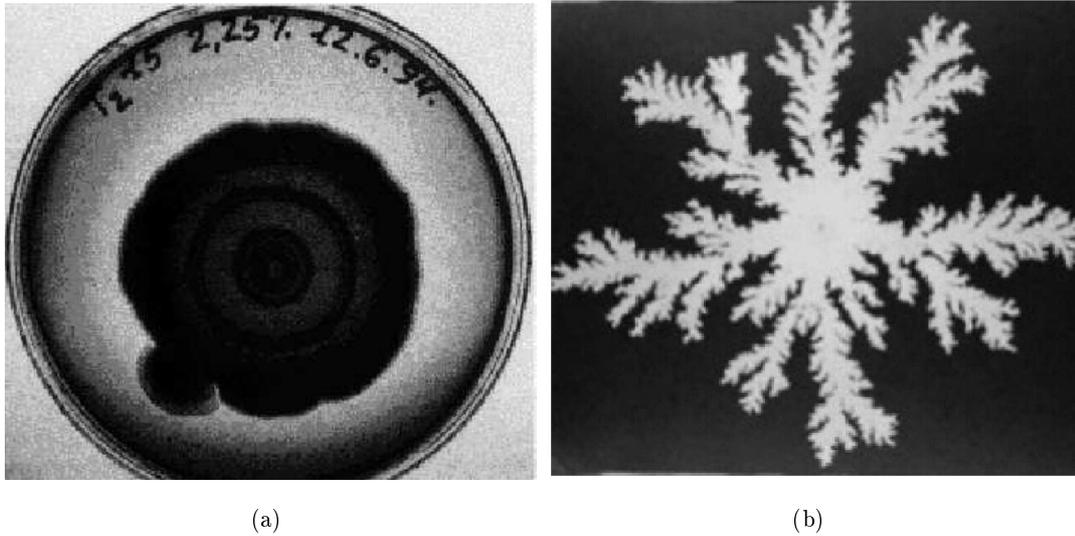


Figura 1.1: Em (a) crescimento de colônia de bactérias em um meio rico em alimento. Em (b) um meio com alimentação escassa. As figuras foram extraída da página: <http://star.tau.ac.il/inon/baccyber0.html> em novembro de 2005.

vão desde milímetros até quilômetros. No entanto, para se observar a invariância sob uma mudança de escala em algumas interfaces é necessário fatores de escala diferentes para direções diferentes. Estas interfaces são denominadas auto-afins.

Passos importantes foram dados na compreensão da dinâmica de processos de crescimento por meio do estudo de modelos discretos e de equações fenomenológicas de crescimentos [7, 9]. Essas aproximações procuram capturar características físicas essenciais do processo de crescimento. Na aproximação de modelos discretos procuramos reproduzir, através de regras simples, os processos mais relevantes que ocorrem durante a evolução. Na aproximação via equações fenomenológicas procuramos descrever o sistema no limite termodinâmico (escalas de comprimentos “grandes”), ou seja, os detalhes microscópicos são ignorados e apenas suas médias são consideradas. A construção dessas equações baseia-se em argumentos físicos e/ou de princípios de simetria. Em ambas aproximações procuramos por expoentes críticos associados às leis de potência que determinam a classe de universalidade do sistema.

Um processo de crescimento baseado na agregação de partículas de grande interesse é o modelo de agregação limitada por difusão (DLA, de *diffusion-limited aggregation*) [10]. Nesse modelo, partículas são lançadas de pontos muito distantes do agregado e executam caminhadas aleatórias até alcançarem um sítio primeiro vizinho do agregado onde são fixadas irreversivelmente. Versões na rede e fora dela foram muito estudadas [11, 12, 13]. Apesar de sua simplicidade, o modelo DLA gera estruturas complexas com propriedades de escala não triviais [7, 8, 14, 15]. Outro modelo importante, conhecido como agregação balística (BA, de *ballistic aggregation*), é obtido quando substituímos a caminhada aleatória no modelo DLA por trajetórias balísticas. Apesar dos agregados gerados pelo modelo BA apresentarem estruturas

homogêneas, elas possuem uma relação de escala não trivial da densidade e da largura da zona ativa como funções do número de partículas no agregado.

Modelos de deposição do tipo sólido sobre sólido foram propostos para compreender melhor a dinâmica de crescimento de interfaces [7, 9]. Em particular, os modelos de Wolf-Villain (WV) [16] e Das Sarma-Tamborenea (DT) [17] são de grande importância porque foram pioneiros no estudo da difusão de partículas nas interfaces, além de serem a primeira evidência numérica demonstrando expoentes de escala diferentes daqueles das classes de universalidade de Edward-Wilkinson (EW) [18] e Kadar-Parisi-Zhang (KPZ) [19].

O principal objetivo dessa tese é estudar leis de escala e transições no crescimento de interfaces e de agregados por meio de modelos discretos. O capítulo 2 é dedicado a uma revisão de literatura, em que descrevemos os principais modelos de crescimento por agregação e de interfaces, bem como algumas das técnicas utilizadas em suas caracterizações. Nos demais capítulos apresentamos os trabalhos da tese, procurando apresentá-los da maneira mais independente possível (as conclusões de cada trabalho são incluídas no final dos capítulos). Estes trabalhos foram divididos em duas partes, na primeira estudamos classes de universalidades e *crossovers* em modelos de crescimento de interface (denominados modelos de deposição). No capítulo 3 estudamos um modelo de crescimento de interface para abordar a competição entre a deposição e a difusão das partículas, bem como, a formação de morros [20, 21, 22] quando uma tendência nas caminhadas é incluída. Neste trabalho, mostramos que o modelo apresenta um *crossover* da classe de universalidade de Mullins-Hering (MH) para a de Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) em $1 + 1$ dimensões. Entretanto, em $2 + 1$ dimensões, o mesmo *crossover* não é observado e o modelo apresenta expoentes relacionados à classe de universalidade VLDS. Além disso, observamos que uma tendência nas caminhadas leva a instabilidades e, conseqüentemente, a interfaces com formação de morros e uma mudança no expoente de crescimento para um valor assintótico próximo de $1/2$. Mostramos também que as grandes flutuações nas interfaces, as paredes dos morros, são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento. No capítulo 4, estudamos uma versão modificada do modelo de Wolf-Villain (WV). Neste trabalho, investigamos o *crossover* no modelo WV pela introdução de uma probabilidade de crescimento que privilegia os sítios cujo número de ligações é maior. Mostramos que essa modificação acelera o *crossover* da classe de universalidade MH para a EW, em $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões. Entretanto, como essa modificação introduz uma recusa de partículas, um *crossover* para a classe de universalidade KPZ aparece. No capítulo 5, estudamos as propriedades de escala de interfaces com simetria radial utilizando agregados obtidos pelo modelo de crescimento de Eden fora da rede e por três modelos na rede quadrada [23]. Nessa análise, mostramos que diferentes estratégias adotadas para medir a rugosidade da interface podem levar a expoentes de crescimento diferentes.

Na segunda parte da tese, estudamos transições morfológicas em modelos de crescimento

de agregados (denominados modelos de agregação). No capítulo 6, propomos um modelo para analisar a transição morfológica entre os modelos DLA e BA. Nesse modelo, introduzimos um parâmetro de generalização λ que controla a tendência da caminhada das partículas [24]. Encontramos uma transição de agregados fractais (DLA) em escalas de comprimento pequenas para objetos homogêneos (BA) em escalas grandes. A transição entre os regimes de escala do DLA e BA foi determinada usando o comprimento característico ξ que diverge quando $\lambda \rightarrow 1$ seguindo uma lei de potência. No capítulo 7, estudamos a anisotropia no modelo DLA através de uma generalização que inclui uma probabilidade de agregação das partículas que alcançam o agregado, essa probabilidade é proporcional ao número de vizinhos ocupados [25]. Essa generalização é construída baseada em um algoritmo proposto por Bogoyavlenskiy [26] para gerar agregados isotrópicos obtidos usando o modelo DLA na rede. No capítulo 8, apresentamos um modelo que considera agregação em uma mistura de partículas [27] introduzido para estudar a transição entre os modelos DLA e BA fora da rede. Esse modelo, que inclui os de agregação limitada por difusão e de agregação balística como casos limites, é controlado por uma probabilidade p que corresponde à fração de partículas que constituem o agregado adicionadas seguindo as regras do modelo de agregação balística. Encontramos que a dimensão fractal d_f cresce continuamente como uma função de p de um valor muito próximo ao obtido para agregados do modelo DLA a valores próximos dos agregados do BA. No capítulo IV, finalizamos essa tese de doutoramento apresentando um resumo das conclusões de cada trabalho desenvolvido, bem como as perspectivas desses trabalhos e de outros relacionados.

Parte I

Leis de Escalas em Modelos de Crescimento

Capítulo 2

Leis de Escala e Modelos de Crescimento

2.1 Fractais e Leis de Escala

Observando estruturas encontradas na natureza, tais como árvores bronquiais, formações dendríticas de neurônios, colônias de bactérias ou fungos, eletrodepósitos, dentre outras, encontramos irregularidades em uma ampla faixa de escalas de comprimento. Por exemplo podemos facilmente notar que o galho de uma árvore se parece com a árvore ou que um pequeno ramo de uma couve-flor se parece com a couve-flor inteira. Essa característica de invariância sob mudanças de escala de observação (uma parte se parece com o todo) é chamada de auto-similaridade. Objetos que apresentam essa propriedade são denominados objetos fractais. Em geral, os objetos auto-similares não podem ser adequadamente tratados com os métodos analíticos usuais. De fato, as ferramentas da geometria fractal, introduzida por Mandelbrot [5], fornecem uma descrição matemática quantitativa mais completa desses sistemas auto-similares [6, 7].

Quando falamos em auto-similaridade ou invariância sob mudanças de escala de observação, usamos o mesmo fator na transformação de escala para todas as direções. Entretanto, em alguns casos, como os contornos das montanhas pertencentes a uma cadeia [28] é necessário um fator de escala apropriado para cada direção do espaço, de maneira que as suas propriedades permaneçam invariantes. Os objetos que possuem essa característica são denominados auto-afins.

2.1.1 Auto-similaridade e Auto-afinidade

Devemos observar que quando fazemos sucessivas mudanças na escala de observação de um objeto real podemos alcançar um limite para a transformação de escala, o tamanho dos

constituintes básicos ou o tamanho do objeto. Por exemplo, quando observamos um galho de uma árvore ele se parece com a árvore. Se passarmos a olhar para um pequeno galho retirado do primeiro e assim sucessivamente, alcançaremos um ramo (ou caule) que em nada se parece com a árvore ou seus galhos. Outro fato muito importante é que nos exemplos da couve flor e da árvore, os ramos apenas se parecem com o todo, eles não são uma reprodução exata da couve flor ou da árvore. Para objetos nos quais a invariância de escala não é exata, devemos falar em auto-similaridade estatística. Contudo, podemos construir estruturas matemáticas exatas usando, por exemplo, um processo recursivo que produz objetos para os quais não existem limites inferior ou superior e levam a uma reprodução exata entre duas realizações distintas ou entre duas partes do objeto. Tais objetos são conhecidos como objetos auto-similares determinísticos. Dependendo do método de construção, partes são retiradas ou adicionadas a uma estrutura a cada iteração. Para ilustrar tais objetos, usaremos o triângulo de Sierpinski que é gerado a partir de um triângulo equilátero totalmente preenchido de lado ℓ_0 , conforme ilustrado na figura 2.1. O triângulo de Sierpinski pode ser obtido através do seguinte procedimento: a cada iteração (ou passo) k , removemos um triângulo equilátero de lado $\ell_{k-1}/2$ de cada triângulo totalmente preenchido. Esse procedimento deve ser repetido infinitas vezes para se obter o objeto auto-similar determinístico. Como pode ser visto a partir da região destacada no passo $k = 3$, a estrutura no passo $k - 1$ é uma ampliação de uma das partes no passo k .

Uma característica importante de um objeto fractal é que, em geral, sua dimensão não é inteira e é menor que a dimensão d do espaço no qual está imerso. O conceito de dimensão de um objeto pode ser ligado usualmente a duas idéias: o número de coordenadas necessárias

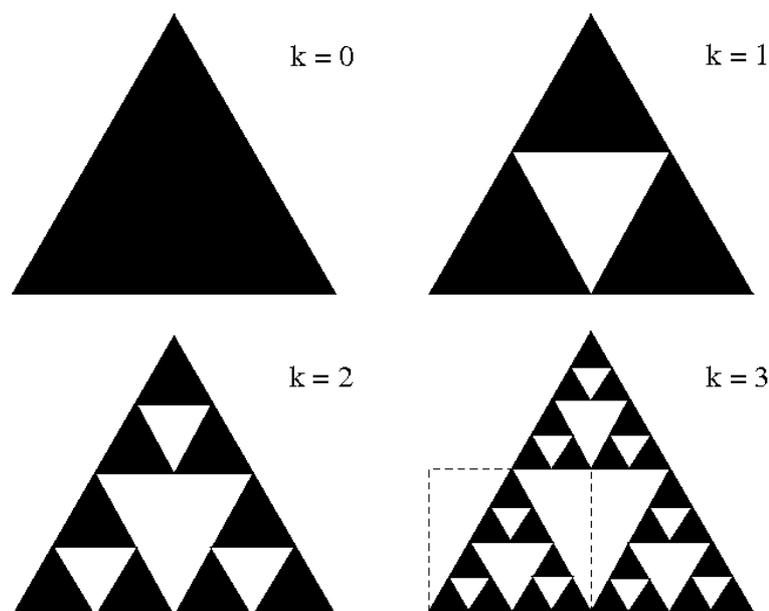


Figura 2.1: Ilustração da construção do triângulo de Sierpinski.

para localizar um ponto no espaço e a noção de medida de comprimento [29]. Usando a primeira idéia, Poincare e Brouwer discutiram o conceito da chamada dimensão topológica. Essa noção afirma que um objeto possui n dimensões quando podemos separá-lo em duas partes desconexas usando um objeto de $n - 1$ dimensões. Assim, considerando que um ponto possui dimensão 0 (zero), uma reta possui dimensão 1 (um) uma vez que ela pode ser separada retirando apenas um de seus pontos. Por sua vez, um plano, que pode ser dividido em dois retirando uma reta, possui dimensão 2 (dois) e assim sucessivamente.

O volume de um objeto, sendo ele regular ou fractal, pode ser determinado por

$$V(\epsilon) = N(\epsilon)\epsilon^d \quad (2.1)$$

em que $N(\epsilon)$ é o número mínimo de caixas de lado ϵ necessário para cobrir todo o objeto e $d \geq d_{\text{objeto}}$ é a dimensão das caixas usadas, normalmente a mesma do espaço de imersão. A medida do número de caixas de lado ϵ necessárias para cobrir um objeto (uma medida relacionada ao aspecto métrico do conceito de dimensão) também fornece uma maneira de medir a dimensão do objeto. Essa pode ser denominada dimensão de capacidade, inicialmente definida por Kolmogorov. A dimensão de capacidade é uma medida do quanto o objeto ou conjunto considerado preenche o espaço no qual está imerso. Em geral, obtemos

$$N(\epsilon) = A\epsilon^{-D}, \quad (2.2)$$

em que a constante A é chamada de lacunaridade e D é a dimensão do objeto. Para uma dada dimensão, quanto maior a lacunaridade, maior a quantidade de regiões vazias no interior do objeto. Note que para objetos regulares $D = d$ é inteiro e pode coincidir com a dimensão do espaço de imersão. Para objetos fractais $D = d_f$, a dimensão fractal do objeto. Essa denominação, dimensão fractal, é devido ao fato que esta dimensão não é inteira e, em geral, $d_f < d$. Como consequência, quando tomamos o limite de $\epsilon \rightarrow 0$ (na equação (2.1)), o volume de objetos regulares vai para um valor finito, uma vez que de acordo com a equação (2.2)

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-d}.$$

Entretanto, para um objeto fractal o volume vai a zero pois,

$$V(\epsilon) \sim \epsilon^{(d-d_f)}$$

e $d - d_f > 0$. Por outro lado, a superfície de uma estrutura fractal pode ser muito grande (ou até mesmo infinita). Assim, ao fazer uma medida sobre o objeto usando uma caixa com a mesma dimensão do espaço de imersão do objeto, essa medida tende a 0 no limite $\epsilon \rightarrow 0$, mas quando a dimensão da caixa é menor que a dimensão de imersão e que a do objeto, a medida diverge. Isto deve-se ao fato que os objetos fractais possuem dimensão não inteira menor que a do espaço em que ele está imerso.

No caso do triângulo de Sierpinski, com $\ell_0 = 1$, o número de caixas de tamanho $\epsilon = 1/2^k$ necessárias para cobrir a estrutura no passo k é $N(\epsilon) = 3^k$, assim seu volume é dado por

$$V(\epsilon) = 3^k \left(\frac{1}{2^k} \right)^d = \left(\frac{3}{4} \right)^k, \quad (2.3)$$

em que usamos $d = 2$ (dimensão das caixas usadas no recobrimento). No limite $k \rightarrow \infty$ a equação (2.3) fornece $V \rightarrow 0$. A dimensão fractal, que pode ser determinada exatamente a partir da equação (2.2), é

$$d_f = -\frac{\ln [N(\epsilon)]}{\ln(\epsilon)} = -\frac{\ln 3^k}{\ln(1/2^k)} = \frac{\ln 3}{\ln 2} = 1.584\dots \quad (2.4)$$

Conforme mencionado anteriormente, objetos fractais são invariantes sob mudanças de escala isotrópicas. Entretanto, existem objetos que necessitam transformações de escala anisotrópicas para manter a invariância. Tais objetos são denominados auto-afins. Estamos interessados particularmente em estruturas que podem ser descritas por uma função unívoca $h(\vec{x})$ (a altura de uma interface, por exemplo), em que \vec{x} representa uma posição. Para deixar a descrição mais clara, limitar-nos-emos ao caso 1 + 1 dimensional no qual $h(\vec{x}) = h(x)$ é uma função apenas de uma coordenada espacial. Quando $h(x)$ é uma função auto-afim, é válida a relação

$$h(x) = b^{-H} h(bx), \quad (2.5)$$

em que b é o fator de escala na direção x , b^H a transformação apropriada na direção perpendicular a x e H é um expoente, denominado expoente de Hurst. Esta equação retrata o fato que uma função auto-afim deve ser escalada de maneiras distintas em cada direção para manter a invariância. No caso em que $H = 1$, a transformação é isotrópica e o sistema é auto-similar.

Da mesma maneira que os objetos fractais, as curvas auto-afins podem ser obtidas através de um processo recursivo. Como exemplo, partiremos da diagonal de um retângulo de comprimento 4ℓ e altura 2ℓ mostrada na figura 2.2(a). A curva auto-afim é obtida usando o seguinte procedimento: a cada passo k substituímos os segmentos de comprimento $\ell/4^k$ pela estrutura mostrada na figura 2.2(b). Para obter o expoente de Hurst dessa curva, vamos utilizar o trecho destacado na figura 2.2(c). Para recuperarmos a figura original em (b) devemos fazer as transformações de escala

$$x \rightarrow x' = b_{\parallel} x \quad \text{e} \quad h \rightarrow h' = b_{\perp} h$$

com $b_{\parallel} = 4$ e $b_{\perp} = 2$. Da equação (2.5) temos que $b_{\parallel} = b$ e $b_{\perp} = b^H$. Assim $b_{\perp} = b_{\parallel}^H$ e

$$H = \frac{\ln 2}{\ln 4} = \frac{1}{2}. \quad (2.6)$$

Outro exemplo de curva auto-afim é obtido usando um caminhante aleatório. Considere uma partícula na posição $x = 0$ no instante inicial. A cada passo, a partícula realiza ao acaso

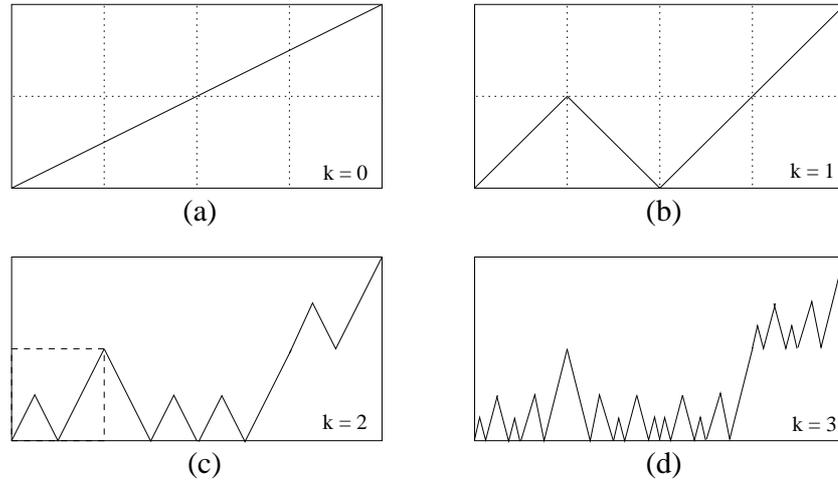


Figura 2.2: Ilustração de um método simples para se obter uma curva auto-afim.

um salto de comprimento 1 a direita ou a esquerda. Um exemplo da função $x(t)$ após 10^4 passos é mostrada na figura 2.3(a). Em 2.3(b) a parte destacada em 2.3(a) é ampliada usando o mesmo fator de escala em ambas as direções. Já em 2.3(c), usamos um fator diferente para cada direção. Repare que a curva em (b) parece alongada na direção vertical quando comparada com a original. Já a curva em (c) se parece muito com a curva original. Para obter a curva em (c) usamos, $b_{\parallel} = b^2$ e $b_{\perp} = b$, ou seja, $H = 1/2$, pois o desvio quadrático médio (uma medida da largura da curva auto-afim) em uma caminhada aleatória é dado por $\sigma \sim t^{1/2}$.

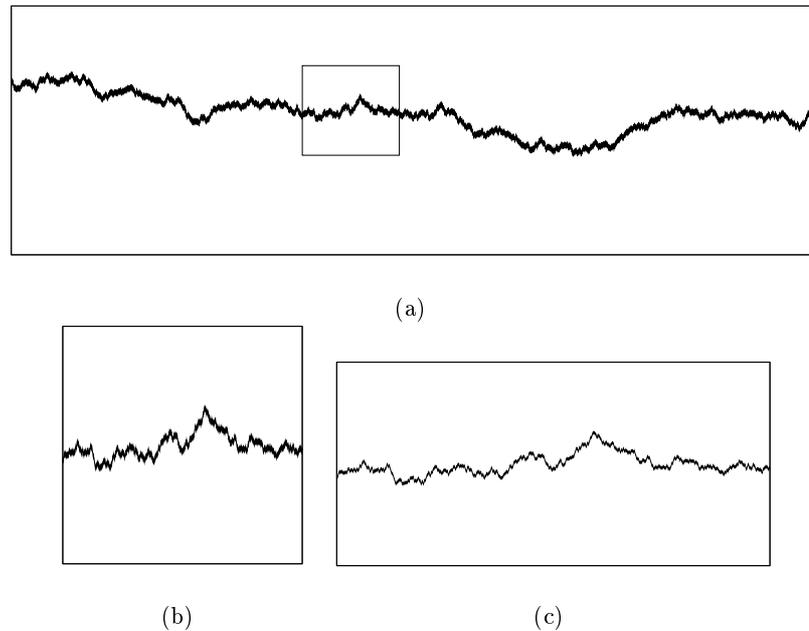


Figura 2.3: (a) Curva auto-afim gerada em uma caminhada aleatória após 10^4 passos. Em (b) a parte destacada em (a) é ampliada usando o mesmo fator de escala em ambas as direções. Já em (c), um fator apropriado para cada direção foi usado.

2.1.2 Caracterização de Estruturas Fractais

Nesta seção, descreveremos algumas das principais medidas quantitativas que podem ser utilizadas para caracterizar tanto estruturas obtidas através de modelos quanto aquelas encontradas na natureza [7, 8]. Em ambos os casos consideraremos que as posições das partículas do sistema considerado são designadas por um conjunto de variáveis \vec{r}_i .

Método Massa-Raio

Um método simples muito utilizado para determinar a dimensão fractal é o método massa-raio. Este método consiste basicamente em determinar a massa $M(r)$ do aglomerado no interior de um círculo de raio r , ou seja, contar o número de sítios pertencentes ao agregado no interior de um círculo de raio r . Em geral, $M(r)$ segue a relação

$$M(r) \sim r^D \quad (2.7)$$

em que D é a dimensão do objeto. No caso de objetos fractais $D = d_f$. Portanto, para obter a dimensão fractal basta medir a inclinação do gráfico de $\ln M$ versus $\ln r$.

Raio de Giração

No estudo de sistemas que apresentam uma simetria radial (por exemplo objetos cujo crescimento ocorre a partir de uma semente e que possui simetria esférica) é comum utilizar o cálculo do raio de giração r_g definido por

$$r_g = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_{cm})^2 \right]^{1/2}, \quad (2.8)$$

em que N é o número de partículas no agregado, \vec{r}_i é a posição da i -ésima partícula e \vec{r}_{cm} a posição do centro de massa. A evolução do raio de giração pode ser estudada como uma função do número de partículas no agregado N . Para objetos auto-similares, a relação entre r_g e N segue uma lei de potência, ou seja,

$$r_g \sim N^\nu, \quad (2.9)$$

em que ν é o expoente do raio de giração. Como $N \propto M$ e $r_g \propto r_a$, em que r_a é o raio do agregado. Assim, encontramos

$$r_g^{1/\nu} \sim r_a^{d_f} \Rightarrow \nu = 1/d_f.$$

Função de Correlação

A função de correlação tem sido extensivamente utilizada para a caracterização de sistemas desordenados em física estatística. Uma das medidas mais usadas na caracterização de agregados fractais é a função de correlação da densidade entre dois pontos $C(\vec{r})$ definida por

$$C(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\{\vec{r}_0\}} \rho(\vec{r}_0) \rho(\vec{r}_0 + \vec{r}), \quad (2.10)$$

em que $\rho(\vec{r}) = 1$ quando o ponto pertence ao agregado e $\rho(\vec{r}) = 0$, caso contrário. O somatório se estende sobre todas as N partículas do agregado. Considerando objetos homogêneos e isotrópicos $C(\vec{r})$ depende apenas da distância r , ou seja, $C(\vec{r}) = C(r)$, e $C(r)$ representa a probabilidade de encontrarmos duas partículas do objeto separadas por uma distância r . Um procedimento para medir a correlação entre duas partículas é ilustrado na figura 2.4. Neste procedimento, usamos dois círculos concêntricos colocados sobre uma partícula do agregado usada para referência. O elemento de área delimitado entre os dois círculos concêntricos é utilizado para determinar o número de sítios pertencentes ao agregado a uma distância r da partícula de referência. Uma média é feita usando todas as partículas do agregado como referência para uma mesma distância r .

Para objetos auto-similares espera-se que a função de correlação seja uma função homogênea de ordem α , ou seja,

$$C(r) = b^{-\alpha} C(br), \quad (2.11)$$

o que implica na forma algébrica

$$C(r) \propto r^{-\alpha}. \quad (2.12)$$

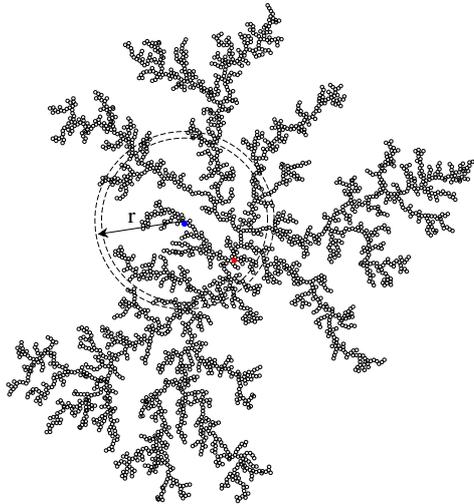


Figura 2.4: Ilustração de um procedimento para determinação da função de correlação entre dois pontos.

O expoente α é chamado co-dimensionalidade do objeto, pois satisfaz a relação de escala

$$\alpha = d - d_f, \quad (2.13)$$

em que d é a dimensão de imersão do objeto e d_f sua dimensão fractal. A relação (2.13) pode ser obtida da seguinte forma,

$$N(r) \sim \int_0^r C(r') d^d r' \Rightarrow r^{d_f} \sim r^{d-\alpha}$$

Em que $C(r')$ fornece uma medida da densidade a uma distância r' ao redor de um ponto.

Outra medida importante quando a hipótese de isotropia não é preenchida é a função de correlação tangencial (ou angular) $C_r(\theta)$ definida em $d = 2$ como [30]

$$C_r(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{\theta'} \rho_r(\theta') \rho_r(\theta' + \theta) \quad (2.14)$$

em que $\rho_r(\theta)$ fornece o número de partículas k em uma caixa de tamanho $r\delta r\delta\theta$ no ponto (r, θ) . Para determinar $C_r(\theta)$ podemos utilizar o procedimento ilustrado a figura 2.5. O somatório sobre θ' varia 0 até π usando incrementos $\delta\theta'$. A função $C_r(\theta)$ descreve a correlação entre pares de pontos em uma camada de espessura δr a uma distância r da origem como uma função da separação $r\theta$ entre eles.

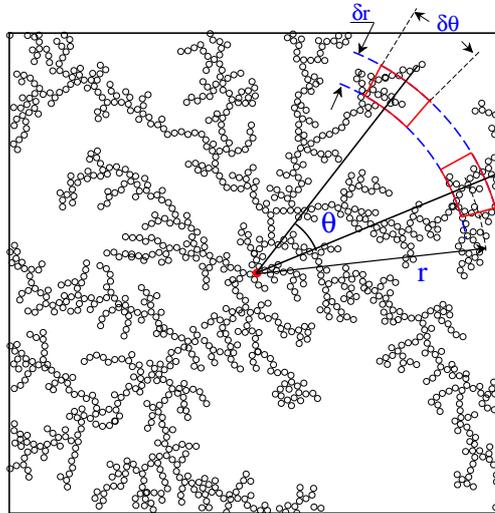


Figura 2.5: Ilustração da determinação da função de correlação angular. Um elemento de área $r\delta r\delta\theta$ é utilizado para determinar a correlação entre dois pontos à mesma distância r da origem e com uma separação angular θ .

2.2 Modelos de Crescimento de Agregados

Na natureza podemos encontrar um número muito grande de processos de crescimento que levam a estruturas fractais e, portanto, exibem invariância sob mudanças de escala. Como

exemplos, podemos citar a eletrodeposição, a formação de vasos sanguíneos, o crescimento de colônias de bactérias, de líquens, etc. Muitos desses processos ocorrem pela agregação de um ou mais componentes. Para um maior entendimento desses, torna-se necessária a construção de modelos que procurem incluir os principais ingredientes envolvidos. Muitas vezes esses modelos de crescimento são definidos em uma rede d -dimensional em que cada sítio é associado a uma variável σ_i , a qual assume valores $\sigma_i = 0$ ou $\sigma_i = 1$ quando o sítio i está vazio ou ocupado, respectivamente. Podemos ainda construir tais modelos fora da rede – nestes um conjunto de variáveis \vec{r}_i é usado para designar a posição das partículas pertencentes ao agregado. Nesta seção iremos descrever alguns modelos cujo mecanismo fundamental é a agregação de unidades fundamentais que chamaremos genericamente de partículas.

2.2.1 Agregação Limitada por Difusão

Um dos modelos de crescimento de agregados mais estudados é o modelo de agregação limitada por difusão mais conhecido por DLA (*diffusion-limited aggregation*) [7, 8, 10]. Nesse modelo, uma semente é usada como condição inicial e outras partículas são liberadas, uma de cada vez, em posições aleatórias distantes dessa semente. As partículas movem-se seguindo uma caminhada aleatória até entrarem em contato com uma partícula do agregado, quando elas tornam-se irreversivelmente parte dele. Se na caminhada, as partículas ultrapassam um raio r_k muito distante do agregado, elas são descartadas. Versões do modelo na rede e fora dela foram amplamente estudadas [12, 31]. Na figura 2.6 mostramos um agregado com 3×10^4 partículas gerado em uma rede quadrada. Apesar de sua regra simples, o modelo DLA produz estruturas com ramos que possuem auto-similaridade estatística. Essa morfologia é devido a efeitos de blindagem produzidos pelos ramos mais externos que capturam os caminhantes

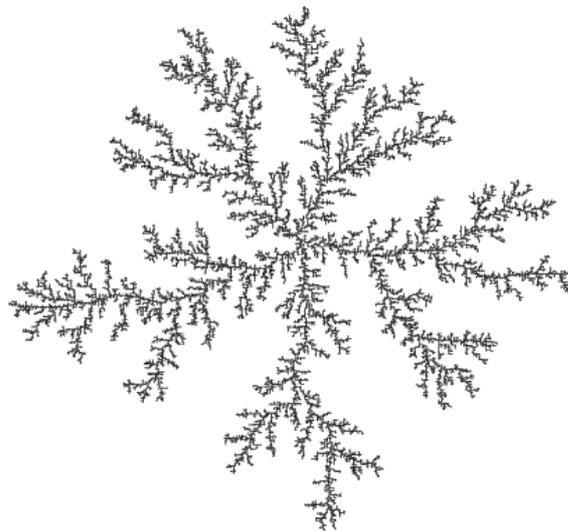


Figura 2.6: Padrão gerado pelo modelo DLA na rede quadrada com 3×10^4 partículas.

com uma eficiência muito maior que os ramos mais internos. Assim, pequenas flutuações são ampliadas exponencialmente. Essa instabilidade, juntamente com a aleatoriedade inerente às regras do modelo, levam a estruturas complexas com propriedades de escala não triviais.

Para estudar as propriedades das estruturas geradas pelo modelo DLA é necessário simular o crescimento de padrões com um grande número de partículas. Para tal, o uso das regras descritas acima torna-se inviável devido ao tempo computacional exigido. Para contornar esse problema, é necessário utilizar procedimentos que otimizem a simulação. Primeiramente podemos observar que partículas lançadas de pontos muito distantes do agregado passam, com igual probabilidade, sobre um círculo centrado na semente. Assim, podemos lançar novas partículas sobre um círculo centrado na semente cujo raio é ligeiramente maior que o raio do agregado, ou seja, podemos usar um raio de lançamento

$$r_0 = r_a + \delta r, \quad (2.15)$$

em que r_a é a maior distância das partículas pertencentes ao agregado à semente (uma medida do raio do agregado), e δr é tipicamente $5a$, em que a é a dimensão de uma partícula. No momento do lançamento, a direção é escolhida aleatoriamente de uma distribuição uniforme entre π e $-\pi$.

Uma outra propriedade importante de um caminhante aleatório que pode ser explorada é que ele alcança com igual chance qualquer ponto sobre um círculo de raio r centrado no ponto de lançamento, desde que $r \gg a$. Devido a essa propriedade podemos utilizar as seguintes estratégias de otimização:

- Quando o caminhante está longe do agregado ele pode executar saltos de tamanhos $r_{ext} > a$ até alcançar o círculo de lançamento ou ultrapassar a distância limite r_k , quando quando esse caminhante é descartado e um novo é liberado no círculo de lançamento. Podemos utilizar $r_{ext} = r - r_0$, em que r é a distância do caminhante à semente, desse modo o caminhante pode saltar, no máximo, para o círculo de lançamento.
- Quando simulações de larga escala são executadas, surgem buracos da ordem do tamanho do agregado no seu interior, uma característica de objetos fractais. Conseqüentemente, o tempo computacional para simular as caminhadas torna-se proibitivamente grande. Uma maneira de contornar este problema é usar saltos internos de tamanhos r_{in} para acelerar o processo. A escolha de r_{in} deve ser tal que o caminhante não atinja o agregado. Uma boa estratégia para implementar os saltos internos é a seguinte: dividimos o espaço em uma malha de espaçamento $2r_{in}$, e a toda célula que conter uma parte do agregado associamos o valor 1 e para as demais o valor 0. Assim, a partícula pode executar saltos de tamanho r_{in} desde que não alcance uma caixa com valor 1.

Na figura 2.7, mostramos uma representação esquemática contendo todas as otimizações descritas. Um cuidado a ser tomado é em relação ao valor de r_k : seu valor deve ser maior que $100r_a$ para simulações de larga escala.

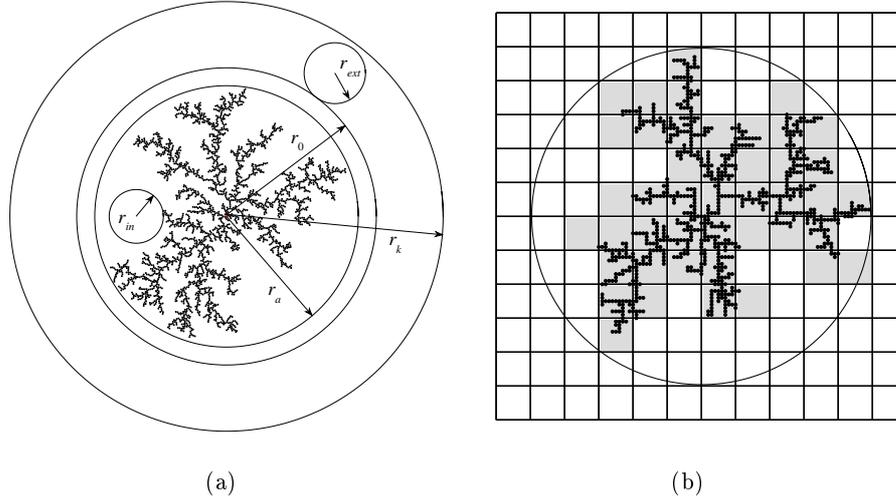


Figura 2.7: Ilustração das otimizações utilizadas no modelo DLA. Em (a) ilustramos a idéia dos saltos externos e internos e em (b) a malha usada para execução dos saltos internos. Note que as células ocupadas estão destacadas em cinza.

O fenômeno de blindagem pode ser observado na figura 2.8(a), na qual, a cada 10^3 partículas adicionadas ao agregado a cor é trocada. Pode-se ver que as partículas mais recentes fixam-se apenas nas partes mais externas do agregado, em uma região denominada zona ativa. Outra maneira de evidenciar a blindagem, no caso do modelo ser implementado em uma rede, é por meio da contagem do número de vezes que um sítio vazio vizinho ao agregado (sítio da periferia) é visitado por um caminhante. Para fazer tal medida devemos gerar um agregado e em seguida liberar N partículas, uma de cada vez, para realizar uma caminhada aleatória. A cada sítio primeiro vizinho do agregado associamos um contador. Quando um sítio da periferia é visitado, seu contador é acrescido de uma unidade em vez de crescê-lo. Na figura 2.8(b), mostramos a função de distribuição de probabilidades de uma partícula alcançar um sítio de periferia i a uma distância $\ell = r_a - r_i$ no interior do agregado. Essa curva foi obtida soltando 10^5 partículas em 100 agregados distintos. A variável ℓ fornece a distância de penetração de uma partícula no interior do agregado em relação a sua fronteira externa. Note que para $\ell < \ell'$ (≈ 100 , neste caso) a probabilidade de crescimento dos sítios dentro dessa região é aproximadamente constante, e acima desse valor ela vai a zero rapidamente. O valor ℓ' fornece uma medida quantitativa da largura da zona ativa que evidencia a existência do efeito da blindagem no modelo DLA. Uma demonstração adicional do efeito da blindagem é apresentada na figura 2.9, na qual os sítios que foram visitados pelo menos uma, dez ou cem vezes são mostrados. Note que em 2.9(c) as partículas chegam principalmente nas pontas

axiais do agregado, uma evidência quantitativa da anisotropia imposta pela rede.

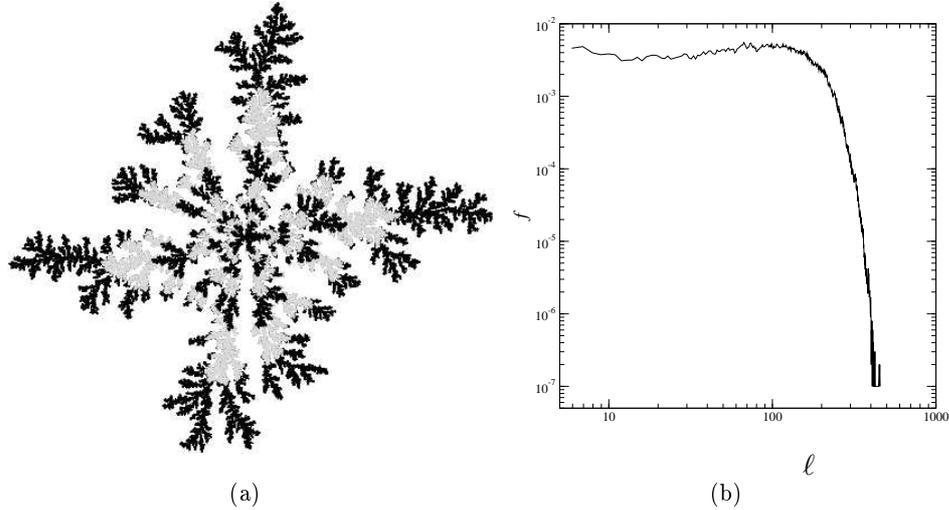


Figura 2.8: (a) Padrão do DLA em uma rede quadrada e (b) função de distribuição de distâncias de penetração no interior de agregados com 3×10^5 partículas.

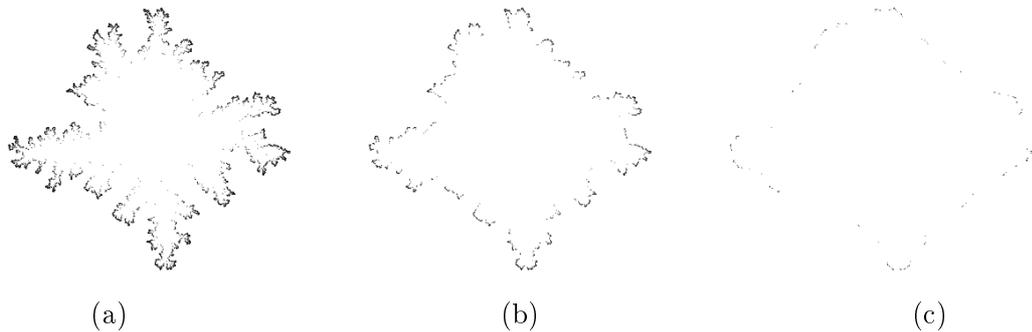


Figura 2.9: Sítios de crescimento (ou de periferia) visitados por caminhantes (a) pelo menos uma vez, (b) mais que 10 vezes e (c) mais que 100 vezes.

Uma das medidas das propriedades de escala do DLA é a dimensão fractal do agregado. Na figura 2.10 mostramos um gráfico obtido usando o método massa-raio para um agregado com 10^5 partículas crescido em uma rede quadrada (veja seção 2.1.2). A dimensão fractal medida foi $d_f = 1.67$, em acordo com as simulações realizadas por Meakin [31] nas quais $d_f \approx 5d/6$. Esse valor é um pouco diferente do encontrado para agregados crescidos fora da rede no qual $d_f = 1.715 \pm 0.004$ [12].

Outra maneira de obter a dimensão fractal dos agregados é através do estudo do raio de giração r_g em função do número de partículas N (seção 2.1.2). Usando simulações fora da rede, Tolman e Meakin encontraram $\nu = 0.5830 \pm 0.0014$, que fornece, $d_f = 1.715$ [12].

As dimensões fractais dos agregados obtidos na rede são significativamente menores que as obtidas fora da rede. Isto deve-se à anisotropia imposta pela rede, como pode ser observado no agregado mostrado na figura 2.11(a) que nitidamente difere do obtido fora da

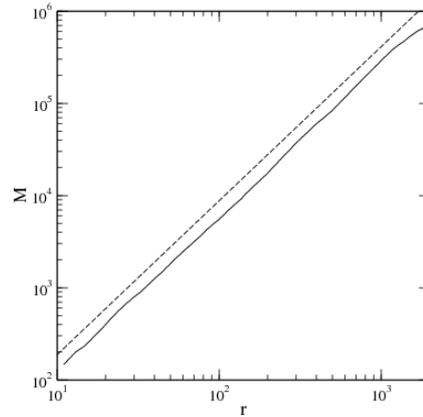


Figura 2.10: Massa em função do raio para um agregado do DLA com 10^6 partículas. A linha tracejada possui inclinação 1.67.

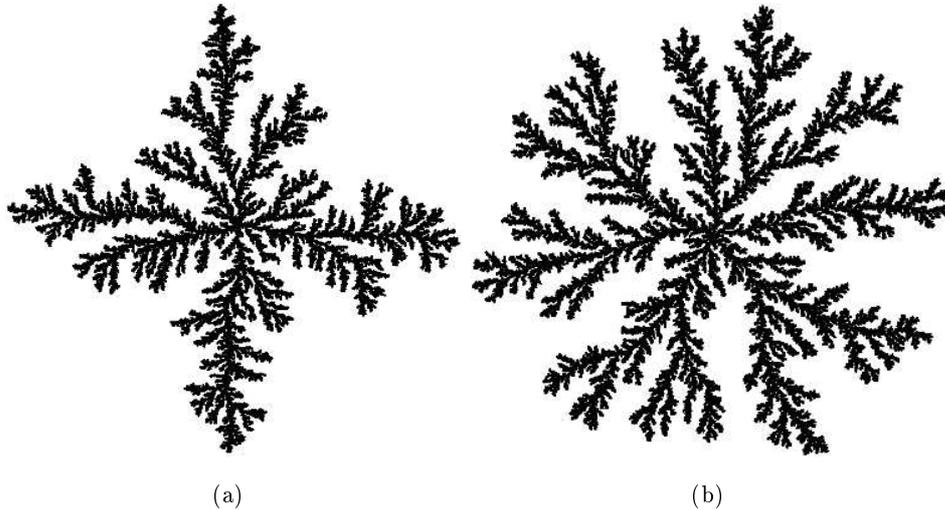


Figura 2.11: Padrões do DLA obtidos na rede quadrada e fora da rede, em (a) e (b), respectivamente. Em ambos casos os agregados possuem 10^7 partículas.

rede, figura 2.11(b). Uma maneira de evidenciar a anisotropia da rede é utilizar o método de redução de ruído [32]. Nesse método, associamos um contador a cada sítio da rede e sempre que um sítio vizinho ao agregado for visitado por um caminhante aleatório seu contador é acrescido de uma unidade. Um sítio cresce apenas quando o sítio for visitado M vezes. Note que esse procedimento favorece o crescimento dos sítios com maior probabilidade, reduzindo assim a aleatoriedade associada às regras de crescimento. Quando $M = 1$ o modelo original DLA é recuperado. Na figura 2.12 mostramos agregados com $M = 2, 4, 16$ e 32 gerados em redes quadradas. Repare que à medida que M aumenta, a anisotropia da rede fica mais evidente. Em todas as simulações agregados com $N = 10^4$ partículas foram gerados. Retornaremos a análise da anisotropia em agregados do DLA no capítulo 7, no qual discutiremos e generalizaremos um algoritmo proposto para gerar agregados isotrópicos do DLA na rede [26].

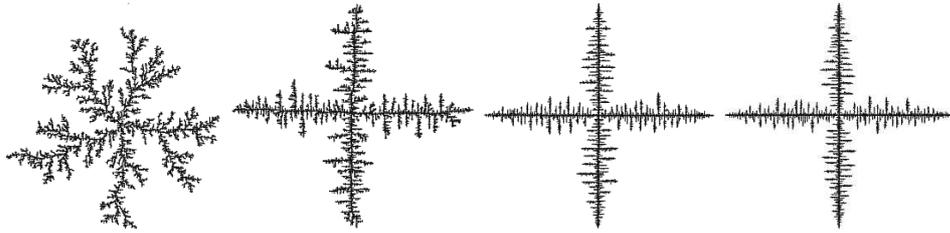


Figura 2.12: Padrões do modelo DLA obtidos em redes quadradas usando os parâmetros de redução de ruído $M = 2, 4, 16$ e 32 , da direita para a esquerda.

2.2.2 Agregação Balística

Quando a caminhada aleatória no modelo DLA é substituída por uma trajetória balística obtemos o modelo conhecido como modelo de agregação balística também chamado BA (*Ballistic aggregation*) [33]. Duas versões foram muito estudadas, nas quais a condição inicial é dada por uma partícula localizada no centro da rede [34, 35, 36]. Na primeira versão, partículas são lançadas, uma de cada vez, de pontos escolhidos ao acaso sobre um círculo de raio muito maior que o do agregado. As partículas seguem uma linha reta, com direção escolhida ao acaso, até entrar em contato com qualquer partícula do agregado onde fixam-se permanentemente. Na segunda versão, as trajetórias são ao longo de uma direção fixa. Uma nova partícula é lançada quando a caminhante ou colide com o agregado ou alcança o círculo de lançamento, na primeira versão, ou quando passa pelo agregado, na segunda. Na figura 2.13 mostramos agregados gerados usando-se as duas versões. As estruturas são, em ambos os casos, assintoticamente homogêneas, com densidade $\rho > 0$. Entretanto, a densidade das estruturas dos agregados convergem para o limite assintótico de forma não trivial. Para a primeira versão, a densidade do agregado $\rho(r)$ dentro de um círculo de raio r aproxima-se

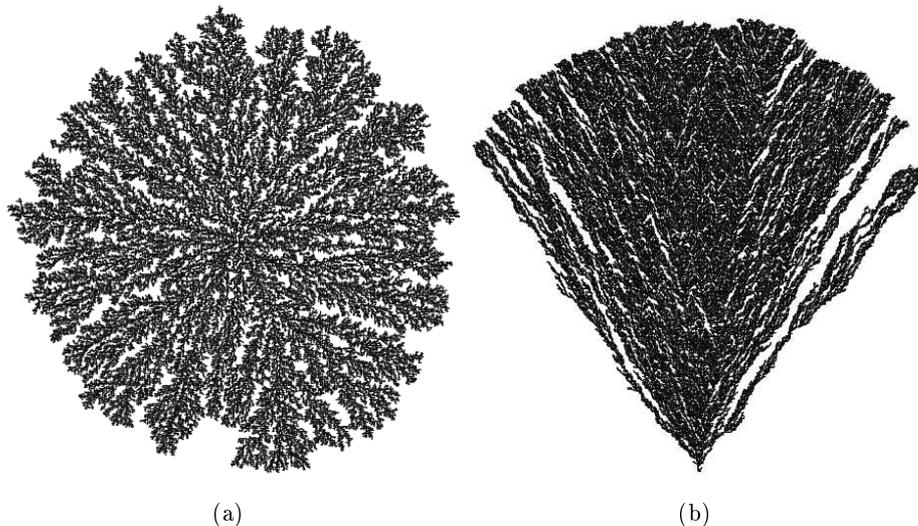


Figura 2.13: Agregados obtidos usando a (a) primeira e a (b) segunda versão do modelo BA.

de uma constante seguindo uma lei de potência da forma [34]

$$\rho(r) = \rho_\infty + Ar^{-\beta} \quad (2.16)$$

em que ρ_∞ é a densidade assintótica do agregado, A é uma constante e β é o expoente que caracteriza a aproximação do limite assintótico. O valor de β pode ser obtido da inclinação do gráfico $\ln[\rho(r) - \rho_\infty]$ contra $\ln(r)$. Liang e Kadanoff [34] encontraram $\beta \approx 0.55$ e 0.66 para agregados na rede quadrada e fora da rede, respectivamente. Esses valores sugerem que o expoente β não é universal. Entretanto, uma generalização do modelo BA [24] sugere que esse expoente é universal (detalhes no capítulo 6).

Para a segunda versão do modelo BA, a estrutura gerada possui uma forma de leque e apresenta uma densidade maior na região central com grandes regiões vazias nas bordas laterais. A distribuição da densidade $\rho(r, \theta)$ dentro dessa estrutura possui uma relação de escala não-trivial. A distribuição da densidade é definida como o número de partículas dentro da área $r\Delta r\Delta\theta$ em torno da posição \vec{r} , e o ângulo θ é definido em relação ao eixo paralelo as trajetórias. A distribuição de densidade proposta por Liang e Kadannof [34] obedece a relação de escala

$$\rho(r, \theta) = r^{-\mu} f(r^\nu(\theta - \theta_c)) \quad (2.17)$$

em que $f(x) \equiv$ constante para $x \ll 1$ e cai rapidamente a zero para $x \gg 1$, θ_c é um ângulo que limita as bordas do agregado e μ e ν são expoentes de escala universais que podem ser obtidos por meio do colapso das curvas ρr^μ versus $r^\nu(\theta - \theta_c)$ para diferentes valores de r . Os valores encontrados para simulações fora da rede são $\mu \approx 0.13$ e $\nu \approx 3.0$, que concordam com os valores encontrados para simulações na rede quadrada [35]. Contudo, o valor $\theta_c \approx 15.5^\circ$ encontrado em simulações fora da rede difere muito do valor $\theta_c \approx 32^\circ$ determinado para a rede quadrada.

2.3 Classes de Universalidade em Interfaces

2.3.1 Caracterização de Interfaces

O crescimento de interfaces é um processo complexo presente em muitos fenômenos naturais. Como exemplos podemos citar processos geológicos (erosão em montanhas), biológicos (crescimento de colônia de bactérias), hidrodinâmicos (movimento de um fluido em um meio poroso), deposição (crescimento de filmes finos), entre outros. As características dessas interfaces são determinadas por um conjunto de processos que ocorrem durante sua formação. A aplicação de leis de escala em modelos de crescimento, uma ferramenta padrão da Mecânica Estatística, tem sido extensivamente usada para compreender o comportamento da rugosidade na dinâmica de crescimento de interfaces [7, 9]. Modelos discretos buscam capturar, através

de regras simples, os mecanismos físicos essenciais de um processo de crescimento. Esses modelos de crescimento são comumente definidos em uma rede d -dimensional e a altura do sítio i no tempo t é designada por $h_i(t)$ com $i = 1, 2, \dots, L^d$, em que L^d representa o tamanho do sistema.

Podemos descrever quantitativamente essas interfaces por meio da altura média $\bar{h}(t)$ da superfície no instante t ,

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L h_i(t) \quad (2.18)$$

cuja evolução fornece a velocidade de crescimento da interface e da rugosidade ou largura média [7, 9] da interface, que caracteriza as flutuações em torno da altura média e é definida como

$$w(L, t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2}. \quad (2.19)$$

Na análise das superfícies estamos interessados tanto nos valores estáticos das grandezas que a caracterizam, quanto na sua evolução temporal. Desse modo, devemos medir a rugosidade da interface como uma função do tempo. Em geral, a condição inicial da interface é uma superfície plana que possui rugosidade nula. À medida que partículas são depositadas, a superfície aumenta gradualmente sua rugosidade. Um gráfico típico da evolução mostra que a rugosidade da superfície possui dois regimes distintos separados por um tempo de saturação t_s como ilustrado na figura 2.14. Inicialmente, a rugosidade aumenta como uma lei de potência dada por

$$w(L, t) \sim t^\beta \quad \text{para } t \ll t_s. \quad (2.20)$$

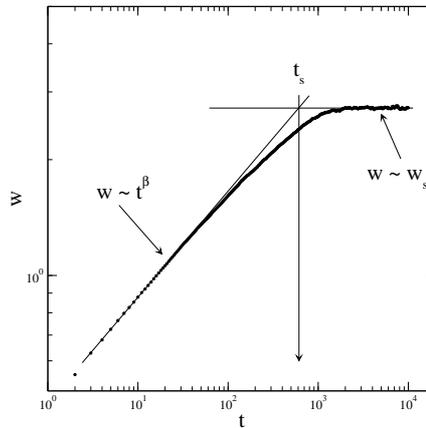


Figura 2.14: Gráfico em escala logarítmica típico para a evolução da rugosidade. Inicialmente, a rugosidade aumenta como uma lei de potência e permanece aproximadamente constante após o tempo de saturação. Esses dados foram gerados usando o modelo de Kim-Kosterlitz introduzido na seção 2.4.3 (página 38).

O expoente β , chamado de expoente de crescimento, caracteriza a dependência com o tempo. Para $t \gg t_s$, o regime de crescimento cede lugar a um de saturação quando a rugosidade alcança um valor estacionário w_{sat} , ou seja

$$w(L, t) \sim w_{sat} \quad \text{para } t \gg t_s. \quad (2.21)$$

A figura 2.15(a) mostra quatro curvas $w(L, t)$ para simulações nas quais o tamanho do sistema foi variado. À medida que L aumenta, a rugosidade de saturação também aumenta. Conforme mostrado na figura 2.15(b), a dependência de w_{sat} com L segue uma lei de potência, isto é,

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha, \quad (2.22)$$

em que o expoente α é chamado expoente da rugosidade.

O tempo de saturação t_s pode ser estimado da forma mostrada na figura 2.14. Esse tempo também depende do tamanho do sistema seguindo uma lei de potência, como mostrado na figura 2.15(b)

$$t_s \sim L^z, \quad (2.23)$$

em que z é chamado de expoente dinâmico. A construção mostrada na figura 2.14 ilustra uma maneira simples para estimar t_s .

Podemos colapsar os dados da figura 2.15 em uma única curva usando as relações (2.21), (2.22) e (2.23). Para isso devemos realizar dois passos:

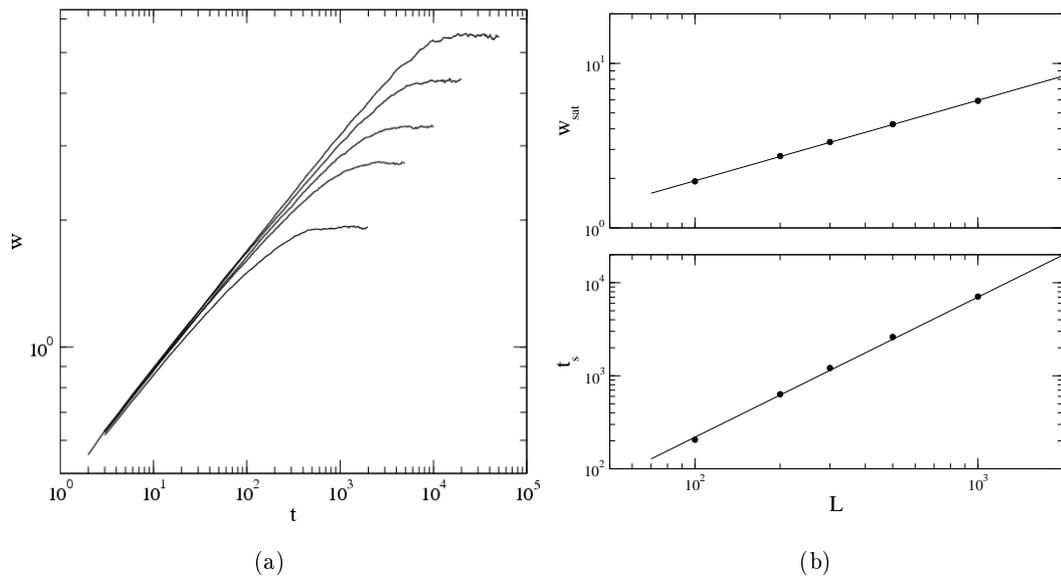


Figura 2.15: (a) Evolução da rugosidade para quatro tamanhos diferentes do sistema. Observe que a rugosidade de saturação cresce com L . (b) Gráficos em escala logarítmica da rugosidade (gráfico superior) e do tempo de saturação (gráfico inferior) para as curvas mostradas em (a) como função do tamanho do sistema.

- (i) Traçar $w(L, t)/w_{sat}(L)$ como uma função do tempo. Esse passo retira a dependência em L da rugosidade de saturação, de modo que as curvas passam a saturar no mesmo valor (figura 2.16(a)).
- (ii) Traçar $w(L, t)/w_{sat}(L)$ como uma função de t/t_s de modo que as curvas passam a saturar no mesmo tempo característico (figura 2.16(b)).

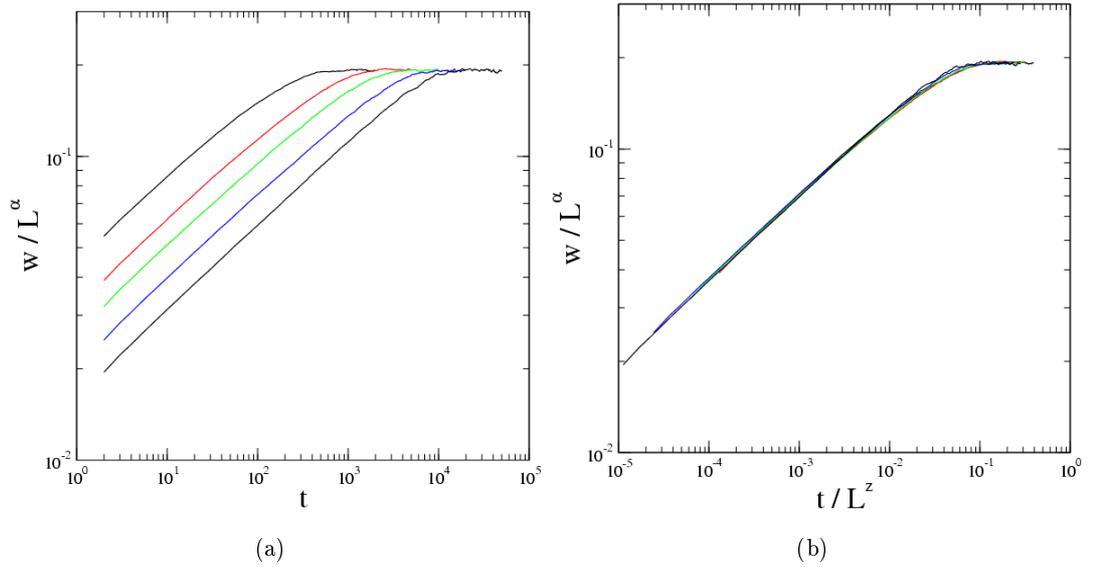


Figura 2.16: Ilustração do processo de colapso para as curvas da rugosidade mostradas na figura 2.15. Em (a) traçamos $w(L, t)/w_{sat}(L)$ contra t . Note que as curvas obtidas saturam no mesmo valor independentemente do tamanho L do sistema. Em (b) traçamos $w(L, t)/w_{sat}(L)$ contra t/t_s . Note agora que as curvas saturaram com o mesmo tempo característico.

O resultado obtido na figura 2.16(b) sugere que $w(L, t)/w_{sat}(L)$ é uma função de t/t_s , ou seja:

$$\frac{w(L, t)}{w_{sat}(L)} = f\left(\frac{t}{t_s}\right), \quad (2.24)$$

em que $f(x)$ é uma função de escala com $x = \frac{t}{t_s}$. De fato, usando as equações (2.22) e (2.23), encontramos a relação de escala de Family-Vicsek [7, 8, 9]

$$w(L, t) = L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (2.25)$$

A forma de $f(x)$ é evidenciada na figura 2.16(b) na qual dois regimes podem ser identificados: lei de potência para $x \ll 1$ e saturação para $x \gg 1$. Assim, a forma apropriada para a função de escala é

$$f(x) \sim \begin{cases} x^\beta & \text{para } x \ll 1 \\ \text{const.} & \text{para } x \gg 1 \end{cases} \quad (2.26)$$

Dada a função de escala (2.26), podemos determinar uma relação entre os expoentes α , β e z . Aproximando do ponto de cruzamento $(t_s, w(t_s))$, figura 2.14, pela esquerda e usando (2.20) e (2.23), encontramos, que

$$w(t_s) \sim t_s^\beta \sim L^{\beta z}.$$

Entretanto, aproximando-se do mesmo ponto pela direita, obtemos de (2.22)

$$w(t_s) \sim L^\alpha.$$

Dessas duas relações, obtemos

$$\beta z = \alpha \quad \text{ou} \quad z = \frac{\alpha}{\beta} \quad (2.27)$$

uma relação entre os três expoentes válida para qualquer processo de crescimento que obedeça à relação de escala (2.25).

Os expoentes de crescimento e da rugosidade também podem ser obtidos utilizando-se a função de correlação da diferença de alturas $c(r, t)$ definida por

$$c(r, t) = \left\langle \left[\tilde{h}(\vec{r}', t') - \tilde{h}(\vec{r}' + \vec{r}, t' + t) \right]^2 \right\rangle_{\vec{r}', t'} \quad (2.28)$$

em que $\tilde{h}(\vec{r}, t) = h(\vec{r}, t) - \bar{h}(\vec{r}, t)$, $\langle \dots \rangle_{\vec{r}', t'}$ representa uma média para diferentes \vec{r}', t' e $\bar{h}(\vec{r}, t)$ é uma função apenas do tempo, ou seja, $\bar{h}(\vec{r}, t) = \bar{h}(t)$. Em geral, a função de correlação $c(r, 0)$ tem a forma de escala

$$c(r, 0) \sim r^{2\alpha} \quad (2.29)$$

para $r \ll L$. Enquanto a função $c(0, t)$ possui a forma

$$c(0, t) \sim t^{2\beta} \quad (2.30)$$

para $t \ll t_s$.

Expoente de Hurst

Conforme visto anteriormente, um objeto auto-afim obedece a relação de escala

$$h(x) = b^{-H} h(bx) \quad (2.31)$$

em que b é um fator de transformação de escala e H é o expoente de Hurst. A maneira mais simples para calcular o expoente de Hurst é determinar como a largura da interface depende do tamanho da escala de observação (que chamaremos de janela) [37]. Podemos determinar a largura da interface em uma janela de tamanho ϵ usando a expressão

$$\Delta h(\epsilon) = \max(h_\epsilon) - \min(h_\epsilon), \quad (2.32)$$

em que $\max(h_\epsilon)$ é a maior e $\min(h_\epsilon)$ a menor altura dentro da janela. Para objetos auto-afins temos

$$\Delta h(\epsilon) \sim \epsilon^H \quad (2.33)$$

Um método mais utilizado e elaborado que o da diferença de alturas consiste em determinar a rugosidade média $w(\epsilon)$ dentro de janelas de tamanho $2\epsilon + 1$

$$w(\epsilon) = \left\langle \left[\frac{1}{2\epsilon + 1} \sum_{j=i-\epsilon}^{i+\epsilon} (h_j - \bar{h}_i)^2 \right]^{1/2} \right\rangle_i \quad (2.34)$$

em que \bar{h}_i é a altura média dentro da janela de tamanho $2\epsilon + 1$ centrada no sítio i , ou seja,

$$\bar{h}_i = \frac{1}{2\epsilon + 1} \sum_{j=i-\epsilon}^{i+\epsilon} h_j \quad (2.35)$$

e $\langle \dots \rangle_i$ representa uma média sobre vários centros i . Para um perfil auto-afim, a relação

$$w(\epsilon) \sim \epsilon^H \quad (2.36)$$

é válida.

Uma forma alternativa para calcular a rugosidade é considerar as flutuações em torno da reta que melhor ajusta o perfil dentro de uma janela de tamanho $2\epsilon + 1$ [38]. Nesse método, a rugosidade é definida por

$$w(\epsilon) = \left\langle \left[\frac{1}{2\epsilon + 1} \sum_{j=i-\epsilon}^{i+\epsilon} (h_j - (aj + b))^2 \right]^{1/2} \right\rangle_i, \quad (2.37)$$

em que a e b são os coeficientes da reta que melhor se ajusta ao perfil no intervalo $[i - \epsilon, i + \epsilon]$. Os coeficientes a e b são determinados usando o método dos mínimos quadrados. Moreira *et al.* [38] mostraram que o método que considera os desvios com relação a altura média é mais robusto e leva a resultados melhores (expoentes mais próximos do esperado) que o método da diferença de alturas, equação (2.32), e que o método da melhor reta é melhor que o dos desvios com relação a altura média.

2.3.2 Equações Estocásticas

Uma aproximação muito utilizada para o estudo do crescimento de interfaces é a descrição contínua. Nesta aproximação utilizamos equações estocásticas que incluem mecanismos relevantes em escalas de comprimento grandes, desprezando os detalhes microscópicos e focalizando apenas em suas médias. Tais equações podem ser construídas através de argumentos físicos e/ou princípios de simetria. Cada termo da equação estocástica deve ser relacionado a um processo físico presente durante a evolução da interface. Além disso, cada termo define

uma classe de universalidade e, quando aparece mais que um termo em uma equação, dizemos em geral que a classe de universalidade dessa é a do termo dominante.

Quando consideramos apenas a deposição aleatória em um processo de crescimento, podemos descrevê-lo por meio da seguinte equação

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = v + \eta(\vec{x}, t) \quad (2.38)$$

em que v representa o número médio de partículas sendo adicionadas à interface e $\eta(\vec{x}, t)$ é um ruído que representa as flutuações aleatórias no processo de deposição. O ruído possui média nula,

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0, \quad (2.39)$$

e é descorrelacionado no espaço e no tempo, ou seja,

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'), \quad (2.40)$$

em que $\langle f(x) \rangle$ representa uma média espacial de $f(x)$, ou seja, $\langle f(x) \rangle \equiv \frac{1}{a^d} \int d^d x h(\vec{x}, t)$, em que a^d é o volume da região considerada. O expoente de crescimento pode ser obtido por uma integração da equação (2.38) que fornece

$$h(\vec{x}, t) = vt + \int_0^t dt' \eta(\vec{x}, t') \quad (2.41)$$

Assim, podemos calcular os valores médios de $h(\vec{x}, t)$ e $(h(\vec{x}, t))^2$:

$$\langle h(\vec{x}, t) \rangle = vt + \int_0^t dt' \langle \eta(\vec{x}, t') \rangle \quad (2.42)$$

e

$$\langle (h(\vec{x}, t))^2 \rangle = (vt)^2 + 2vt \int_0^t dt' \langle \eta(\vec{x}, t') \rangle + \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle \eta(\vec{x}, t') \eta(\vec{x}', t'') \rangle. \quad (2.43)$$

Usando as equações (2.39) e (2.40), encontramos

$$\langle h(\vec{x}, t) \rangle = vt \quad (2.44a)$$

$$\langle (h(\vec{x}, t))^2 \rangle = (vt)^2 + 2Dt \quad (2.44b)$$

que, substituídos na equação (2.19), produzem

$$w^2(t) = \langle (h(\vec{x}, t))^2 \rangle - \langle h(\vec{x}, t) \rangle^2 = 2Dt \quad (2.45)$$

e, conseqüentemente, o valor $\beta = 1/2$ independente da dimensão do substrato de deposição.

Quando correlações laterais estão presente é necessário incluir termos adicionais à equação (2.38). Como exemplo podemos citar o processo de relaxação que suaviza a interface durante o crescimento. A equação usada para descrever o processo de relaxação no crescimento de interfaces foi proposta por Edwards e Wilkinson (EW) [18]. Essa equação foi desenvolvida

no contexto de processo de sedimentação de partículas granulares sob o efeito de um campo gravitacional e tem a forma

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = v + \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.46)$$

em que ν é um parâmetro relacionado ao processo de relaxação. A mudança de variável (que será usada no restante da seção)

$$h \rightarrow h + vt, \quad (2.47)$$

leva a seguinte equação

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.48)$$

Com essa mudança de variável observamos a interface em um referencial que move-se com velocidade igual à taxa de deposição.

Os expoentes de escala podem ser obtidos através de argumentos de escala aplicados ou da solução exata da equação (2.48). Vamos mostrar como obter os expoentes usando argumentos de escala. Fazendo a reescala

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = b\vec{x}, \quad (2.49)$$

na direção horizontal devemos encontrar a mudança

$$h \rightarrow h' = b^\alpha h \quad (2.50)$$

na direção vertical, considerando a auto-afinidade da interface. Quando efetuamos essa mudança de escala a interface obtida deve ser estatisticamente idêntica à original. Uma vez que a interface depende do tempo, para podermos comparar duas interfaces obtidas em tempos diferentes, devemos reescalá-lo utilizando a transformação

$$t \rightarrow t' = b^z t. \quad (2.51)$$

Substituindo (2.49)-(2.51) em (2.48) obtemos:

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h(\vec{x}, t) + b^{-d/2-z/2} \eta(\vec{x}, t). \quad (2.52)$$

No último termo da equação (2.52) usamos a equação (2.40) e a propriedade da função delta

$$\delta^d(a\vec{x}) = a^{-d} \delta^d(\vec{x}).$$

Dividindo a equação (2.52) por $b^{\alpha-z}$ obtemos

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2} \nabla^2 h(\vec{x}, t) + b^{-d/2+z/2-\alpha} \eta(\vec{x}, t) \quad (2.53)$$

Considerando que a equação EW é invariante sob essa transformação de escala, obtemos

$$\beta = \frac{2-d}{4}, \quad \alpha = \frac{2-d}{2} \quad \text{e} \quad z = 2 \quad (2.54)$$

em um sistema de d dimensões. Note que $z = 2$ é independente da dimensão e que em $d = 1$, $\beta = 1/4$ e $\alpha = 1/2$. Já em $d = 2$, obtemos β e α ambos iguais a zero. É observado que a rugosidade cresce logarithmicamente no tempo (para $t < t_s$) e que a rugosidade de saturação, da mesma maneira, depende logarithmicamente de L . Já para $d \geq 3$, os expoentes de crescimento e da rugosidade são negativos, o que significa uma interface assintoticamente lisa.

Uma interpretação geométrica do termo de relaxação na equação de EW pode ser vista na figura 2.17¹. Na parte superior da figura é mostrada a interface em um instante t e no centro a contribuição do termo de relaxação. Na parte inferior da figura é mostrada a interface em um instante $t + \delta t$ após a interface receber a contribuição do termo de relaxação. É fácil notar que ele suaviza a interface por meio de seu rearranjo.

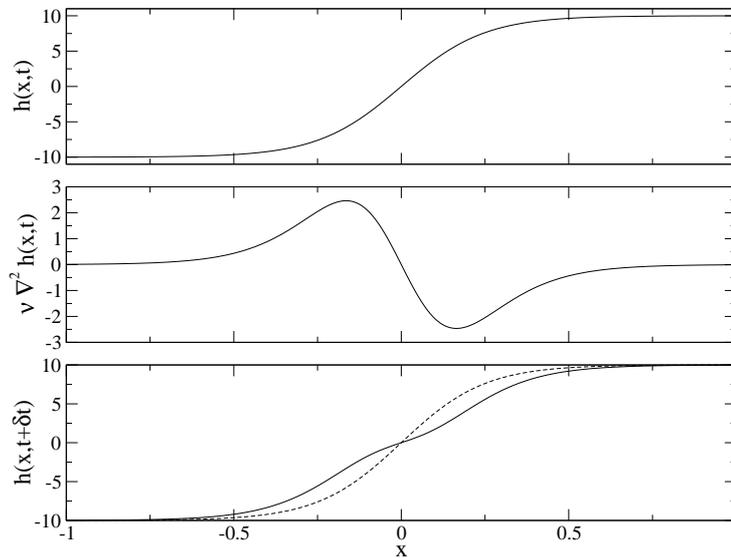


Figura 2.17: Ilustração do efeito da relaxação na equação de EW. Na curva superior consideramos a função $f(x) = a \tanh(bx)$ para representar uma interface 1 + 1 dimensional em um instante t . No centro a segunda derivada da função gaussiana e na curva de baixo a interface no tempo $t + \delta t$, ou seja, a soma da interface com sua derivada segunda. Para efeito de comparação também traçamos a interface no tempo t (curva tracejada).

Outro processo que pode ocorrer durante o crescimento de interfaces é o crescimento normal (ou ortogonal) ao substrato. Na figura 2.18(a) mostramos uma situação na qual claramente existe esse crescimento. Nessa figura a estrutura é obtida usando o modelo de deposição balística (BD, de *ballistic deposition*) com condição inicial dada por um substrato cuja parte central é em forma de um semi-círculo – esse modelo será discutido na seção 2.3.3. Observe que os ramos crescem na direção normal à superfície do substrato. Esse crescimento normal é uma consequência direta das regras do modelo; as partículas fixam-se ao primeiro

¹Esta figura e as demais utilizadas para uma interpretação dos termos diferenciais das equação estocásticas foram construídas com base em figuras das referências [9, 39]

sítio vazio vizinho do agregado (substrato) encontrado.

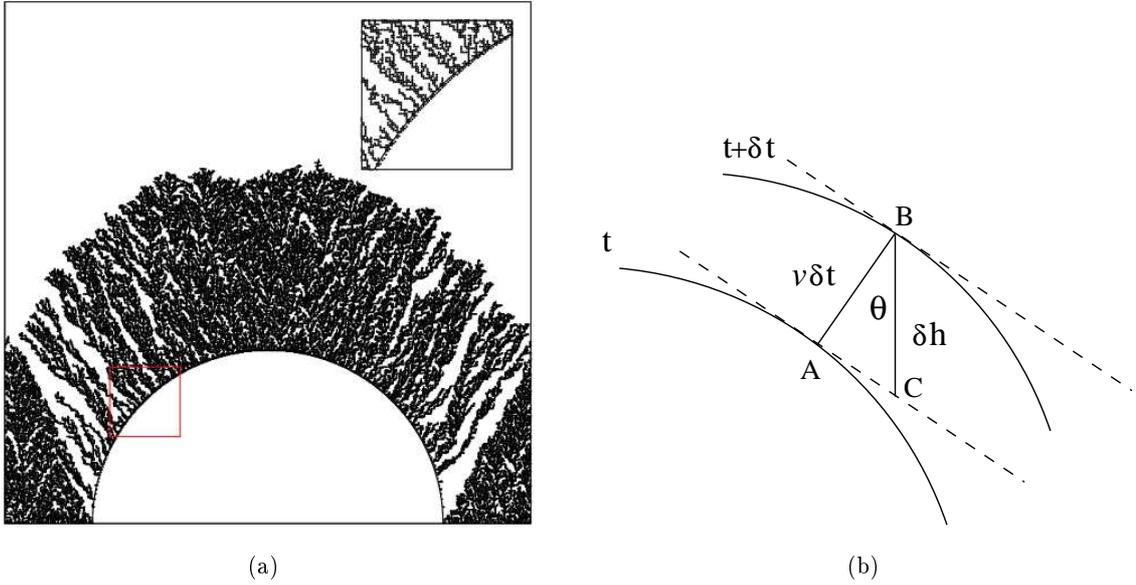


Figura 2.18: (a) Ilustração do crescimento normal no modelo BD. A condição inicial é um substrato semi-circular. Note que os ramos crescem na direção normal ao substrato. (b) Esquema ilustrando a evolução de uma interface com crescimento normal à superfície (esse esquema foi montado com base em uma figura da referência [9]).

O crescimento normal para um substrato arbitrário é esquematizado na figura 2.18(b). Nessa figura mostramos a interface nos instantes sucessivos t e $t + \delta t$ refletindo a deposição de partículas a uma velocidade constante v e que gera uma variação da altura δh . Usando o teorema de Pitágoras obtemos

$$(\delta h)^2 = (v\delta t)^2 + (v\delta t \nabla h)^2 = (v\delta t)^2 (1 + (\nabla h)^2)$$

$$\Rightarrow \delta h = v\delta t (1 + (\nabla h)^2)^{\frac{1}{2}}$$

onde usamos $\overline{AC}/\overline{AB} = \tan \theta \approx \nabla h$ para $\delta t \rightarrow 0$. Expandindo essa equação para gradientes pequenos obtemos

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

que no limite de $\delta t \rightarrow 0$ torna-se

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 + \dots, \quad (2.55)$$

o que demonstra a presença do termo não linear $(\nabla h)^2$ no crescimento normal. Considerando a mudança de variável $h \rightarrow h + vt$ encontramos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \lambda(\nabla h)^2, \quad (2.56)$$

até segunda ordem. Usando as transformações de escala (2.49)-(2.51), obtemos

$$b^{\alpha-z} \frac{\partial h}{\partial t} = \lambda(b^{\alpha-1} \nabla h)^2. \quad (2.57)$$

Quando requeremos que a equação (2.57) seja invariante sob transformação de escala, encontramos

$$\alpha + z = 2, \quad (2.58)$$

independentemente da dimensão.

Podemos então escrever a equação estudada por Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [19]

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \lambda (\nabla h(\vec{x}, t))^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.59)$$

que representa uma generalização da equação EW com a inclusão de um termo que não é linear. Argumentos de escala falham na obtenção dos expoentes da equação KPZ e, além disso, ela não possui solução analítica como a equação EW [9]. Utilizando grupo de renormalização pode-se obter os expoentes de escala apenas em $d = 1$, e são eles $\beta = 1/3$, $\alpha = 1/2$ e $z = 3/2$ [19]. Resultados numéricos em $d = 2$ indicam $\beta \sim 0.24$, $\alpha \sim 0.4$ e $z \sim 1.67$ [9].

Uma interpretação geométrica do termo não-linear da equação KPZ pode ser encontrada na figura 2.19. Na parte superior é mostrada a interface em um instante t e na central a contribuição do termo não linear. Na parte inferior, mostramos a interface no instante $t + \delta t$ após a adição da contribuição do termo não linear. Ao contrário do termo laplaciano, que apenas reorganiza a interface, nessa equação não há conservação de massa refletindo o crescimento lateral na região onde a inclinação não é nula.

Em outros processos de crescimento de interfaces, tais como os experimentos de crescimento de filmes finos por MBE (*molecular beam epitaxy*), um mecanismo físico muito importante é a difusão de partículas. Essa difusão gera uma corrente macroscópica $\vec{j}(\vec{x}, t)$ responsável pelas mudanças locais na interface. Considerando a difusão de partículas em tais processos,

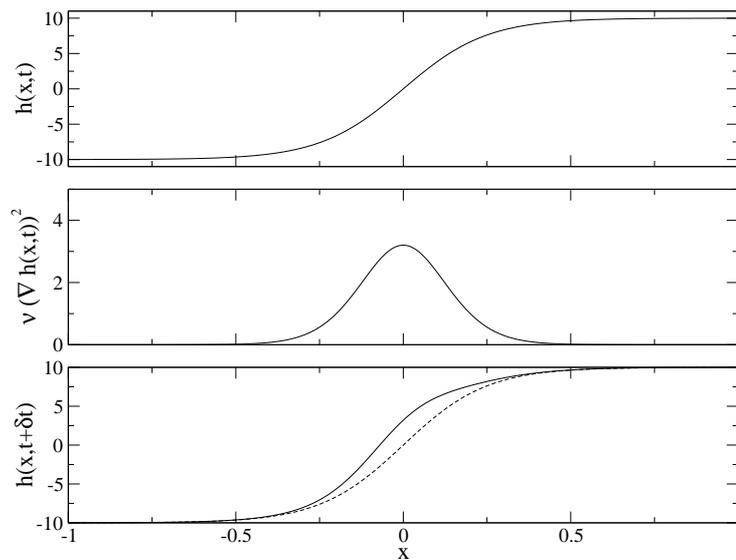


Figura 2.19: Ilustração do efeito do termo não linear na equação KPZ e construída usando a mesma estratégia da figura 2.17.

onde não existem formações de buracos internos e nem evaporação de partículas, devemos ter conservação de massa e assim o crescimento deve obedecer à equação de continuidade

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\kappa \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t). \quad (2.60)$$

Quando consideramos a deposição de partículas, essa equação assume a forma

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\kappa \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) + v + \eta(\vec{x}, t) \quad (2.61)$$

É razoável assumir que a corrente superficial tem a direção contrária à direção da maior variação do potencial químico local $\mu(\vec{x}, t)$, que reflete uma difusão para fora de regiões de maior concentração de partículas, ou seja,

$$\vec{j}(\vec{x}, t) \sim -\vec{\nabla} \mu(\vec{x}, t). \quad (2.62)$$

Uma equação que se enquadra nesse comportamento é a de Mullins-Herring (MH), na qual o potencial químico é proporcional à curvatura local da interface ($\nabla^2 h(\vec{x}, t)$). Assim, a equação (2.61), considerando a mudança de variável $h \rightarrow h + vt$, torna-se

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\kappa \nabla^4 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t) \quad (2.63)$$

Esta equação foi a primeira candidata a descrever os processos de crescimento envolvidos em experimentos como o MBE [39, 16, 17]. Novamente, para obter os expoentes de escala podemos usar argumentos de escala ou transformada de Fourier. Os valores encontrados são $\beta = (4 - d)/8$, $\alpha = (4 - d)/2$ e $z = 4$. Como $z = 4$, a saturação demora a ocorrer (t_{sat} cresce muito rápido comparado ao das equações vistas anteriormente), dificultando o estudo de modelos que possuem como ingrediente básico a difusão. Em particular obtemos $\beta = 3/8$ e $\alpha = 3/2$ para $d = 1$. Durante o crescimento aparecem instabilidades que levam a interfaces caracterizadas por grandes diferenças de altura e formação de platôs separados por grandes desfiladeiros. Isso se deve ao fato que $\alpha > 1$, ou seja, a largura da interface é grande comparável ao tamanho do sistema enquanto localmente ela permanece lisa. Note que, β e α assumem valores nulos em $d=4$, diferentemente do caso da equação EW, em que isto ocorre em $d = 2$ e da equação KPZ que parece não possuir essa dimensão crítica.

Uma interpretação geométrica do termo $\nabla^4 h(\vec{x}, t)$ pode ser obtida a partir da figura 2.20. Neste caso, a interpretação é um pouco mais complicada pois esse termo possui contribuições positivas e negativas (gráfico do meio). Ela possui regiões positivas próxima aos vales e negativas próximas aos picos que atuam imitando a preferência das partículas fixarem-se às bordas de terraços ao contrário de relaxarem procurando por um mínimo local [39].

Considerando argumentos de simetria (invariância sob translação na direção de crescimento e invariância rotacional do substrato) e a conservação do número de partículas na

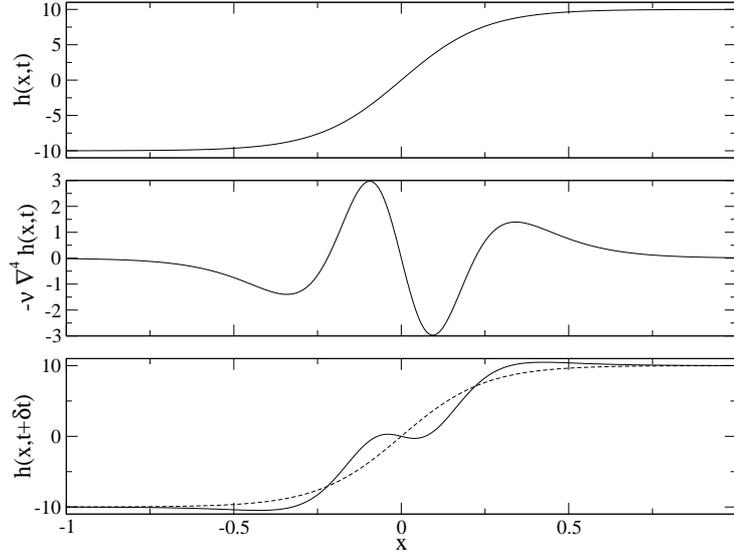


Figura 2.20: Ilustração do efeito do termo $-\kappa\nabla^4 h$ onde trocamos apenas a segunda derivada pela quarta derivada, na estratégia usada na figura 2.17.

superfície, podemos escrever a equação de crescimento geral [39], até quarta ordem, como segue

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = & \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) - \kappa \nabla^4 h(\vec{x}, t) + \lambda_1 \nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2 + \\ & + \lambda_2 \nabla \cdot (\nabla h(\vec{x}, t))^3 + \eta(\vec{x}, t). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Uma análise de escala mostra que o comportamento assintótico dessa equação no limite termodinâmico é dominado pelo termo $\kappa \nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2$. Portanto, assintoticamente os expoentes de escala serão aqueles da equação de EW, embora dificilmente tais expoentes sejam observados pelo fato que os demais termos podem contribuir para longos *crossovers*. Na ausência do termo laplaciano ($\nu = 0$), o termo $\lambda_2 \nabla \cdot (\nabla h(\vec{x}, t))^3$ é o dominante. Ele pode ser visto como uma correção de ordem superior ao termo $\nabla^2 (h(\vec{x}, t))$ da equação EW [9, 39]. Este fato pode ser observado através de uma comparação entre as figuras 2.17 e 2.21(a) (ela também atua relaxando a superfície) ou escrevendo esse termo como

$$\nabla \cdot (\nabla h(\vec{x}, t))^3 = 3 \nabla^2 h(\vec{x}, t) (\nabla h(\vec{x}, t))^2 \quad (2.65)$$

Finalmente, o termo $\nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2$ corresponde à situação em que partículas das regiões de maiores inclinações difundem para as de menores, como pode ser visto na figura 2.21(b). A equação em que $\nu = \lambda_2 = 0$ foi estudada por Lai e Das Sarma [39] e Villain [40] e é uma candidata para a descrição de processos que incluem a difusão de partículas, assim, a classe associada ao termo $\nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2$ será denominada VLDS.

Conforme mencionado anteriormente o termo dominante em uma equação estocástica determina a classe de universalidade com seus respectivos expoentes críticos. Uma maneira

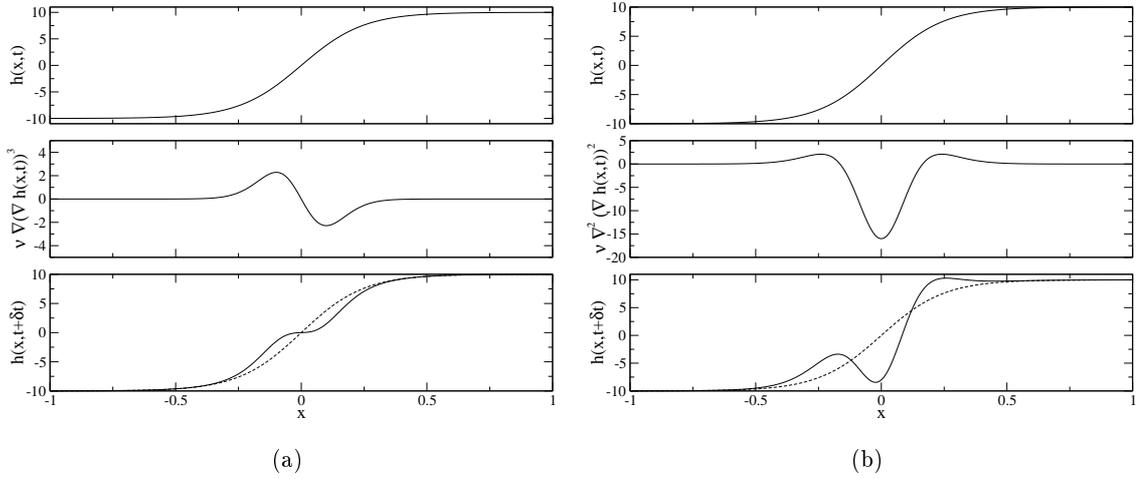


Figura 2.21: Ilustração do efeito dos termos não lineares na equação de difusão. Em (a) mostramos a contribuição do termo $\lambda_2 \nabla \cdot (\vec{\nabla} h(\vec{x}, t))^3$ e em (b), $\lambda_1 \nabla^2 (\nabla h(\vec{x}, t))^2$. Novamente usamos a mesma construção da figura 2.17.

simples para demonstrar qual termo é dominante é usar as mudanças de escala (2.49) e (2.50) e o limite hidrodinâmico ($b \rightarrow \infty$). Assim, para cada um dos termos das equações discutidas nesta seção obtemos

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' = b^{\alpha-2} \nabla^2 h \quad (2.66a)$$

$$(\nabla h)^2 \rightarrow (\nabla' h')^2 = b^{2\alpha-2} (\nabla h)^2 \quad (2.66b)$$

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' = b^{\alpha-4} \nabla^4 h \quad (2.66c)$$

$$\nabla^2 (\nabla h)^2 \rightarrow \nabla'^2 (\nabla' h')^2 = b^{2\alpha-4} \nabla^2 (\nabla h)^2 \quad (2.66d)$$

$$\nabla \cdot (\nabla h)^3 \rightarrow \nabla' \cdot (\nabla' h')^3 = b^{3\alpha-4} \nabla \cdot (\nabla h)^3 \quad (2.66e)$$

Como $2\alpha - 2$ é o maior expoente em b , o termo não linear da equação KPZ vai sempre dominar no limite hidrodinâmico. Quando esse termo não está presente, o termo linear da equação EW é o dominante e, sucessivamente, o termo $\nabla \cdot (\nabla h)^3$ domina sobre $\nabla^2 (\nabla h)^2$ que domina o $\nabla^4 h$. A tabela 2.1 contém um resumo dos expoentes críticos para cada um dos termos encontrados nas equações descritas nesta seção.

2.3.3 Correlações e *Crossover* em Interfaces

Uma pergunta central sobre o comportamento da evolução da rugosidade é: Por que a saturação da rugosidade ocorre? Um fenômeno muito importante presente no crescimento de superfícies é o surgimento de correlações espaciais [9]. Para visualizar tal processo consideraremos o modelo de deposição balística (seção 2.4, página 36). Neste modelo, partículas são depositadas balisticamente na direção vertical em sítios escolhidos ao acaso e se fixam ao primeiro sítio vizinho ao agregado (figura 2.22(a)). Na figura 2.22(b) mostramos um padrão

Classe de Universalidade		$d = 1 + 1$			$d = 2 + 1$		
		α	z	β	α	z	β
EW	$\nabla^2 h$	1/2	2	1/4	0 (log)	2	0 (log)
KPZ	$(\nabla h)^2$	1/2	3/2	1/3	~ 0.4	~ 1.67	~ 0.24
MH	$\nabla^4 h$	3/2	4	3/8	1	4	1/4
VLDS	$\nabla^2(\nabla h)^2$	1	3	1/3	2/3	10/3	1/5
	$\nabla \cdot (\nabla h)^3$	3/4	5/2	3/10	1/2	3	1/6

Tabela 2.1: Expoentes críticos associados a cada termo das equações estocásticas estudadas anteriormente.

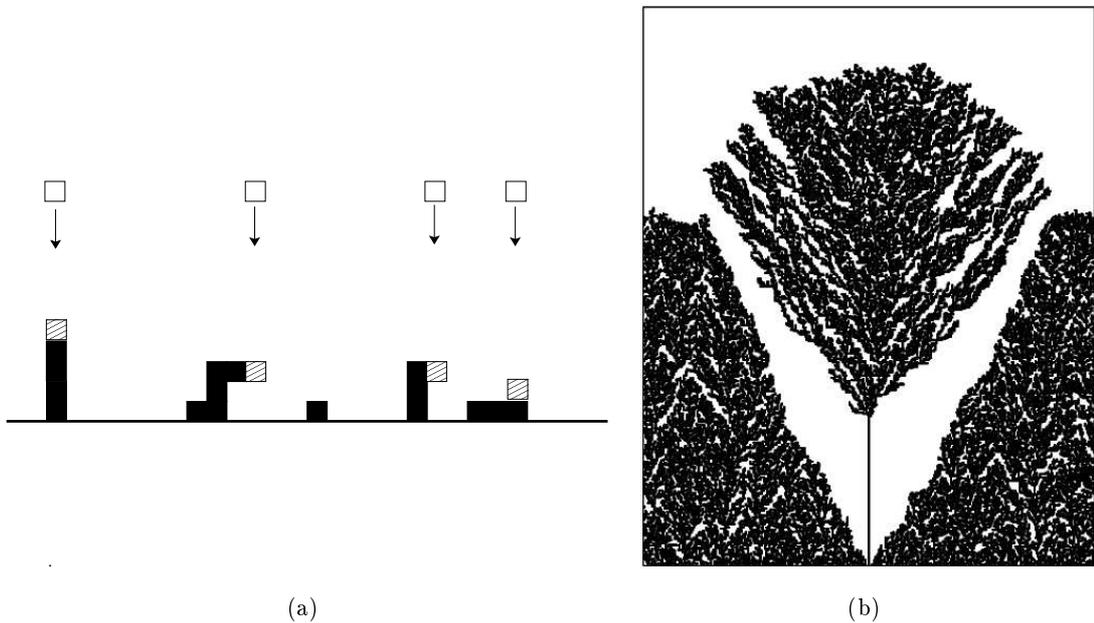


Figura 2.22: (a) Ilustração das regras de crescimento do modelo de deposição balística. (b) Padrão obtido no modelo de deposição balística em um sistema de tamanho linear $L = 400$ após 400 passos de tempo (um passo de tempo é definido como L partículas depositadas) e condição inicial dada por $h_i(0) = 0 \forall i \neq L/2$ e $h_i(0) = L/2$ para $i = L/2$.

obtido em um sistema de tamanho $L = 400$ e condição inicial dada por $h_i(0) = 0 \forall i \neq L/2$ e $h_i(0) = L/2$ para $i = L/2$ [9]. Na figura observamos um crescimento lateral a partir do sítio central que influencia o crescimento de seus vizinhos. Essa influência se propaga para outros sítios à medida que o sistema evolui até que essa correlação lateral alcance o tamanho do sistema, quando a rugosidade atinge seu valor de saturação. Além do crescimento lateral, outros processos tais como relaxação, evaporação e difusão podem produzir correlações laterais no sistema.

Outro processo importante é a competição entre diferentes mecanismos durante o crescimento da interface. O efeito de um mecanismo inicialmente dominante pode deixar de sê-lo

quando um outro processo passa a exercer uma influência maior. Tal competição pode levar a uma mudança entre regimes distintos, separados por um tempo característico t_c , com valores distintos do expoente de crescimento. Esse fenômeno fica evidente por exemplo no modelo proposto por Silva e Moreira [41], no qual um processo de relaxação restrita incorpora características dos modelos de relaxação superficial [42] e de crescimento com restrição na diferença de alturas [43] descritos na seção 2.4. Nesse modelo, quando a condição de restrição $h_i(t) - h_{\{j\}}(t) < M$ (em que $\{j\}$ representa a vizinhança e $M > 0$ é a maior diferença de altura permitida entre sítios vizinhos) não é satisfeita, a partícula relaxa procurando um mínimo local dentro de uma distância s . Se o mínimo não é encontrado dentro dessa distância a partícula evapora. Como pode ser visto na figura 2.23, existe uma mudança no expoente de crescimento do valor $\beta = 1/4$ em tempos curtos, para $\beta = 1/3$, após um tempo característico t_c . O tempo característico depende apenas do parâmetro s . Como veremos na seção 2.4, o modelo de Silva e Moreira (SM) é uma mistura de outros dois, o modelo de Kim-Kosterlitz, que possui como ingrediente básico a recusa de partículas (aquelas que não satisfazem à condição de restrição $h_i(t) - h_{\{j\}}(t) < M$) e o modelo de Family onde ocorre a relaxação de partículas (procura por um mínimo local). Nestes modelos, o expoente de crescimento é $\beta = 1/3$ e $\beta = 1/4$, respectivamente. O que indica que no modelo SM a relaxação é dominante para $t < t_c$ e posteriormente a recusa de partículas domina.

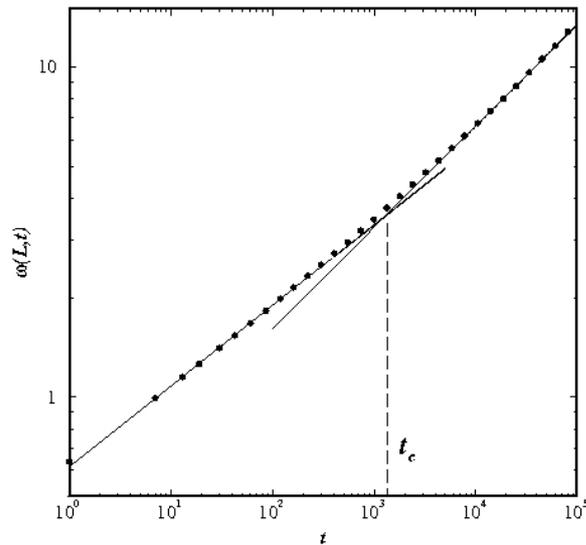


Figura 2.23: Ilustração do *crossover* entre dois regimes diferentes no modelo proposto por Silva e Moreira. Figura retirada da referência [41].

2.4 Modelos de Crescimento de Interfaces

Vários modelos de deposição de sólido sobre sólido (SOS, *solid on solid*) foram propostos com o objetivo de compreender melhor a dinâmica de crescimento de interfaces. Esses modelos são, em geral, construídos em uma rede hipercúbica em d dimensões de tamanho L^d . A variável $h_i(t)$ representa a altura do sítio i num dado instante t . Nessa aproximação procuramos reproduzir as características mais relevantes dos processos que ocorrem durante o crescimento através de regras tão simples quanto possível. Nesta seção, descreveremos alguns dos principais modelos discretos encontrados na literatura e apresentaremos, por simplicidade alguns resultados em $1 + 1$ dimensões, ou seja, o crescimento em substratos unidimensionais.

2.4.1 Deposição Aleatória

O modelo de deposição mais simples é o de deposição aleatória no qual, a cada passo de tempo, L partículas são depositadas ao acaso sobre um substrato d -dimensional. As partículas colam-se permanentemente ao sítio de deposição, ou seja, apenas acrescentamos 1 à altura do sítio escolhido. Nesse modelo colunas crescem independentemente e, portanto, não existem correlações no sistema. Consequentemente, a rugosidade da interface cresce indefinidamente com o expoente de crescimento $\beta = 1/2$ (em todas as dimensões). A figura 2.24 ilustra uma interface gerada em um substrato unidimensional de tamanho $L = 100$ após 200 passos de tempo. Observamos uma interface com grandes diferenças de altura.

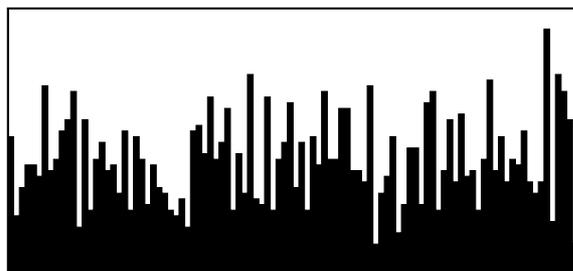


Figura 2.24: Perfil gerado para a deposição aleatória em uma rede de tamanho $L=100$ após 200 passos de tempo.

2.4.2 Deposição Aleatória com Relaxação - Modelo de Family

A difusão superficial é um processo muito comum no crescimento de interfaces. A primeira tentativa para incluir a difusão em modelos de crescimento do tipo SOS foi proposta por Family [42]. Neste modelo, as partículas são depositadas ao acaso e procuram na vizinhança do sítio de deposição um sítio com menor altura, um mínimo local, onde fixam-se permanentemente. Essa procura pode ser limitada, permitindo que a partícula procure dentro de uma

vizinhança de tamanho s . Na figura 2.25 mostramos uma interface gerada em um sistema unidimensional de tamanho $L = 100$ e com tamanho da vizinhança $s = 1$.



Figura 2.25: Perfil gerado com o modelo de deposição aleatória com relaxação das partículas em uma rede de tamanho $L=100$ após 50 passos de tempo.

Essa difusão de partículas gera correlações laterais que levam à obtenção de interfaces muito mais suaves que a do modelo de deposição aleatória, com propriedades de escala não triviais (seção 2.3.1). Na figura 2.26(a) é mostrada a evolução temporal da rugosidade para o modelo de Family em $d = 1 + 1$ usando uma relaxação com o parâmetro $s = 1$ para a procura do mínimo. Como pode ser visto na figura 2.26(b), o comportamento da rugosidade obedece à relação de escala de Family-Vicsek. Esse processo de procura de um mínimo local corresponde a uma relaxação superficial que leva a expoentes na classe de universalidade de EW (tabela 2.1, página 34).

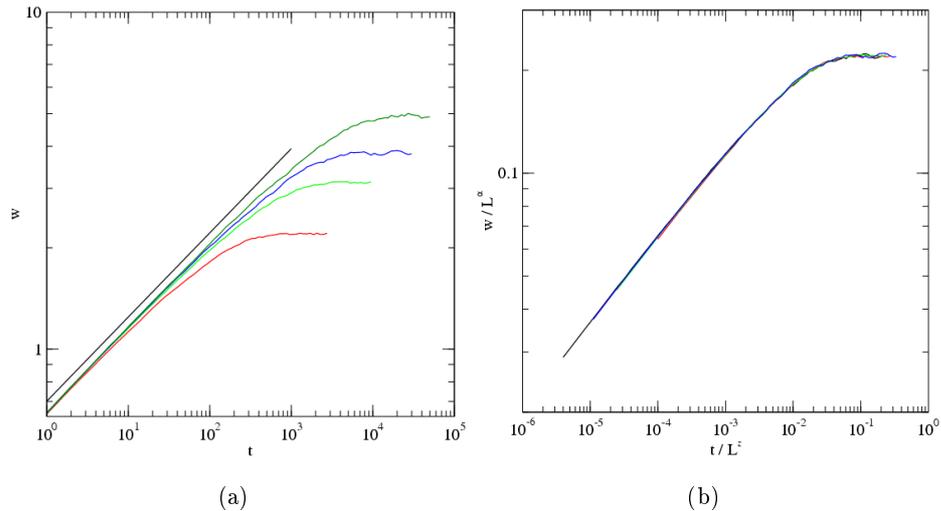


Figura 2.26: (a) Evolução temporal da rugosidade para o modelo de Family em $d = 1 + 1$ usando difusão de um passo na procura do mínimo em redes de tamanhos $L = 100, 200, 300$ e 500 (de baixo para cima). A linha reta possui inclinação 0.25. (b) Colapso das curvas usando a relação de Family-Vicsek, com $\alpha = 0.5$ e $z = 2$.

2.4.3 Deposição Aleatória com Recusa de Partículas - Modelo de Kim-Kosterlitz

Outro modelo tipo SOS de fácil implementação foi proposto por Kim e Kosterlitz [43]. Nesse modelo, o crescimento da interface é baseado numa regra de restrição na diferença de alturas. A regra de evolução é a seguinte: escolhemos um sítio i ao acaso e, quando a condição de restrição da diferença de alturas entre o sítio escolhido e seus vizinhos $|\Delta h| \leq M$ for satisfeita, uma partícula é depositada na coluna do sítio sorteado, i.e., $h_i \rightarrow h_i + 1$. Caso contrário, essa partícula é recusada. Neste modelo, a diferença de alturas encontrada na interface fica restrita pelo valor do parâmetro M , o que leva a uma suavização da interface para pequenos valores de M . Para $M \rightarrow \infty$, esse modelo torna-se o de deposição aleatória. Na figura 2.27(a) mostramos a interface gerada para o caso em que $M = 1$. Esse modelo também apresenta uma interface muito mais lisa que as obtidas no modelo de deposição aleatória. Na figura 2.27(b) é mostrada uma interface gerada usando $M = 10$. Para tempos iniciais, quando as diferenças de alturas são menores que o parâmetro M , a deposição ocorre de maneira aleatória e a interface assemelha-se à do modelo de deposição aleatória. Após um tempo característico t_c , a restrição na diferença de alturas governa o processo de deposição, levando ao aparecimento de correlações entre sítios. Na figura 2.28(a) mostramos a evolução temporal da rugosidade com $M = 1$ para diferentes tamanhos do sistema em $d = 1 + 1$, e encontramos $\beta \approx 1/3$, $\alpha \approx 1/2$ e $z \approx 3/2$. Na figura 2.28(b) mostramos o colapso dessas curvas usando o *ansatz* de Family-Vicsek (equação (2.25)). Concluímos então que esse modelo em $1 + 1$ dimensões pertence à classe de universalidade KPZ.

A evolução temporal da rugosidade no modelo KK com vários valores do parâmetro M é mostrada na figura 2.29. Para valores menores de M , obtemos $\beta = 1/3$ ao longo de toda a simulação, já para valores maiores de M , $\beta = 1/2$ no início e após um tempo característico t_c , $\beta \approx 1/3$. Como pode ser visto, para um tamanho de sistema fixo o tempo característico cresce com M . Esse modelo pode ser usado para ilustrar o efeito do *crossover*

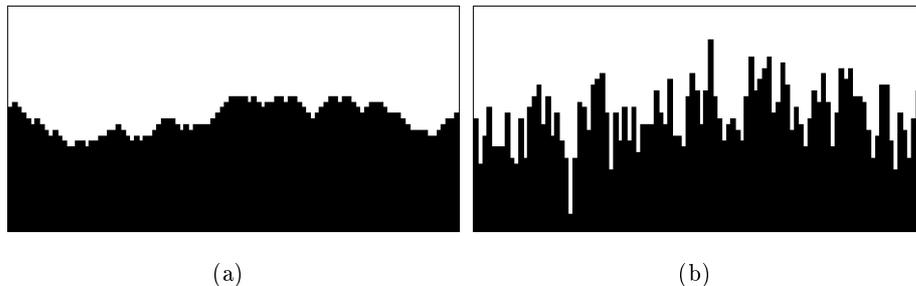


Figura 2.27: Perfis gerados na deposição aleatória com recusa das partículas em uma rede de tamanho linear $L=100$ após 50 passos de tempo usando (a) $M = 1$ e (b) $M = 10$. Note que no caso $M = 10$, o perfil gerado assemelha-se ao da deposição aleatória.

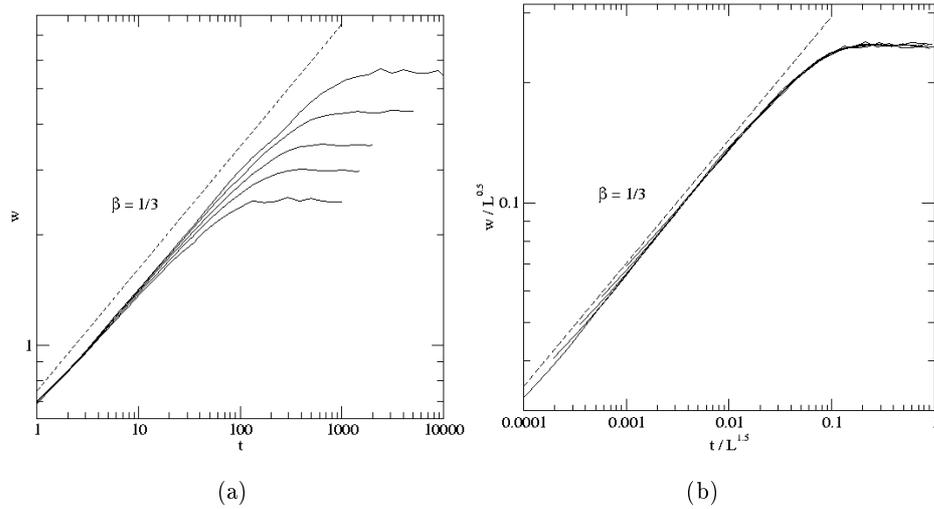


Figura 2.28: (a) Evolução temporal da rugosidade no modelo de Kim-Kosterlitz para diferentes tamanhos do sistema: $L = 100, 200, 300, 500$ e 800 (de baixo para cima). (b) Colapso das curvas mostradas em (a) usando os expoentes $\alpha = 0.5$ e $z = 1.5$.

sobre a rugosidade quando diferentes processos agem no crescimento. Note que conforme mencionado anteriormente, para M grande, as diferenças de alturas iniciais não ultrapassam a condição de restrição, somente após o tempo característico é que a regra de restrição começa a agir.

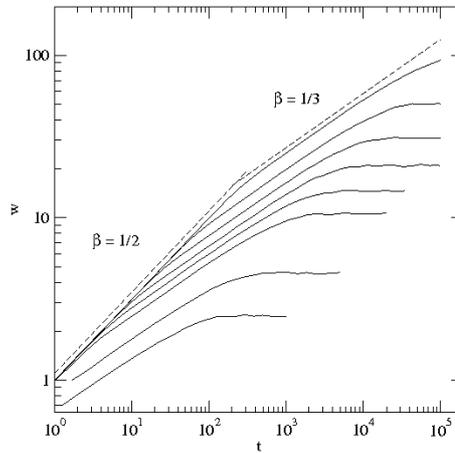


Figura 2.29: Evolução temporal da rugosidade no modelo de Kim-Kosterlitz para $M = 1, 2, 5, 7, 10, 15, 25,$ e 50 (de baixo para cima) e um sistema 1d de tamanho $L = 400$. Note que para valores maiores de M a rugosidade inicialmente cresce com expoente $\beta = 1/2$ e, após um tempo característico t_c , o valor $\beta \approx 1/3$ é esperado.

2.4.4 Deposição Balística - Modelo de Vold

Neste modelo as partículas são depositadas ao acaso e fixam-se ao primeiro vizinho do agregado encontrado durante um movimento balístico perpendicular e em direção ao subs-

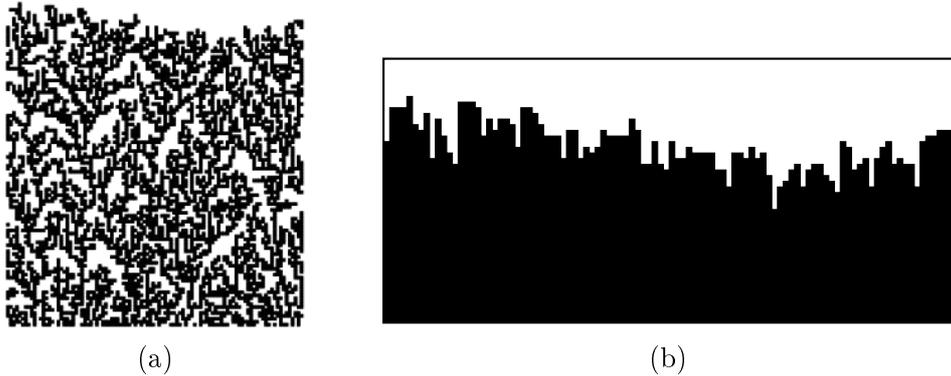


Figura 2.30: (a) Perfil gerado para o modelo de deposição balística em uma rede de tamanho $L=100$ após 50 passos de tempo. (b) Interface gerada considerando os pontos mais altos da estrutura.

trato [44, 45]. Podemos escrever a regra de evolução para o modelo DB em $d = 1 + 1$ como

$$h_i(t) = \max(h_{i-1}(t-1), h_i(t-1) + 1, h_{i+1}(t-1)), \quad (2.67)$$

em que $\max(x, y, z)$ retorna o maior valor entre x, y , e z . Essa regra de evolução permite que partículas se fixem lateralmente a interface formando lacunas, como pode ser visto na figura 2.30(a). Na figura 2.30(b) mostramos a interface do padrão obtido em (a), preenchendo todos os pontos abaixo do mais alto em cada um dos sítios da rede.

A evolução temporal da rugosidade é mostrada na figura 2.31(a), o expoente de crescimento encontrado foi $\beta \approx 0.30$. Em 2.31(b), mostramos as curvas para vários tamanhos do sistema, colapsadas usando $\alpha = 0.44$ e $z = 1.53$ – esses valores estão próximos aos encontrados

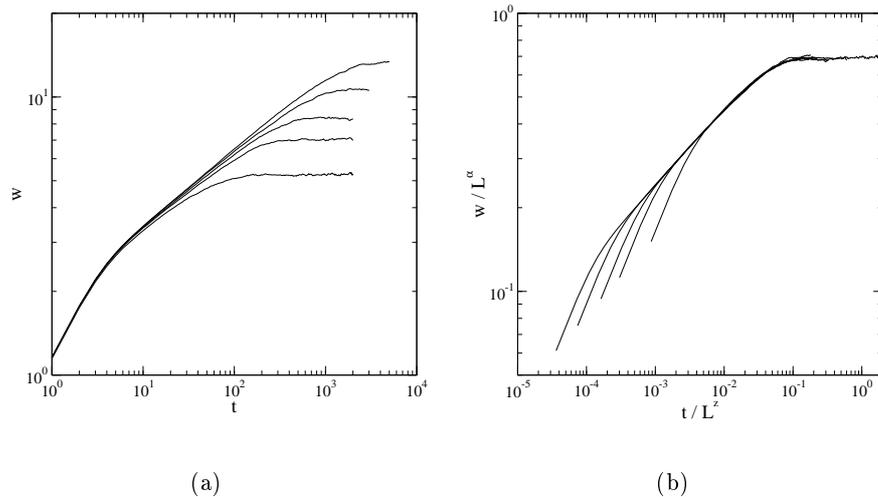


Figura 2.31: (a) Evolução temporal da rugosidade no modelo de deposição balística para $L = 100, 200, 300, 500$ e 800 (de baixo para cima). (b) Colapso das curvas usando $\alpha = 0.44$ e $z = 1.53$. Podemos observar que existe um transiente inicial para o qual o expoente de crescimento $\beta = 0.5$. Note que quando as curvas são colapsadas a região da curva pertencente a esse transiente se separa.

para a equação KPZ. Assim, o modelo de BD também pertence à classe de universalidade KPZ. Esse modelo possui uma lenta convergência nos expoentes para os valores observados e para determinar a classe de universalidade é necessário o uso de simulações em larga escala. Essa lenta convergência se deve à formação de lacunas no interior da interface.

2.4.5 Deposição Aleatória com Difusão de Partículas

Modelos que procuram capturar a difusão de partículas no crescimento de interfaces têm sido intensivamente estudados [39, 16, 17, 46, 47, 48]. Além da motivação teórica, existe o interesse de compreender melhor o crescimento de interfaces via técnicas como o MBE (*molecular beam epitaxy*), em que a difusão de material na superfície desempenha um papel muito importante. Nesses modelos, existem aproximações com regras simples nas quais a partícula difunde apenas no momento da deposição bem como, outros mais reais, como o caso do modelo de ativação térmica [9, 17], que consideram a difusão de todas as partículas da superfície.

Em geral, nos modelos SOS construídos para capturar a difusão superficial (um dos mecanismos físicos responsáveis pela suavização da interface), a evaporação de material e a formação de lacunas (no interior da interface) são desprezadas. Modelos que seguem tais premissas são, por exemplo, o proposto por Wolf e Villain (WV) [16] e o por Das Sarma e Tamborenea (DT) [17]. No modelo WV partículas são adicionadas ao acaso e procuram maximizar seu número de ligações com a interface, difundindo para o sítio vizinho com o maior número de ligação, como mostra a figura 2.32(a). Já no modelo DT, as partículas adicionadas ao acaso procuram aumentar seu número de ligações difundindo para a vizinhança somente quando possuem apenas uma ligação, figura 2.32(b). Em ambos os modelos, quando as partículas não conseguem maximizar ou aumentar seu número de ligações, elas permanecem fixas ao sítio de deposição.

A morfologia das interfaces geradas por esses modelos surpreende. Nelas, ao contrário do esperado, aparecem platôs e vales separados por grandes degraus (figura 2.33). A evolução temporal da rugosidade em $d = 1 + 1$ dimensões para os dois modelos fornecem $\beta = 3/8$. Contudo, apesar do expoente de crescimento antes de um tempo característico ser o mesmo para os dois modelos, assintoticamente eles assumem valores de classes de universalidade diferentes. Em $d = 1 + 1$, o modelo de WV assintoticamente pertence à classe de universalidade de EW ($\beta = 1/4$) enquanto que o modelo DT à classe de universalidade de VLDS ($\beta = 1/3$). Embora esse expoente seja o mesmo da equação KPZ ele não indica a classe de universalidade associada a ela devido às simetrias do problema (veja seção 2.3.2). Em $d = 2 + 1$ dimensões, a classe de universalidade de ambos não está bem estabelecida. Šmilauer e Kotrla [49] encontraram no modelo WV uma transição para a classe de universalidade de EW ($\beta = 0$). Entretanto, usando redução de ruído, Das Sarma *et al.* [50] encontraram $\beta = 1/3$, que não sinaliza para

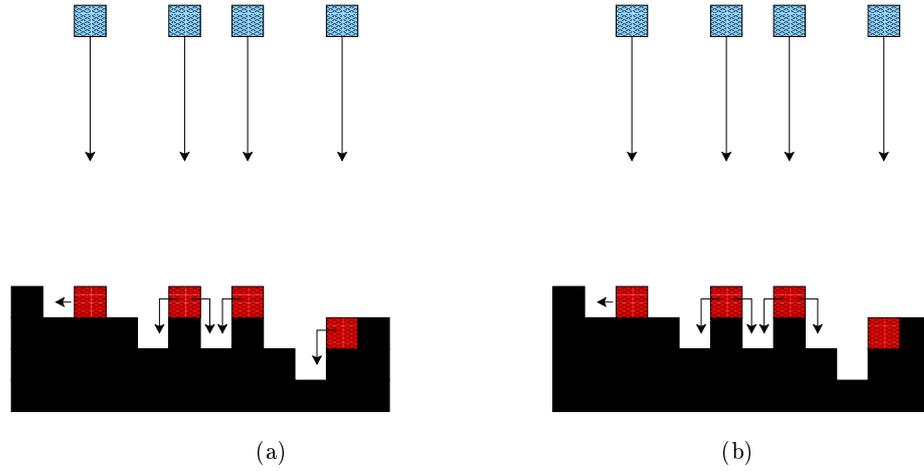


Figura 2.32: Regras de evolução para os modelos de (a) Wolf-Villain e (b) de Das Sarma-Tamborenea.

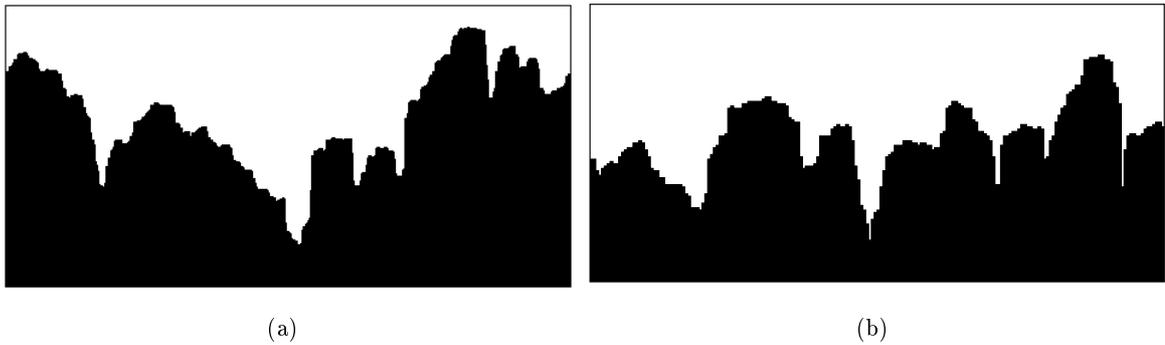


Figura 2.33: Perfil gerado para os modelos (a) de WV e (b) DT. As partículas depositadas difundem para maximizar ou aumentar o número de ligações logo após a deposição, respectivamente.

nenhuma das classes de universalidade associadas aos termos apresentados na tabela 2.1. Já no caso do modelo DT, Das Sarma *et al.* [50] encontraram uma mudança para a classe de universalidade de EW ($\beta = 0$). Os dois modelos apresentam uma classe de universalidade em $d = 2 + 1$ diferente daquela encontrada para $d = 1 + 1$.

2.4.6 Modelos de Crescimento e Classes de Universalidade

Podemos agrupar os modelos descritos anteriormente nas classes de universalidade associadas a cada termo das equações estocásticas vistas na seção 2.3.2. Na tabela 2.2, apresentamos um resumo da classe de universalidade dos modelos apresentados na seção anterior.

Modelo	β	α	Classe de Universalidade
$d = 1 + 1$			
Family	0.24	0.48	EW
KK	0.33	0.5	KPZ
DB	0.33	0.47	KPZ
WV	$0.37 \rightarrow 0.24$	0.48	$\nabla^4 \rightarrow$ EW
DT	$3/8 \rightarrow 0.32$	1.40	$\nabla^4 \rightarrow$ VLDS
$d = 2 + 1$			
Family	$0(\log)$	$0(\log)$	EW
KK	0.25	0.4	KPZ
DB	0.24	0.33	KPZ
WV	$0.20 \rightarrow 0.33$	0.66	$\nabla^4 \rightarrow$ EW ou $1/3$
DT	$0.24 \rightarrow 1/3$	0.95	$\nabla^4 \rightarrow$ VLDS

Tabela 2.2: Expoentes críticos e classes de universalidade dos modelos SOS discretos [9].

Parte II

Modelos de Crescimento de Interfaces

Capítulo 3

Efeito da Difusão em um Modelo de Crescimento de Interfaces

3.1 Introdução

Os modelos de Wolf e Villain (WV) [16] e Das Sarmas e Tamborenea (DT) [17] são de grande importância porque foram os primeiros modelos propostos para descrever experimentos de crescimento de filmes finos por MBE, além de serem a primeira evidência numérica demonstrando a existência de expoentes de escala em modelos discretos de deposição diferentes das classes de universalidade EW e KPZ. No modelo WV, as partículas depositadas procuram maximizar seu número de ligações verificando qual sítio possui maior número de ligações entre os sítios de deposição e em seus primeiros vizinhos. No modelo DT, as partículas procuram apenas aumentar o número de ligações quando o sítio de deposição possui somente uma. Portanto, nesses modelos, as partículas difundem apenas na vizinhança do sítio de deposição, ou seja, elas possuem uma mobilidade limitada. Uma característica comum desses e de outros modelos que consideram uma mobilidade limitada é se um sítio mais favorável é encontrado, ou não, as partículas permanecem fixas irreversivelmente ao substrato. As regras desses modelos não permitem uma relaxação real da interface (não existe dinâmica quando a deposição é interrompida). Portanto, os modelos de mobilidade limitada são uma descrição limitada de processos de crescimento como MBE, nos quais as partículas podem difundir com maior ou menor facilidade, dependendo da temperatura do substrato. Modelos mais elaborados foram estudados, como por exemplo, os que consideram a ativação térmica nos quais todos os átomos da superfície podem difundir. Nesses modelos, a difusão das partículas depende da energia de ativação necessária para quebrar sua ligação com o substrato [17]. Apesar desses modelos capturarem uma característica essencial de processos tipo MBE (a competição entre deposição e difusão atômica) eles demandam muito tempo computacional. Assim, o estudo

do regime assintótico é extremamente árduo.

Um regime de crescimento de interesse especial é aquele que ocorre em monocamada por monocamada. Nesse crescimento, partículas depositadas difundem até encontrarem outras iniciando a formação de ilhas pequenas. Com o passar do tempo mais partículas fixam-se às bordas dessas ilhas até que elas começam a coalescer. Dessa maneira, os terraços unem-se completando uma camada e novas ilhas começam a ser formadas sobre essa camada. Assim, quantidades como a rugosidade, o número de partículas difundindo, o tamanho médio das ilhas e outras grandezas que são sensíveis à morfologia da interface, oscilam no tempo. Entretanto, foi demonstrado que esse regime é transiente e que é devido ao tamanho finito do substrato [51]. As oscilações são amortecidas e persistem até um tempo característico. Assim, o regime oscilatório na rugosidade cede lugar, por exemplo, ao crescimento em lei de potência [51, 52, 53, 54]. Além disso, trabalhos recentes relatam que o regime de crescimento em lei de potência nos modelos WV e DT apresenta uma mudança na classe de universalidade de Mullins-Hering (MH) para a classe de Edward-Wilkinson (EW) ou Villain-Lai-Das Sarma (VLDS), respectivamente [55, 56, 57, 58, 59]. Em particular, Chua *et al.* [55] encontraram para o modelo WV que existe um regime intermediário no qual observa-se os expoentes da classe VLDS entre os regimes MH e EW.

Outro regime de crescimento de interface que tem atraído muita atenção é aquele no qual a barreira de Schwoebel [9] (barreira que dificulta o movimento de partículas para fora de terraços) induz tendências nas caminhadas das partículas e, conseqüentemente, instabilidades que podem levar a superfícies com formação de morros (*mound formation*) [20, 21, 22]. Nestes casos, a rugosidade apresenta um *crossover* no expoente de crescimento de um valor inicial β , que depende dos detalhes do modelo em questão, para um valor assintótico $\beta' \approx 0.5$, que corresponde ao expoente do modelo de deposição aleatória.

Neste capítulo estudamos um modelo de crescimento de interface com competição entre deposição e difusão de partículas. O principal objetivo deste trabalho foi investigar as alterações morfológicas e a dinâmica de crescimento de interfaces devido a essa competição em substratos uni e bidimensionais. Além disso, estudamos uma versão um pouco modificada que considera uma direção preferencial para a difusão, bem como o modelo de DT com uma tendência na caminhada estudada por Das Sarma e Punyindu [20] com o objetivo de investigar a formação de morros no crescimento de interfaces.

3.2 Modelo

Em nosso modelo as partículas são depositadas em um substrato d -dimensional com L^d sítios. A altura da interface no instante t é representada por $h_i(t)$, com $i = 1, 2, \dots, L^d$. A condição inicial é dada por $h_i(0) = 0 \forall i$, ou seja, a simulação sempre começa com a deposição

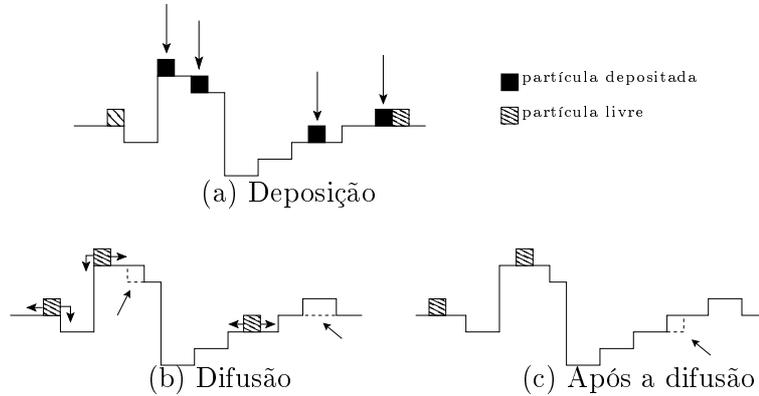


Figura 3.1: Ilustração das regras de evolução do modelo de crescimento de interfaces. (a) Perfil com as partículas livres (hachuradas) e a deposição de partículas no instante t (destacadas em preto). (b) Difusão das partículas livres. Repare que as partículas que estavam próximas à borda ou a outra partícula livre aparecem incorporadas à interface (linhas pontilhadas indicadas pelas setas). (c) Interface após a difusão das partículas livres. Note que a partícula que colidiu com uma borda aparece incorporada ao substrato.

sobre um substrato liso. A evolução temporal pode ser resumida pelas regras ilustradas na figura 3.1 e descritas a seguir:

- i.* A cada passo de tempo, $N_p = f \times L^d$ partículas são depositadas ao acaso sobre o substrato, em que f é a taxa de deposição de partículas.
- ii.* Se a partícula depositada possui mais que uma ligação, ela fixa-se irreversivelmente ao substrato. Caso contrário, a partícula permanece livre para difundir.
- iii.* Depois da deposição, todas partículas livres (depositadas recentemente ou não) executam um passo ao acaso.
- iv.* Durante a difusão, se uma partícula livre colide com um terraço (ou ilha) ou com outra partícula livre, ela fixa-se permanentemente ao substrato. Se uma partícula livre não encontra outra ou um terraço, ela permanece livre para difundir no próximo passo de tempo.

Se o número de partículas depositadas N_p for menor que 1 assumimos esse número como a probabilidade de depositar uma partícula a cada passo de tempo. Uma vez que a cada passo de tempo, as partículas livres realizam um passo ao acaso, suas posições são armazenadas em um conjunto de variáveis $\{\vec{r}_i\}$, com $i = 1, 2, \dots, N_{fp}$ em que N_{fp} é o número de partículas livres. A implementação dos passos é feita selecionando ao acaso as partículas.

3.3 Resultados

Neste trabalho investigamos o modelo em $d = 1 + 1$, ou seja, com um substrato unidimensional, e $d = 2 + 1$, com o substrato bidimensional. Em $d = 1 + 1$ usamos condições de contorno periódicas fazendo o sítio $i = 1$ ser o vizinho do $i = L$ e em $d = 2 + 1$ utilizamos condições de contorno helicoidais. Neste caso, alocamos a rede quadrada em um vetor unidimensional de tamanho L^2 e a vizinhança do sítio i é o conjunto de sítios definidos por $\{i - 1, i + 1, i - L, i + L\}$. As condições de contorno são periódicas, ou seja, os L primeiros sítios são vizinhos dos L últimos.

Para $d = 1 + 1$ dimensões usamos redes de tamanhos variando de $L = 10$ até 10^4 com uma amostragem variando de 10^4 a 50 repetições, respectivamente. Já para o caso de $d = 2 + 1$, usamos substratos de tamanho linear variando de 10 até 200 com 5000 a 50 amostras, respectivamente. O parâmetro f foi variado de 10^{-6} a 10^0 para verificar seu efeito sobre a dinâmica de crescimento da interface. Em todas as simulações, medimos a rugosidade (equação (2.19)), sem considerar a contribuição das partículas livres para a altura da interface.

3.3.1 Simulações em $d = 1 + 1$ dimensões

Na figura 3.2 é mostrada a evolução da interface em uma rede de tamanho linear $L = 400$ para três valores da taxa de deposição. Como pode ser visto, para taxas de deposição baixas, a superfície é lisa e, à medida que f aumenta, a interface torna-se mais rugosa. Na

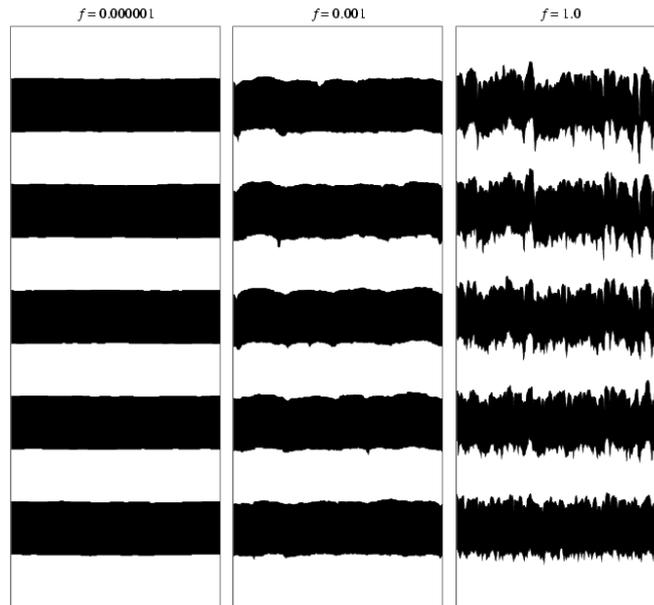


Figura 3.2: Mudanças na morfologia das interfaces devido a taxa de deposição (f). O tamanho da rede usado foi $L = 400$ e $f = 10^{-6}$, 10^{-3} e 10^0 , da esquerda para a direita. A cada 100 camadas adicionadas a cor é alterada.

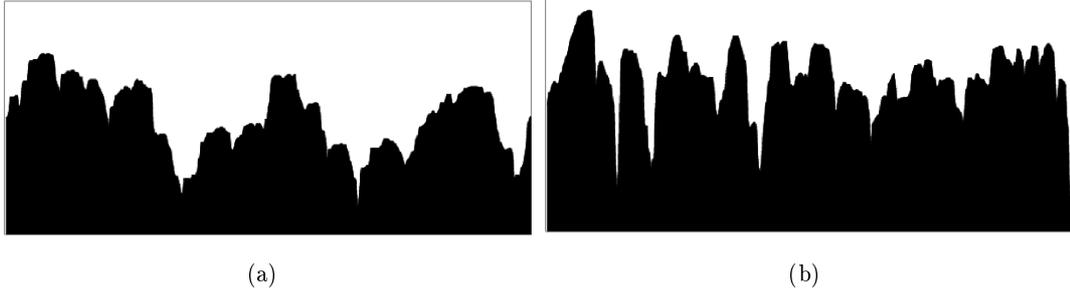


Figura 3.3: Formação de vales profundos, para $t = 10^5$ na região de saturação da rugosidade. O tamanho do sistema usado foi $L = 400$ e $f = 0.1$ em (a) e $f = 1.0$ em (b).

figura 3.3 mostramos que, para tempos muito longos, ocorre a formação de depressões grandes separadas por grandes inclinações, o que é uma assinatura dos modelos de deposição com difusão [16, 17].

Na figura 3.4(a) mostramos gráficos típicos da evolução da rugosidade para valores de $f > 10^{-5}$ para um sistema de tamanho $L = 10^3$. Como pode ser visto, o valor da rugosidade cresce quando aumentamos f . Quando consideramos $f \ll 1$, um regime de crescimento em monocamada por monocamada (MM) é observado para tempos iniciais e posteriormente cede lugar a um crescimento em lei de potência. Kallabis *et al.* [51] mostraram, em um modelo que considera a deposição e a difusão de partículas, que o tempo de separação entre esses dois regimes de crescimento depende da razão entre as taxas de deposição e difusão.

Note que a rugosidade no regime oscilatório (regime de crescimento MM) alcança seus valores mínimos quando a altura média alcança um valor inteiro, ou seja, quando uma camada é completada, e seus valores máximos para valores semi-inteiros da altura média. Como pode ser visto na figura 3.4(b), o número médio de partículas livres N_{fp} também possui um regime oscilatório no início da simulação devido ao crescimento MM. Note que N_{fp} alcança seu valor máximo quando a rugosidade alcança seu valor mínimo. Nesta fase na qual a superfície é lisa novas ilhas começam a ser formadas e as partículas livres “demoram” a encontrar uma ligação lateral. Após o crescimento MM, quando a rugosidade cresce como uma lei de potência, o número de partículas livres decresce para um valor constante quando a rugosidade alcança seu valor estacionário.

Para tamanhos pequenos (até $L = 10^3$) as simulações sugerem que o expoente de crescimento depende da taxa de deposição para $f < 0.1$, enquanto para valores de $f \geq 0.1$, o expoente $\beta \approx 0.37$ foi encontrado (tabela 3.1). Em particular, encontramos $\beta = 0.374 \pm 0.004$ para $f = 1.0$. Este valor concorda com o encontrado nos modelos WV e DT. Entretanto, para sistemas maiores ($L = 10^4$), o expoente de crescimento $\beta \approx 0.37$ foi encontrado independentemente de f . Portanto, os efeitos de tamanho finito são muito mais pronunciados para valores baixos de f .

Na figura 3.5(a) mostramos a evolução da rugosidade para $f = 0.1$ em sistemas de

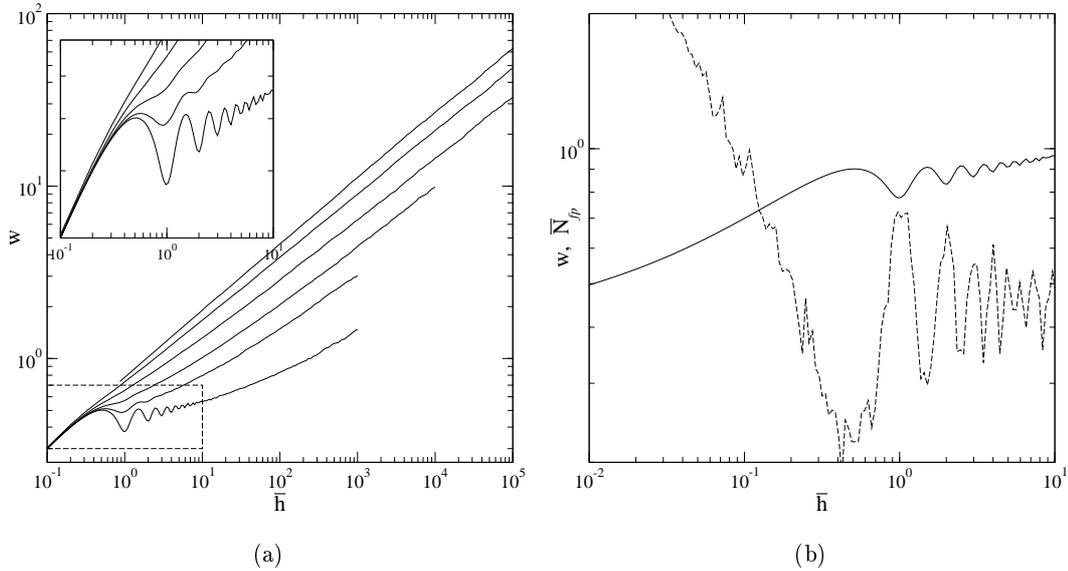


Figura 3.4: (a) Evolução temporal da rugosidade para um sistema de tamanho $L = 10^3$ e seis valores da taxa de deposição $f = 10^k$, com $k = 0, -1, \dots, -5$. A curva que possui o menor valor da rugosidade é aquela com a menor taxa de deposição. No detalhe mostramos a parte indicada pelas linhas tracejadas. (b) Evolução temporal do número médio de partículas livres sobre o substrato (curva tracejada) e da rugosidade (curva cheia) para o caso em que $f = 10^{-5}$.

f	1.0	0.5	0.1	0.01	0.005	0.002	0.001	0.0005	0.0002	0.0001
β	0.37	0.37	0.36	0.35	0.34	0.34	0.33	0.32	0.31	0.30

Tabela 3.1: Expoentes de crescimento para diferentes valores de f em $d = 1 + 1$ dimensões quando $L = 10^3$.

vários tamanhos. Usando a curva para $L = 200$ encontramos $\beta = 0.365 \pm 0.004$ e a curva da rugosidade de saturação em função de L encontramos $\alpha = 1.49 \pm 0.02$ e a partir desses valores $z = 4.08 \pm 0.09$. Na figura 3.5(b) mostramos o colapso das curvas mostradas em (a) usando $\alpha = 1.5$ e $z = 4$. Para sistemas de tamanhos até $L = 400$ nossos resultados obedecem à lei de escala de Family-Vicsek, equação (2.25). Estes valores são próximos daqueles encontrados para a equação de Mullins-Herring (MH - equação de difusão linear) em que $\beta = 3/8$, $\alpha = 3/2$ e $z = 4$ (tabela 2.1).

Na figura 3.6(a), mostramos a evolução da rugosidade para um sistema de tamanho $L = 10^3$ e dois valores da taxa de deposição, $f = 0.1$ e 1.0 . A partir dessas curvas encontramos que a rugosidade exibe uma mudança no expoentes de crescimento de um valor $\beta = 0.368 \pm 0.005$ para $\beta = 0.345 \pm 0.003$ e de $\beta = 0.375 \pm 0.008$ para $\beta = 0.347 \pm 0.013$, respectivamente. As estimativas dos erros foram feitas usando as flutuações das inclinações locais (3.6(b)). Esse comportamento sugere um *crossover* entre dois valores distintos do expoente de crescimento: $\beta \approx 3/8$ para $t \ll t_c$ e $\beta \approx 1/3$ para $t \gg t_c$, em que t_c é o tempo de *crossover* que separa esses

dois regimes. Finalmente, para reforçar esses resultados, mostramos na figura 3.6(c) a razão w/t^β usando dois valores distintos para $\beta = 0.37$ e 0.33 . Quando usamos $\beta = 0.37$ a curva obtida apresenta uma região constante para tempos curtos. Entretanto, quando $\beta = 0.34$ é usado, a curva fica constante apenas na região de tempos grandes. Esse comportamento foi observado em redes de tamanhos maiores ($L = 10^4$). Assim, esse comportamento indica

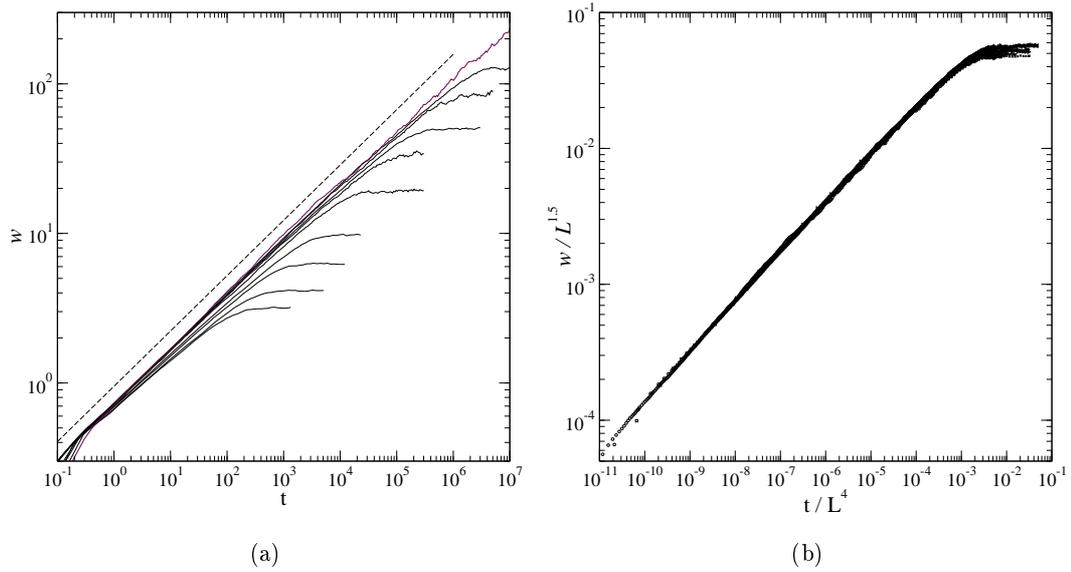


Figura 3.5: (a) Gráficos típicos da evolução da rugosidade usando $f = 0.1$ em sistemas de vários tamanhos ($L = 15, 20, 25, 35, 50, 75, 100, 150, 200$ e 400 , de cima para baixo). A linha reta acima das curvas é uma lei de potência com expoente $3/8$. (b) Colapso das curvas da figura (a).

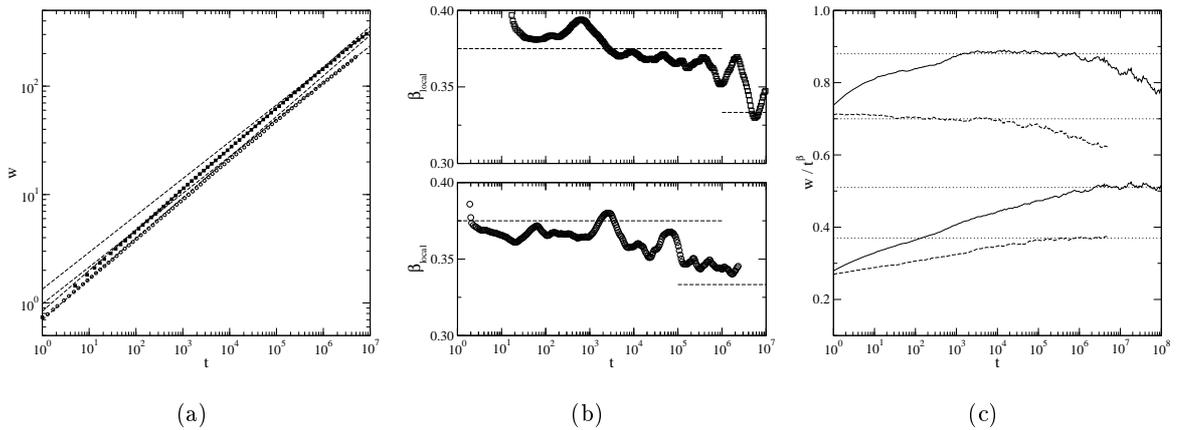


Figura 3.6: (a) Curvas da rugosidade para $f = 1.0$ (■) e $f = 0.1$ (○). (b) Inclinação local das curvas em (a) ($f = 1.0$ na curva de cima e $f = 0.1$ na curva de baixo). As retas tracejadas indicam os valores $3/8$ e $1/3$. (c) Curvas da rugosidade divididas por t^β ($f = 0.1$ - linhas tracejadas e $f = 1.0$ - cheias).

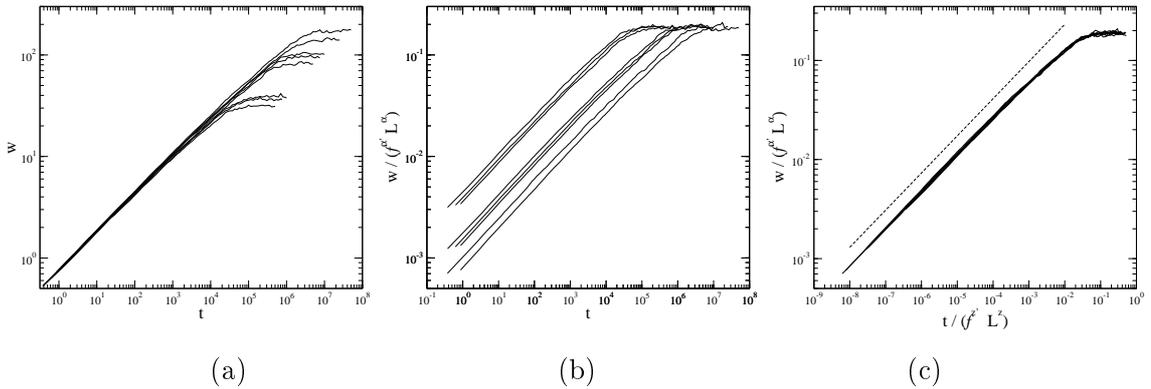


Figura 3.7: Nesta figura mostramos o processo de colapso das curva de rugosidade para sistemas de tamanhos $L = 50, 100$ e 200 usando diferentes taxas de deposição, $f = 0.5, 0.75$ e 1.0 . Usamos os mesmos expoentes de escala da figura 3.7(a) para o tamanho do sistema, e para a taxa de deposição usamos $\alpha' = 0.35$ e $z' = 0.9$. A curva tracejada em (c), é uma lei de potência com expoente $3/8$.

um *crossover* da classe de universalidade de MH ($\beta = 3/8$) para a de Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) que possui $\beta = 1/3$. É importante ressaltar que esse modelo considera apenas deposição e difusão de partículas (não existe evaporação e nem a formação de lacunas no interior da interface), de maneira que não existe nenhuma justificativa para o valor $\beta \approx 1/3$ ser associado à classe de universalidade KPZ.

Como pode ser visto na figura 3.7(a), quando consideramos um tamanho fixo do sistema encontramos que tanto o valor da rugosidade de saturação w_{sat} quanto o do tempo de saturação t_c crescem com f . Nessas simulações, usamos tamanhos suficientemente pequenos para garantir que a saturação ocorresse antes do aparecimento do *crossover* para a classe de universalidade assintótica. Além disso, os valores das taxas de deposição usados foram suficientemente grandes para evitar o crescimento MM em tempos iniciais. Esses crescimentos seguem leis de potência dadas por $w_{sat} \sim f^{\alpha'}$ e $t_{sat} \sim f^{z'}$, com os expoentes $\alpha' \approx 0.35$ e $z' \approx 0.9$. Podemos, então, colapsar curvas obtidas com diferentes valores de f e L . De fato, na figura 3.7(c) mostramos o colapso para diferentes tamanhos do sistema e taxas de deposição. Para obter esse colapso usamos o mesmo procedimento da figura 3.5(a) e em seguida dividimos w/L^α por $f^{\alpha'}$ e t/L^z por $f^{z'}$, com $\alpha' = 0.35$ e $z' = 0.90$. Uma vez que um bom colapso é obtido, a rugosidade como uma função de t, L e f segue a relação de escala

$$w(t, L, f) = L^\alpha f^{\alpha'} g\left(\frac{t}{L^z f^{z'}}\right) \quad (3.1)$$

em que $g(x)$, como na relação de escala de Family-Vicsek, cresce como uma lei de potência com expoente $\beta \approx 3/8$ para $x \ll 1$ e assume um valor constante para $x \gg 1$. Como esse *ansatz* é satisfeito, as relações de escala $\beta z = \alpha$ e $\beta z' = \alpha'$ são válidas. É importante ressaltar que essa relação de escala só é obedecida na região em que o termo $\nabla^4 h$ é dominante, ou

seja, para $f > 0.5$ (onde não aparece o crescimento em monocada) e para tamanhos pequenos (onde não aparece o *crossover*).

3.3.2 Simulações em $d = 2 + 1$ dimensões

Na figura 3.8 mostramos interfaces obtidas em um sistema de tamanho $L = 100$, ou seja, 10^4 sítios no substrato, e valores diferentes para a taxa de deposição. Note que, como no caso do substrato unidimensional, a largura da interface também cresce com a taxa de deposição.

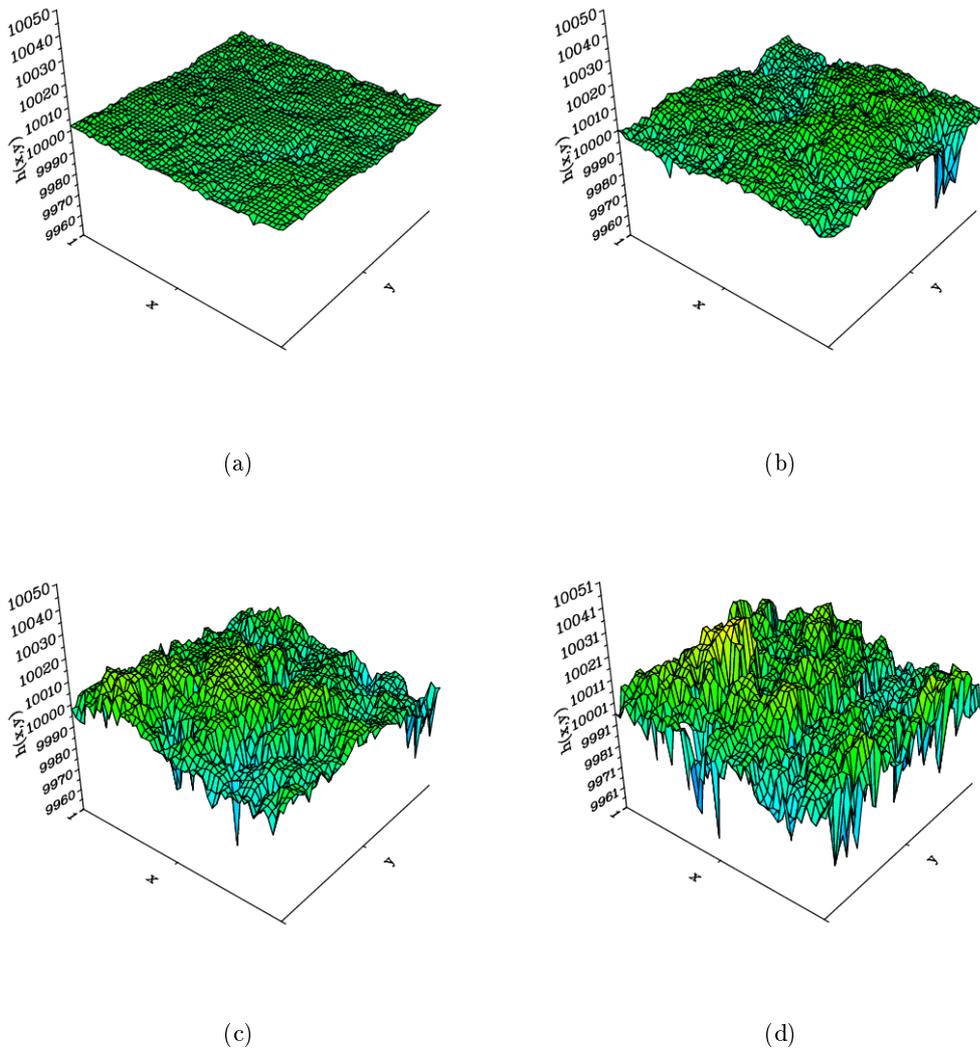


Figura 3.8: Mudanças na morfologia das interfaces devido à taxa de deposição f em $d = 2 + 1$ dimensões. O tamanho da rede usado foi $L = 100$ e $f = 10^{-3}$, 10^{-2} , 10^{-1} e 10^0 em (a), (b), (c) e (d), respectivamente. Note que para valores menores de f a interface é mais lisa e, à medida que f cresce, a rugosidade da interface também cresce.

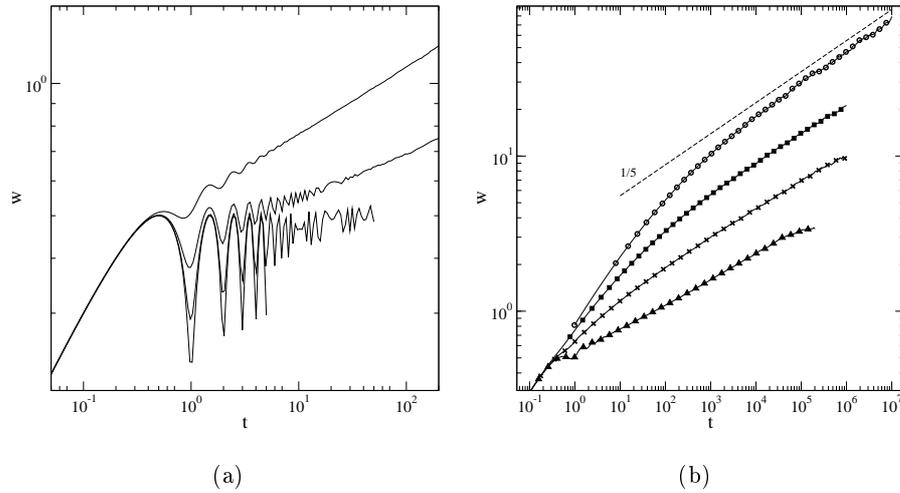


Figura 3.9: (a) Evolução temporal da rugosidade para sistemas de tamanho $L = 100$ e quatro valores da taxa de deposição $f = 10^k$, com $k = -3, -4, -5$ e -6 , respectivamente. A curva que possui o menor valor da rugosidade é aquela referente a menor taxa de deposição. (b) Evolução da rugosidade para um sistema de tamanho $L = 200$ e taxas de deposição $f = 10^k$, com $k = 0, -1, -2$ e -3 , de cima para baixo.

Na figura 3.9(a), mostramos a evolução temporal da rugosidade em um sistema de tamanho $L = 100$ com vários valores de f . Como pode ser visto, para valores da taxa de deposição f pequenos, podemos observar o regime inicial de crescimento em monocamada por monocamada com uma mudança para um regime posterior de crescimento em lei de potência como foi observado em $d = 1 + 1$ dimensões. Na figura 3.9(b), mostramos a evolução temporal da rugosidade em um sistema de tamanho $L = 200$ para diferentes valores de f . Os valores do expoente de crescimento encontrados são mostrados na tabela 3.2. Para o caso em que $f = 1.0$, o valor encontrado foi $\beta = 0.207 \pm 0.019$, o que sugere que esse modelo em $d = 2 + 1$ pertence à classe de universalidade VLDS, para a qual $\beta = 1/5$, $\alpha = 2/3$ e $z = 10/3$. Reduzindo o valor de f , observa-se um decréscimo no valor desse expoente conforme indicado na tabela 3.2. É importante mencionar que essa redução no valor do expoente de crescimento pode ser um efeito de tamanho finito conforme foi observado para a versão unidimensional.

f	1.0	0.1	0.01	0.001
β	0.207 ± 0.019	0.194 ± 0.007	0.184 ± 0.005	0.170 ± 0.002

Tabela 3.2: Expoentes de crescimento para diferentes valores de f em $2 + 1$ dimensões quando $L = 200$.

Na figura 3.10(a) mostramos a evolução temporal da rugosidade usando $f = 0.1$ para diversos tamanhos do sistema. Como pode ser observado da figura 3.10(b), existe um transiente inicial na evolução da rugosidade e o expoente de crescimento apresenta convergência lenta para $\beta \approx 1/5$ à medida que o tamanho do sistema é aumentado.

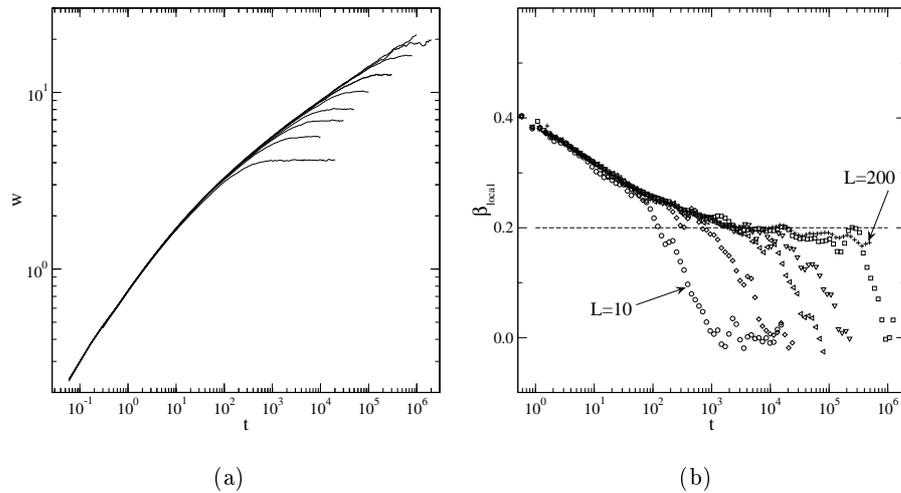


Figura 3.10: (a) Evolução temporal da rugosidade usando $f = 0.1$ em sistemas de tamanhos $L = 10, 20, 35, 50, 100$ e 200 . (b) Inclinação local das curvas em (a).

Na figura 3.11(a) mostramos a rugosidade de saturação em função de L para diferentes valores de f . A linha tracejada possui inclinação $2/3$. Note que em todos os casos a inclinação encontrada aproxima-se muito desse valor, esse resultado que reforça a afirmação de que nosso modelo pertence à classe de universalidade VLDS em $2 + 1$ dimensões. Na figura 3.11(b), mostramos um colapso das curvas da figura 3.10(a). Como pode ser observado o colapso ocorre apenas para sistemas de tamanhos grandes e em tempos longos. Isso deve-se à lenta convergência e ao transiente inicial observados na rugosidade.

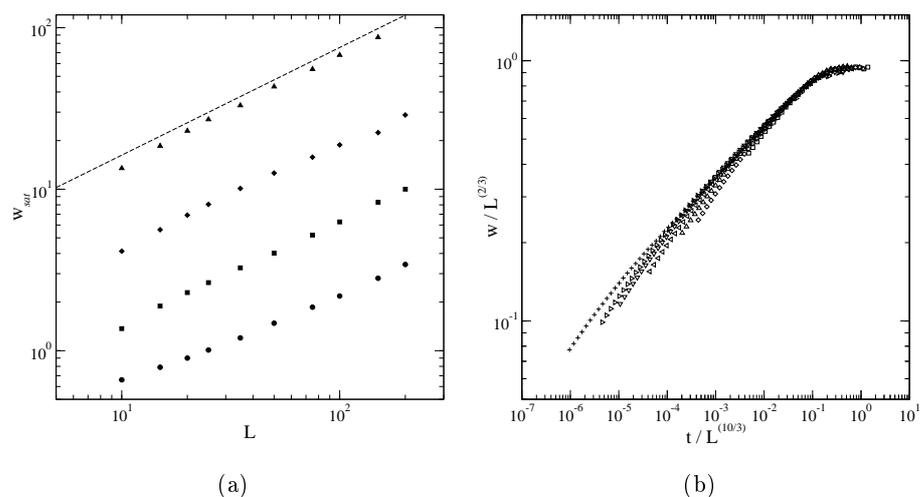


Figura 3.11: (a) Rugosidade de saturação como função de L para várias taxas de deposição (1.0, 0.1, 0.01 e 0.001, de cima para baixo). (b) Colapso das curvas mostradas na figura 3.10(a).

3.4 Formação de Morros

Em vários sistemas físicos é observado experimentalmente que uma partícula difundindo sobre um terraço encontra uma barreira de potencial quando se aproxima da borda (partícula 1 na figura 3.12). Essa barreira, denominada barreira de Schwoebel [9], dificulta o movimento de partículas para fora de terraços, gerando uma tendência de movimento para o interior dos terraços nas caminhadas da partículas. Instabilidades devido a essas caminhadas levam a interfaces com formações de morros (*mound formation*), normalmente separados por grandes degraus [20, 21, 22], conforme mostrado na figura 3.13(a). Os modelos que apresentam esse comportamento exibem uma mudança no expoente de crescimento de um valor inicial que depende dos detalhes do modelo, para um valor assintótico próximo de $\beta \approx 0.5$ (figura 3.13(b)), um valor muito próximo ao encontrado para a deposição aleatória. Apesar disso, os autores daqueles trabalhos conjecturam que esse valor assintótico do expoente de crescimento $\beta \approx 0.5$ não é devido ao mecanismo da deposição aleatória.

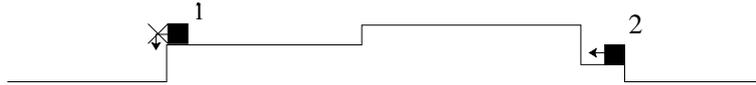


Figura 3.12: Ilustração de uma partícula livre sobre terraços. A partícula 1 aproxima-se da borda de um terraço onde encontra uma barreira de potencial.

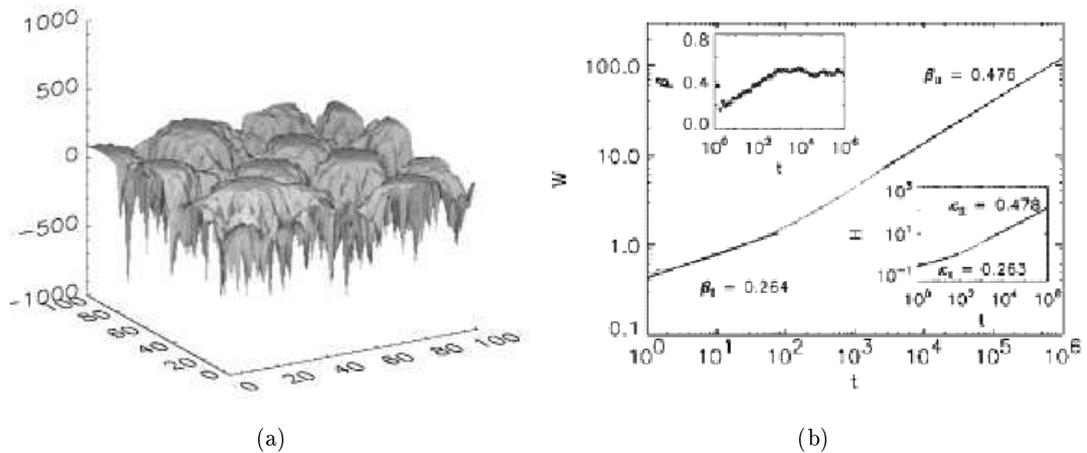


Figura 3.13: (a) Formação de morros em interfaces obtidas usando o modelo DT com tendência nas caminhadas. (b) Rugosidade para um sistema de tamanho $L = 100$ no modelo DT com tendência na difusão. Nesse modelo, a partícula na borda de um terraço tem probabilidade maior de difundir para o interior do terraço. Essa figura foi retirada da referência [20].

Nesta seção estudamos a formação de morros em uma versão modificada do modelo apresentado na seção 3.2 e no modelo DT com uma tendência [20] em $2 + 1$ dimensões. Nesta versão de nosso modelo consideramos que o caminhante executa passos ao acaso apenas em dois sentidos perpendiculares (por exemplo, para cima e para a direita). Como pode ser visto

na figura 3.14(a), esta versão apresenta as instabilidades que levam à formação de morros, e como pode ser visto na figura 3.14(b) há uma mudança na evolução da rugosidade, com expoente de crescimento assintótico $\beta \approx 0.5$.

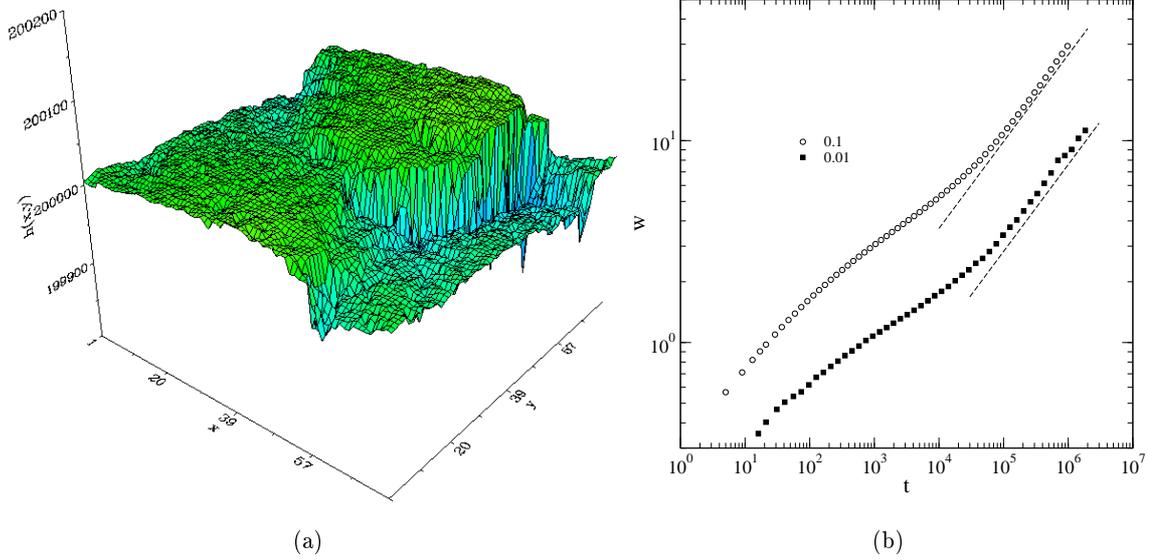


Figura 3.14: (a) Formação de morros em interfaces obtidas usando o modelo de difusão com caminhada direcionada. (b) Rugosidade para um sistema de tamanho $L = 100$. As taxas de difusão são indicadas na legenda e as retas tracejadas possuem inclinação igual a 0.45.

Para compreender essa mudança no expoente de crescimento, introduzimos um método para avaliar a largura da interface que é dividido em três etapas: inicialmente, medimos as rugosidades w_i dentro de caixas de tamanho ℓ varrendo toda a rede. Em seguida, os valores máximo e mínimo da rugosidade são determinados (w_{min} e w_{max} , respectivamente), e então, tomamos os valores médios $\bar{w}_<$ e $\bar{w}_>$ obtidos a partir das rugosidades com valores menores que $k \times w_{min}$ e maiores que $p \times w_{max}$, em que $k > 1$ e p é um número no intervalo $(0, 1)$. Os números k e p são usados para controlar os valores usados para determinar as médias de $\bar{w}_<$ e $\bar{w}_>$. Note que os valores menores da rugosidade fornecem uma medida da largura da interface dentro dos morros enquanto os valores maiores fornecem uma medida da altura dos morros. Na figura 3.15, mostramos os resultados obtidos usando duas taxas de deposição diferentes. Considerando valores da rugosidade abaixo de $3 \times w_{min}$, a mudança no expoente não é observada e quando consideramos os valores da rugosidade acima de $0.8 \times w_{max}$ a mudança está presente. Assim, as grandes flutuações nas interfaces, referentes às paredes dos morros, são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento, ou seja, as alturas dos morros são descorrelacionadas, o que justifica o aparecimento do expoente $\beta = 1/2$. Dentro dos morros a rugosidade exhibe o comportamento usual para sistemas finitos incluindo um crescimento inicial com lei de potência e saturação para tempos longos.

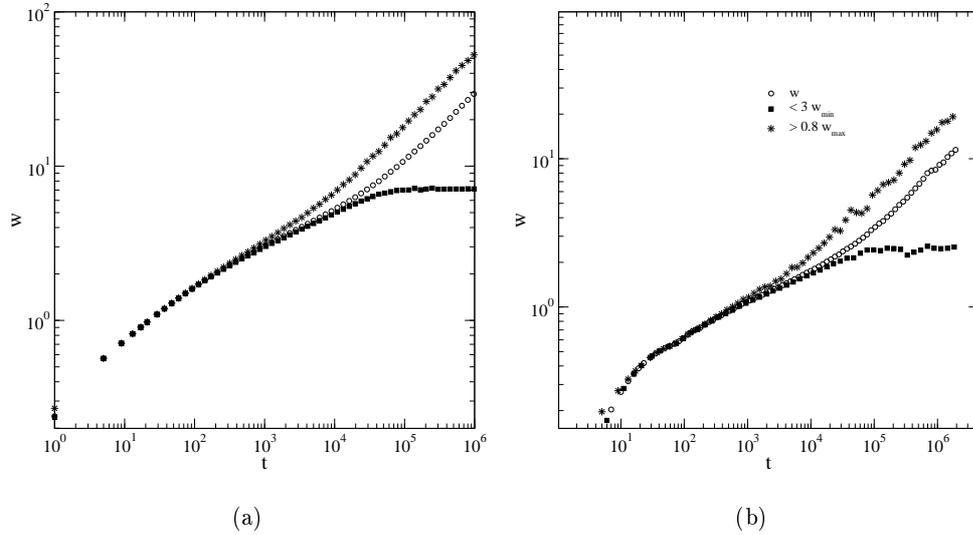
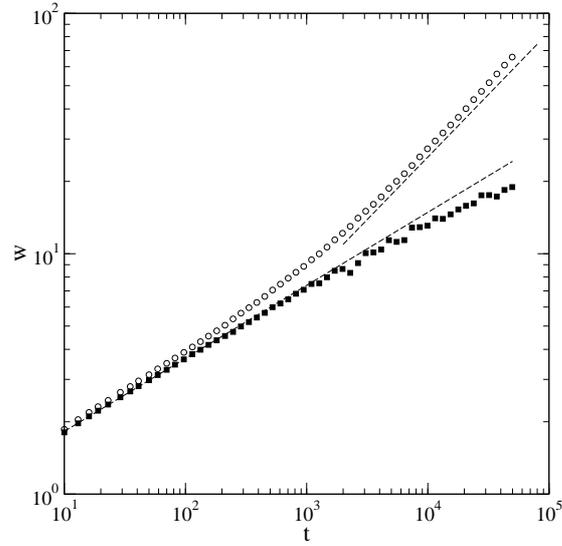


Figura 3.15: Mudança no expoente de crescimento para o modelo de difusão usando para as taxas de deposição (a) $f = 0.1$ e (b) $f = 0.01$. Conforme indicado na legenda, mostramos a rugosidade de toda a estrutura e os valores médios de $\bar{w}_<$ e $\bar{w}_>$. Foram usados sistemas de tamanho $L = 200$ e caixas de tamanhos $\ell = 20$ para determinar w_{min} e w_{max} .

Para verificar a validade desses resultados aplicamos o método ao modelo DT (seção 2.4.5) com a introdução de duas probabilidades para uma partícula na borda do terraço: a direção de movimento é determinada segundo a regra usual do modelo DT e a descida será implementada com probabilidade p_d e enquanto o movimento para o interior do terraço será implementado com probabilidade p_u , para incluir a tendência das partículas permanecerem sobre os terraços. Como já foi demonstrado, essa modificação no modelo DT leva ao aparecimento da formação de morros nas interfaces [20, 22]. Na figura 3.16 mostramos o comportamento da rugosidade obtida em um sistema de tamanho $L = 100$ com $p_d = 0.15$ e $p_u = 1$. Note que o mesmo cenário da figura 3.15 foi encontrado para esse modelo, confirmando que as grandes flutuações da altura nas bordas dos morros são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento. É importante mencionar, que para valores de $\ell > 10$ a curva referente a $\bar{w}_<$ apresenta a mudança no expoente para um valor próximo de $1/2$. Assim, para obter a figura 3.16 foi necessário usar $\ell = 10$, um valor menor que aquele utilizado para obter a figura 3.15, sugerindo que o tamanho dos morros no modelo DT deve ser menor que o do modelo com caminhadas restritas a duas direções perpendiculares.

3.5 Conclusões

Neste capítulo estudamos um modelo de crescimento de interfaces que possui dois ingredientes, a deposição e a difusão de partículas. Neste modelo as partículas depositadas



(a)

Figura 3.16: Mudança no expoente de crescimento para o modelo DT usando $p_d = 0.15$ e $p_u = 1$. As rugosidades $\bar{w}_<$ (quadrados) e $\bar{w}_>$ (círculos) foram obtidas usando sistemas de tamanhos $L = 200$ e $\ell = 10$ para os tamanhos das caixas. As retas possuem inclinações 0.50 e 0.29.

que possuem apenas uma ligação permanecem livres para difundir enquanto não encontrarem um sítio para formar pelo menos duas ligações. Em $d = 1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões, encontramos para f muito pequeno que o sistema exibe um crescimento em monocamada por monocamada que precede um crescimento em lei de potência. Em $d = 1 + 1$ encontramos valores muito próximos dos expoentes referentes à classe de universalidade MH. Simulações em larga escala revelaram que o modelo tem uma transição da classe de universalidade MH para a classe VLDS, na qual $\beta = 1/3$, após um tempo característico. Em $d = 2 + 1$ encontramos que o modelo pertence à classe de universalidade VLDS, também observada assintoticamente em $1 + 1$ dimensões. Ao contrário do caso unidimensional, não encontramos um *crossover* em $d = 2 + 1$ dimensões.

Usando o método das caixas para determinar a rugosidade, encontramos que em modelos com tendências na difusão das partículas, as grandes flutuações nas interfaces que caracterizam as paredes dos morros são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento. Assim, podemos concluir que as alturas dos morros são descorrelacionadas, o que justifica o aparecimento do expoente $\beta = 1/2$. Além disso, dentro dos morros não ocorre a mudança para um valor próximo a $1/2$ no expoente de crescimento a rugosidade exibe o comportamento usual de sistemas finitos.

Capítulo 4

Crossover no Modelo de Wolf-Villain

4.1 Introdução

A compreensão da dinâmica de crescimento de interfaces passou por um avanço considerável nas últimas décadas, principalmente devido ao uso de modelos discretos e de equações estocásticas [7, 9]. Nos modelos de crescimento, as partículas são depositadas em um substrato inicialmente liso, e eles são muitas vezes construídos usando redes. Os modelos de crescimento podem ser classificados em dois tipos principais dependendo das regras de evolução. No primeiro deles, uma partícula se fixa permanentemente ao sítio de deposição ou a um dos sítios de sua vizinhança no momento da deposição, exemplos incluem o modelo de Family [42], o de Wolf e Villain [16] e o de Das Sarma e Tamborenea [17]. No segundo tipo, a difusão das partículas é permitida mesmo depois de sua deposição, exemplos incluem o modelo de ativação térmica também estudado por Das Sarma e Tamborenea [17] e aquele apresentado no capítulo 3.

Conforme já foi mencionado anteriormente, quando existe uma competição entre mecanismos diferentes no crescimento de interfaces, a evolução temporal da rugosidade pode apresentar um *crossover* entre classes de universalidade distintas. Exemplos de modelos de crescimento que exibem tal *crossover* incluem os modelos de Wolf e Villain (WV) [16], Das Sarma e Tababorenea (DT) [17], Tales e Moreira [41], uma versão do modelo WV que inclui relaxação e ligação entre primeiro e segundo vizinhos [56, 60], entre outros. A determinação da classe de universalidade assintótica nesses modelos é uma tarefa árdua, pois são necessários simulações em larga escala e tempos extremamente grandes. Em particular, em modelos como os de WV e DT que envolvem difusão de partículas, um tempo longo de permanência em um regime inicial dominado pelo termo linear da equação MH é observado. Como consequência, os tempos envolvidos em simulações são extremamente longos e métodos para o estudo de tais *crossovers* têm sido desenvolvidos. Como exemplo podemos citar a aplicação de técnicas de redução de ruído [32] a modelos de crescimento de interface com mobilidade limitada [50]. Esse

método foi descrito em detalhes na seção 2.2.1. Nesse capítulo, apresentamos uma generalização do modelo WV introduzida para estudar tais *crossovers*. Nesta generalização associamos uma probabilidade a cada sítio de crescimento proporcional a uma potência do número de ligações que uma partícula possuiria se fosse depositada a ele. Esse trabalho foi motivado pelo modelo de agregação que usa uma regra de crescimento probabilística apresentado no capítulo 7.

4.2 O Modelo de Wolf-Villain

O modelo de Wolf-Villain [16] é baseado no crescimento SOS de interfaces e possui como principal objetivo estudar experimentos como epitaxia por feixe molecular (MBE). As regras de crescimento são construídas para incluir a difusão superficial, o principal mecanismo de suavização da interface em crescimento com MBE. As regras de crescimento são descritas a seguir e ilustradas na figura 4.1. A cada iteração, uma partícula é depositada em um sítio escolhido aleatoriamente. No momento da deposição, determina-se entre o sítio de deposição e seus vizinhos mais próximos qual possui maior número de ligações, no qual a partícula fixa-se permanentemente. Quando a partícula encontrar dois vizinhos ao de deposição com mesmo número de ligações e esse número for maior que o do sítio de deposição, um deles é escolhido com igual chance. Finalmente, se o número de coordenação dos sítios vizinhos é menor ou igual ao do sítio de deposição a partícula permanece nesse sítio.

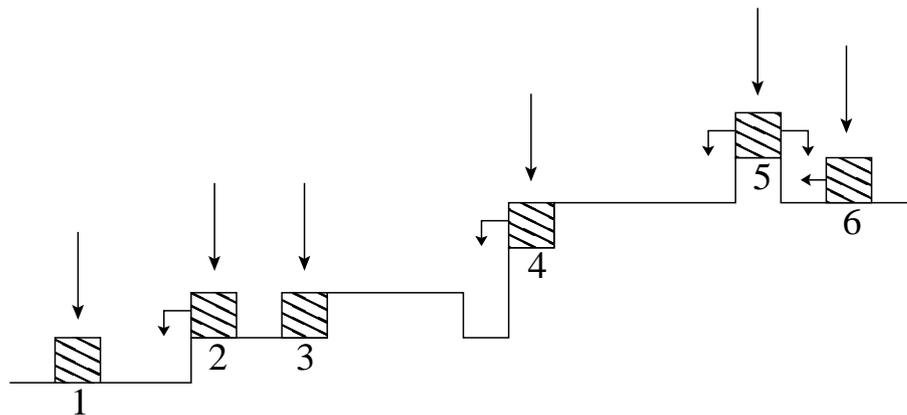


Figura 4.1: Ilustração do modelo de Wolf-Villain. Note que as partículas rotuladas por 1 e 3 não podem maximizar seu número de ligações nos sítios adjacentes ao de deposição. Como consequência, essas partículas ficam fixas ao sítio de deposição. As demais partículas se moverão para o sítio vizinho que maximizar seu número de ligações, conforme indicado pelas setas. Como a partícula 5 possui dois vizinhos com o mesmo número de coordenação, ela escolherá um deles ao acaso.

Em $1 + 1$ dimensões, Wolf e Villain [16] encontraram $\beta = 0.365 \pm 0.015$ e $\alpha = 1.4 \pm 0.1$ para os expoentes de crescimento e da rugosidade, respectivamente, e, conseqüentemente,

$z = 3.8 \pm 0.5$ para o expoente dinâmico. Esses valores estão próximos àqueles preditos pela equação de Mullins-Herring (MH) (tabela 2.1). Trabalhos posteriores [39, 40] mostraram a existência de um *crossover* da classe MH para a de Villain-Lai-Das Sarma (VLDS) ($\beta = 1/3$, $\alpha = 1$ e $z = 3$). Além disso, Ryu e Kim [56] encontraram a existência de um terceiro regime após o regime VLDS que pertence à classe de universalidade EW, ou seja, a classe de universalidade assintótica no modelo de WV é a de EW. Esse resultado concorda com o encontrado por Krug *et al.* [61] em um trabalho no qual a classe de universalidade foi estudada por meio da corrente de difusão superficial. Em particular, para o modelo de WV, eles encontraram uma transição da classe de universalidade de MH para a de EW. Trabalhos recentes usando diferentes aproximações (por exemplo, aplicação da técnica de redução de ruído [50], o estudo do efeito de tamanho finito [57], a aplicação de transformações de escala na equação estocástica referente ao modelo de Wolf-Villain [58]) confirmam que a classe de universalidade assintótica do modelo é a EW.

Através de simulações em $2 + 1$ dimensões, Kotrla *et al.* [59] encontraram $\beta = 0.206 \pm 0.02$ e $\alpha = 0.66 \pm 0.03$ (e $z = 3.2$) que estão muito próximos dos valores preditos pela equação VLDS (equação (2.64), com κ e λ_2 iguais a zero). Esta diferença entre a classe de universalidade do modelo em $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões foi confirmada em outros trabalhos [61, 62, 63, 64]. Em um trabalho posterior, Smilãuer e Kotrla encontraram o expoente $\beta = 0.22$ e, após um tempo característico, a rugosidade escala logicamente com o tempo ($\beta = 0$), *i.e.*, novamente uma transição para classe de universalidade EW observada em $1 + 1$ dimensões [49]. Entretanto, Das Sarma *et al.* [50], usando técnica de redução de ruído, encontraram $\beta \approx 1/3$ e $\alpha \approx 1$, um resultado muito diferente dos encontrados em outros trabalhos. Essa discordância de valores nos leva a questionar: qual é a classe de universalidade assintótica do modelo WV em $2 + 1$ dimensões? As classes de universalidade assintóticas em $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões são, de fato, diferentes?

4.3 Regra de Evolução Probabilística

No capítulo 7, estudaremos uma generalização do modelo DLA (seção 2.2.1) na rede que considera uma regra probabilística de agregação das partículas. Nessa regra, uma partícula é agregada com uma probabilidade proporcional a uma potência ν do número de sítios primeiros vizinhos ocupados. Quando considera-se ν acima de um valor crítico, essa regra leva a uma rotação na direção de anisotropia dos agregados devido ao favorecimento do crescimento de sítios com mais vizinhos. Com base nessa modificação do modelo DLA, implementamos uma regra de crescimento probabilística para o modelo de Wolf-Villain, que favorece aqueles sítios que possuem número de ligação maior. Note que essa regra de crescimento probabilístico introduz a recusa de partículas e conseqüentemente a classe de universalidade assintótica KPZ

é esperada. Entretanto, como mostraremos, essa regra permite estudar os regimes existentes no modelo WV.

Esse modelo é definido em uma rede d -dimensional de tamanho linear L . A cada sítio i associamos uma variável $n_i(t)$ que representa o número de ligações que uma partícula possuirá ao ser adicionada a esse sítio. A condição inicial é dada por $h_i(0) = 0$ e $n_i(0) = 1 \forall i$, i. e., a interface é lisa em $t = 0$. Nesse modelo, estamos interessados em estudar a dinâmica do modelo WV com a introdução de um parâmetro que controla a probabilidade de crescimento dos sítios selecionados para receber uma partícula. Dessa maneira, no momento da deposição as partículas procuram maximizar seu número de ligações com o substrato e as regras de evolução são definidas conforme descrito abaixo.

- i.* As partículas são depositadas ao acaso e verificam qual entre os $2d + 1$ sítios (o de deposição e seus $2d$ primeiros vizinhos) possui maior número de ligações. Esse é escolhido como candidato a sítio de crescimento.
- ii.* O sítio de crescimento i recebe uma partícula com uma probabilidade proporcional a uma potência do número de ligações $n_i(t)$, dada por

$$p_i = \left(\frac{n_i(t)}{n_{max}} \right)^\nu \quad (4.1)$$

em que $n_{max} = 2d + 1$. O expoente ν é o parâmetro do modelo: para $\nu = 0$, o modelo WV original é recuperado e, à medida que ν cresce, os sítios com maior número de coordenação são privilegiados.

- iii.* Após a deposição, os números de coordenação do sítio de crescimento e de seus vizinhos devem ser atualizados.

4.4 Resultados

Simulações em $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões com condições de contorno periódicas foram realizadas. Em $1 + 1$ dimensões, utilizamos redes com o tamanho variando de $L = 10$ a 10^5 e uma amostragem com 10^2 a 10^4 amostras, dependendo do tamanho do sistema. Variamos o parâmetro ν de 0 a 8 para verificar sua influência na dinâmica da interface. Em $2 + 1$ dimensões, usamos redes de tamanhos variando de $L = 10$ a 500, uma amostragem com 50 a 10^4 amostras e o parâmetro ν entre 0 e 2. Um passo de tempo corresponde a cada L tentativas de crescimento.

4.4.1 Resultados em $1 + 1$ Dimensões

Na figura 4.2 mostramos a evolução da interface para alguns valores do parâmetro ν . Como pode ser visto, a interface torna-se mais lisa à medida que o valor de ν é aumentado.

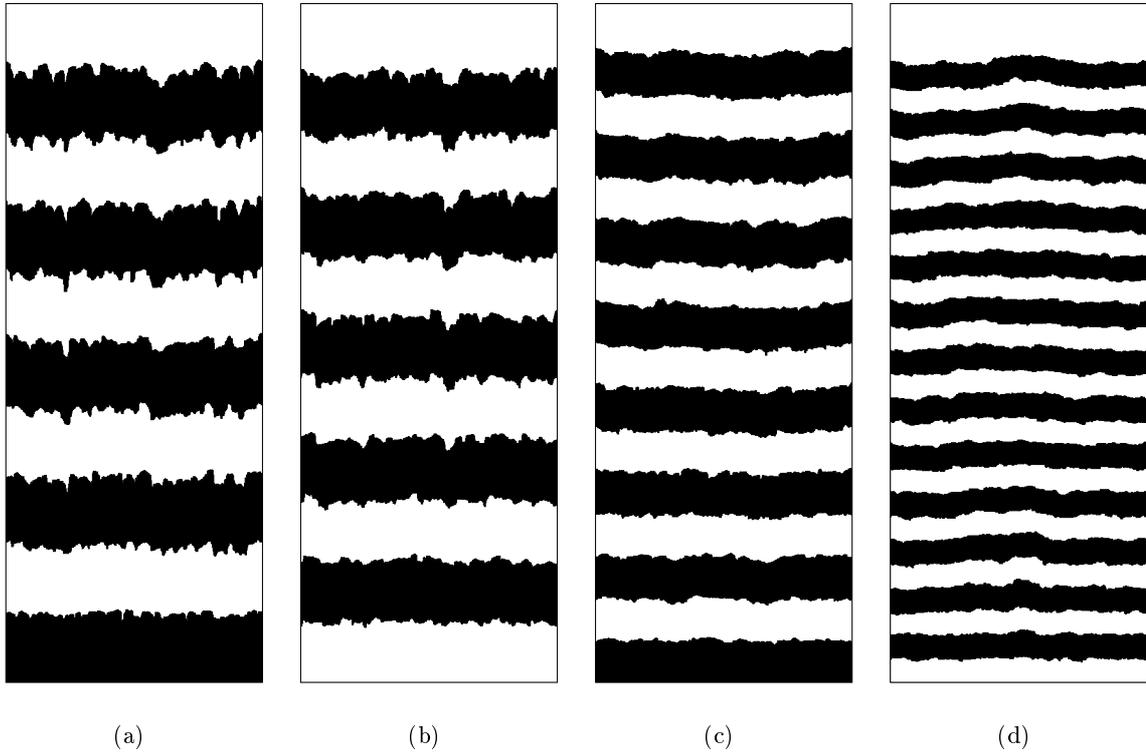


Figura 4.2: Perfis obtidos no modelo WV modificado em uma rede de tamanho $L = 400$ e (a) $\nu = 0$, (b) 0.25, (c) 1 e (d) 2. A cada 100 passos de tempo as cores das partículas depositadas foram alteradas.

Valores de ν grandes favorecem o crescimento de sítios com mais ligações, o que justifica o fato da interface ser mais lisa para $\nu = 2.0$ (figura 4.2(d)). Além disso, o aparecimento de sítios com número de ligações igual a 3 (que possui sempre probabilidade de crescimento igual a 1) é sempre menos provável. Sítios com menor número de coordenação, como aqueles que possuem $n = 1$ e 2, são mais prováveis mas a probabilidade de crescimento associada a eles decresce à medida que ν é aumentado. Como uma consequência a velocidade de crescimento fica menor à medida que ν aumenta. Note que, na figura 4.2, o número de vezes que a cor das partículas é trocada cresce com ν .

Na figura 4.3 mostramos interfaces obtidas para vários valores de ν depois de 10^5 passos de tempo. Em particular, em (a) e (b) mostramos os casos para $\nu = 0$ (onde o modelo de WV é recuperado) e $\nu = 0.10$. As instabilidades geradas pela difusão levam a perfis com platôs separados por grandes degraus, uma assinatura de modelos de crescimento de interfaces com difusão de partículas [9, 16]. Diferentemente, as interfaces obtidas para valores de ν maiores, mesmo para tempos longos ($t = 10^5$) e sistemas bem maiores ($L = 10^4$), permanecem lisas.

Como pode ser observado na figura 4.4, o valor da rugosidade para um tempo fixo decresce quando o valor do parâmetro ν é aumentado. Para obter essas curvas usamos $L = 10^3$.

Na figura 4.5, mostramos a evolução da rugosidade de interfaces obtidas usando $\nu = 0.0$,

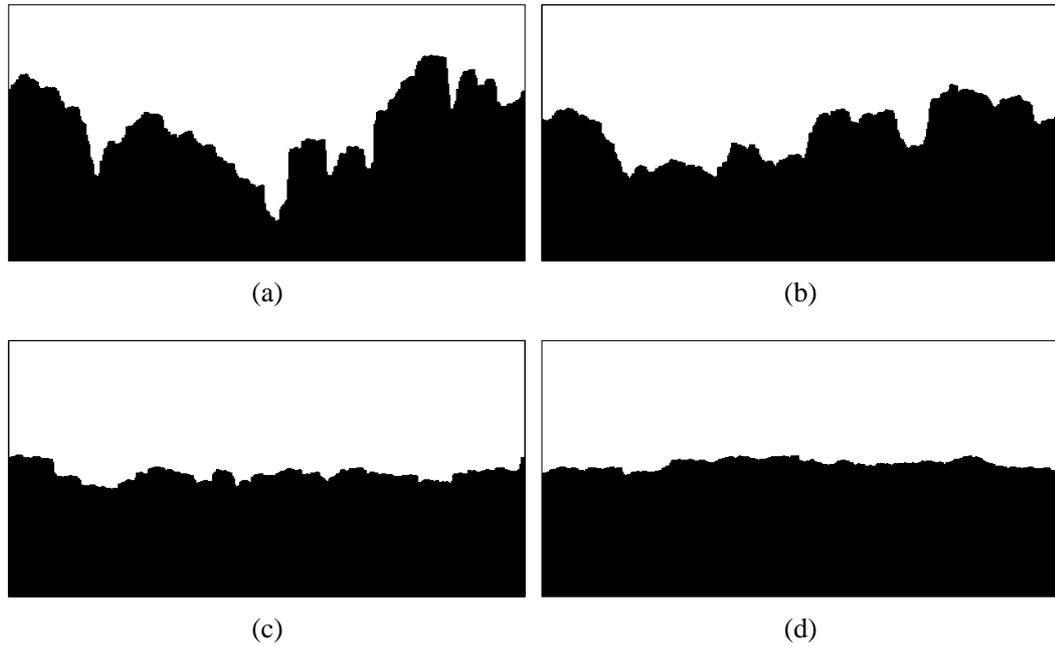


Figura 4.3: Perfis obtidos no modelo WV modificado em uma rede de tamanho $L = 400$. O tempo de evolução corresponde a 10^5 passos. Usamos $\nu = 0.0$ em (a), $\nu = 0.10$ em (b), $\nu = 0.50$ em (c) e $\nu = 2.0$ em (d).

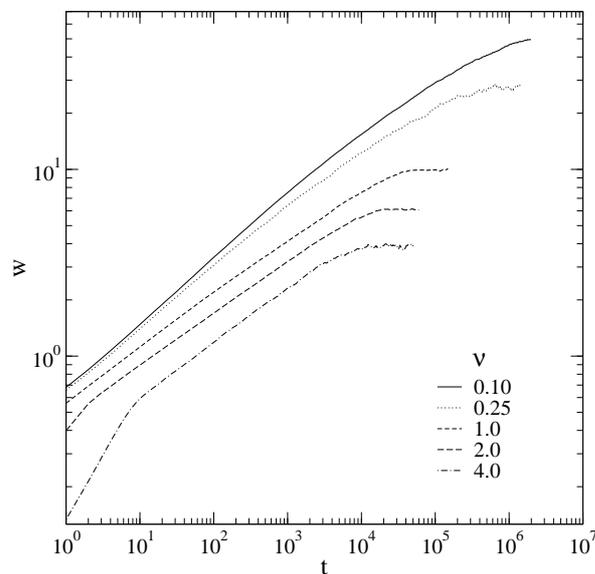


Figura 4.4: Evolução temporal da rugosidade obtida com valores diferentes de ν em um sistema de tamanho linear $L = 10^3$. Os valores de ν estão indicados na legenda.

0.25, 2.0 e 4.0 para vários valores de L . No caso de $\nu = 0.0$ (figura 4.5(a)) mostramos uma linha tracejada referente a uma lei de potência com expoente $3/8$. Esse resultado indica uma concordância com os resultados obtidos para o modelo WV original. Quando usamos $\nu = 0.25$

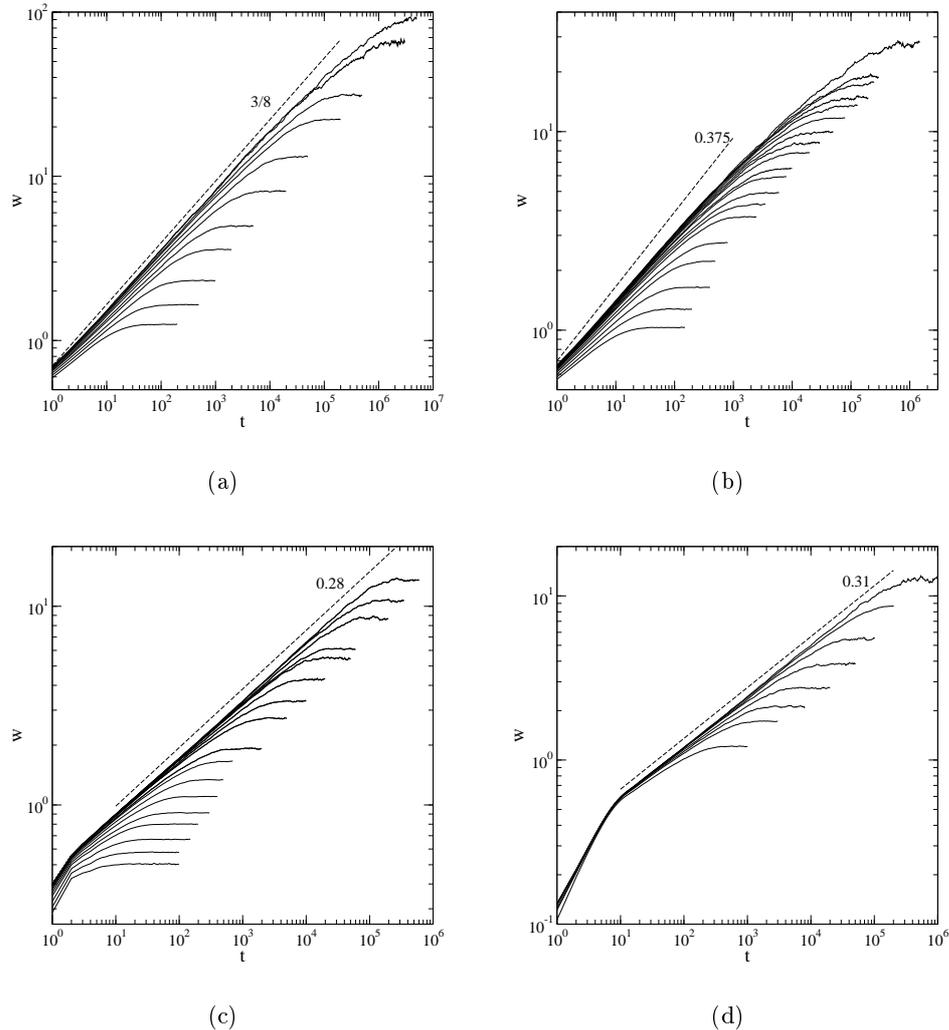


Figura 4.5: Efeito de ν sobre a rugosidade do modelo WV generalizado em 1 + 1 dimensões. As simulações foram realizadas em sistemas de tamanho variando de $L = 10$ a 5×10^3 . Usamos valores diferentes de ν ((a) $\nu = 0$, (b) 0.25, (c) 2 e (d) 4.0). As linhas pontilhadas são leis de potências (as inclinações estão indicadas nas figuras) usadas para indicar a inclinação das curvas da rugosidade.

(figura 4.5(b)), o expoente de crescimento $\beta \approx 3/8$ é encontrado apenas para tempos curtos e um desvio para tempos longos é observado. No caso de $\nu = 2.0$ e 4.0 (figuras 4.5(c) e (d)), encontramos ao longo de toda a simulação $\beta \approx 0.28$ e $\beta \approx 0.31$, respectivamente. Na figura 4.6 apresentamos a rugosidade de saturação em função de L para diferentes valores de ν . Para valores de ν e L pequenos, encontramos o expoente da rugosidade $\alpha = 3/2$. Mesmo para $\nu = 0.0$ podemos observar um desvio para sistemas de tamanhos acima de $L = 100$, note que esse desvio já foi observado anteriormente [46]. Para os valores $\nu = 0.1$ e 0.25 , podemos observar uma mudança no expoente α de um valor próximo a $3/2$ para 0.5 . E para $\nu > 1.0$ o valor de encontrado foi sempre $\alpha \approx 0.5$.

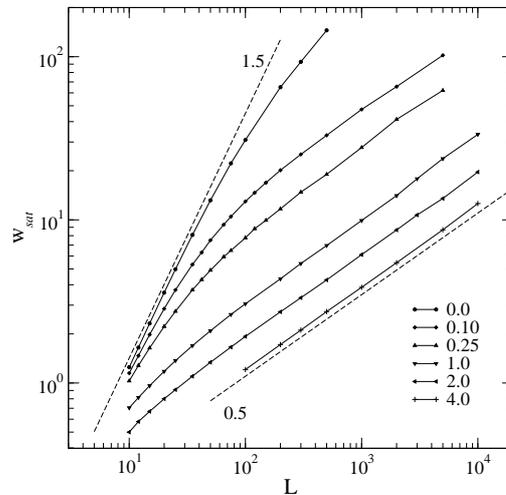


Figura 4.6: Rugosidade de saturação em função do tamanho do sistema obtida a partir das curvas da evolução temporal da rugosidade mostradas na figura 4.5.

A figura 4.5 não deixa clara a dependência de β com o parâmetro ν . Assim, simulações mais cuidadosas, usando sistemas de tamanho $L = 10^5$, foram realizadas. Na figura 4.7 mostramos a evolução temporal da rugosidade nessas simulações utilizando vários valores de ν . Para valores de ν próximos de zero encontramos $\beta \approx 3/8$ em concordância com os

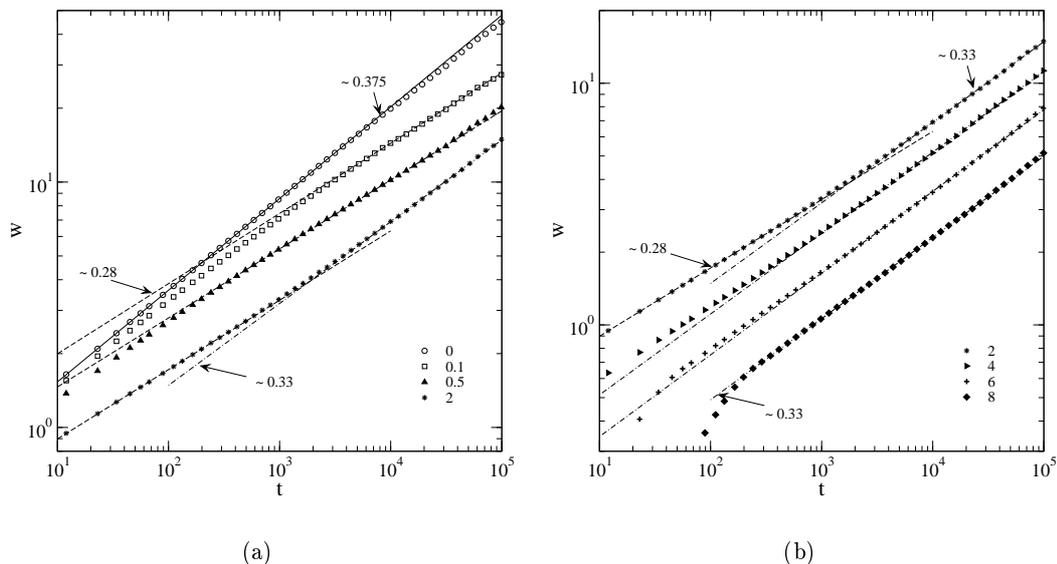


Figura 4.7: Evolução temporal da rugosidade no modelo WV generalizado usando vários valores de ν (indicados nas legendas) em um sistema de tamanho de $L = 10^5$. Em (a) mostramos as curvas obtidas para valores de $\nu \leq 2$ e em (b) aquelas obtidas para $\nu \geq 2$. Conforme indica a linha cheia em (a) possui inclinação 0.375, as linhas tracejadas em (a) e (b) possuem inclinação 0.28 e as tracejadas-pontilhadas em (b) possuem inclinação 0.33.

resultados da figura 4.5(a) e com aqueles observados para o modelo WV original. Quando ν é aumentado um *crossover* de $\beta \approx 3/8$ para $\beta \approx 0.28$ é observado enquanto para $\nu = 2.0$ (figura 4.7(b)), encontramos um *crossover* de $\beta \approx 0.28$ para $\beta \approx 0.33$. Note que, para $\nu = 4$ e 6 encontramos que os expoentes de crescimento no regime inicial parecem depender de ν . Entretanto, acreditamos que essa variação no expoente deve-se ao fato que o tempo de *crossover* decresce com o parâmetro ν e, além disso, que a mudança no expoente de crescimento não é abrupta. Assim, o expoente de crescimento é medido muito próximo do tempo de *crossover* explicando dessa forma essa variação [65]. E finalmente, para $\nu > 6$ encontramos $\beta \approx 0.33$ ao longo de toda a simulação. Na tabela 4.1, mostramos um resumo dos expoentes de crescimento obtidos para as simulações da figura 4.5.

ν	β
0	0.374 ± 0.005
0.1	0.285 ± 0.030
0.5	0.281 ± 0.008
2	$0.282 \pm 0.004 \rightarrow 0.329 \pm 0.010$
4	$0.302 \pm 0.004 \rightarrow 0.334 \pm 0.015$
6	$0.319 \pm 0.003 \rightarrow 0.334 \pm 0.016$
8	0.335 ± 0.009

Tabela 4.1: Expoentes de crescimento para diferentes valores do parâmetro ν em 1 + 1 dimensões para sistemas de tamanho $L = 10^5$. Esses expoentes foram determinados usando uma média determinada a partir da inclinação local.

A partir dos resultados das figuras 4.6 e 4.7 observamos que, para ν próximo de zero, os expoentes estão muito próximos aos obtidos para a equação de Mullins-Herring ($\beta = 3/8$ e $\alpha = 3/2$). Já os valores $\beta \approx 0.28$ e $\alpha \approx 0.5$ encontrados para valores intermediários de ν estão próximos aos da classe de universalidade de Edwards-Wilkinson [18] onde $\beta = 1/4$ e $\alpha = 1/2$. O *crossover* encontrado de $\beta \approx 3/8$ para $\beta \approx 1/4$, como mencionado anteriormente, já foi encontrado em outros trabalhos [59, 62, 63, 64]. Finalmente, os expoentes $\beta \approx 0.33$ e $\alpha \approx 0.5$ estão muito próximos àqueles encontrados para a classe de universalidade Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) onde $\beta = 1/3$ e $\alpha = 1/2$. A regra estocástica utilizada para aceitar a adição de uma nova partícula ao sítio de crescimento introduz uma recusa de partículas que, acreditamos ser responsável pelo aparecimento da classe de universalidade KPZ.

4.4.2 Resultados em 2 + 1 Dimensões

Na figura 4.8 mostramos interfaces obtidas em simulações sobre substratos bidimensionais. Nessas simulações usamos redes de tamanhos lineares $L = 100$ e vários valores do parâmetro ν . Como nas simulações em 1+1 dimensões, à medida que o valor de ν é aumentado

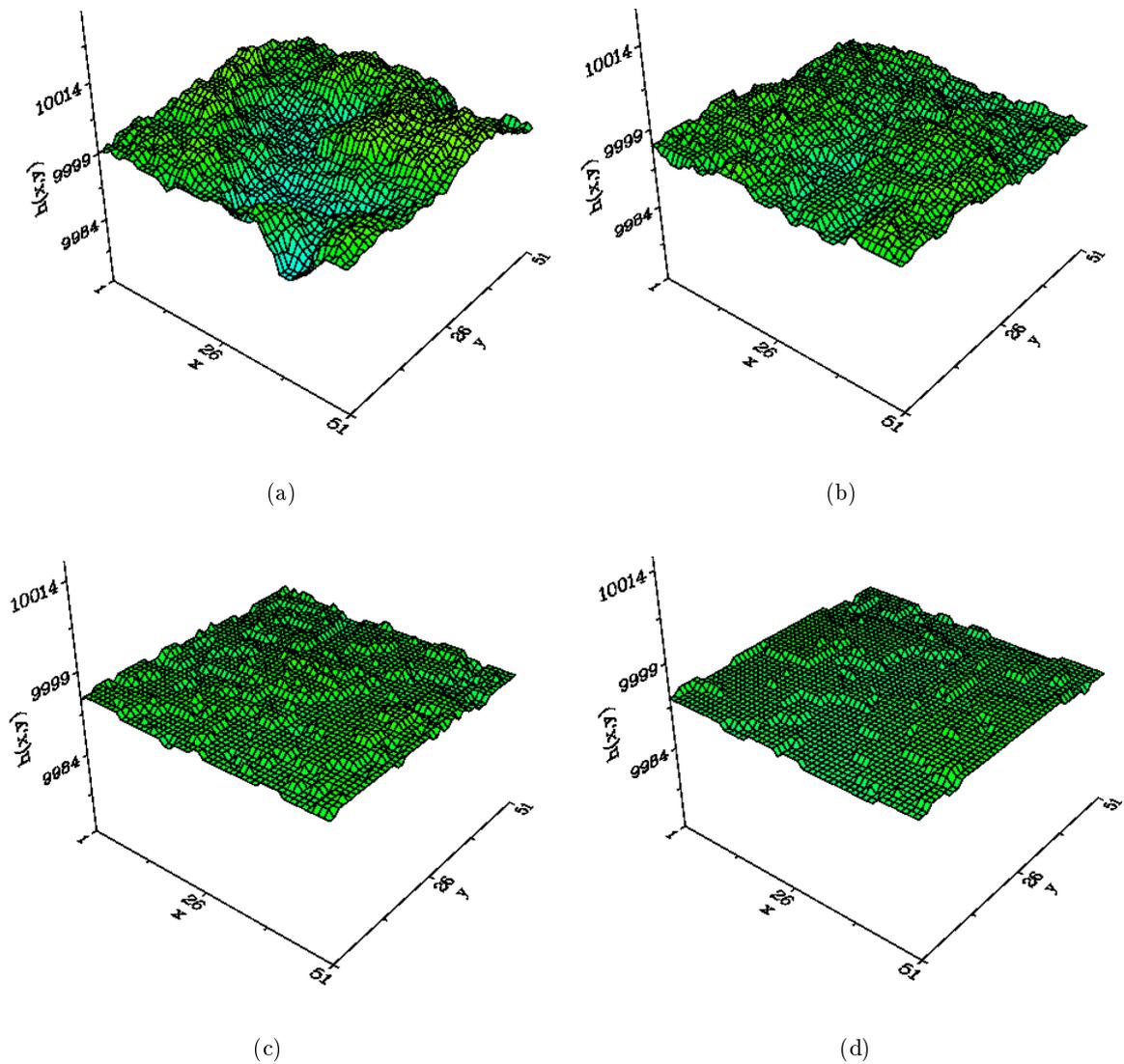


Figura 4.8: Interfaces obtidas no modelo WV generalizado. As simulações foram realizadas em sistemas de tamanho linear $L = 50$ e foram paradas quando a altura média da interface alcançou $\bar{h} = 10^4$. Os valores (a) $\nu = 0$, (b) 0.5, (c) 2 e (d) 4 foram usados.

a interface fica menos rugosa. Um argumento igual ao proposto em 1 + 1 dimensões pode ser usado para explicar esse resultado. Entretanto, é importante notar que, nesse caso, o efeito do parâmetro ν é mais forte, ou seja, interfaces lisas são obtidas para valores ν pequenos. Isso pode ser compreendido facilmente, no caso bidimensional o número de ligações máximo é $n_{max} = 5$, quase duas vezes maior que no caso unidimensional, o que leva a probabilidade a zero mais rapidamente e conseqüentemente a uma convergência mais rápida.

Como pode ser visto na figura 4.9, à medida que o valor de ν é aumentado o valor da rugosidade decresce para um tempo fixo, como observado em 1 + 1 dimensões. Note que, quando usamos $\nu = 2.0$ (primeira curva de baixo para cima), a evolução da rugosidade exhibe

um regime oscilatório para tempos iniciais. Esse regime caracteriza um crescimento inicial da interface quase que em monocamada por monocamada.

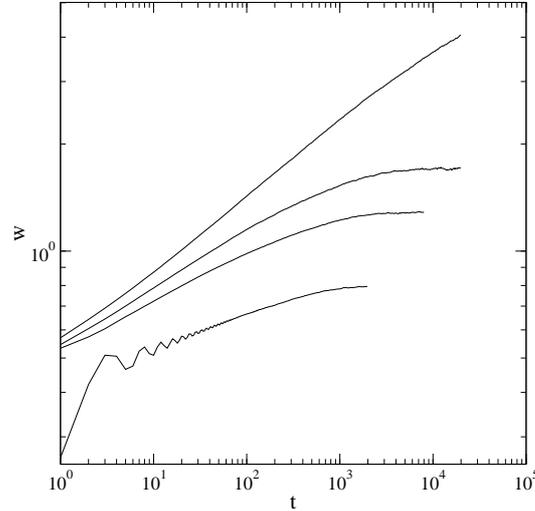


Figura 4.9: Evolução temporal da rugosidade no modelo WV generalizado em $2 + 1$ dimensões. As simulações foram realizadas em sistemas de tamanho linear $L = 100$. Usamos vários valores do parâmetro ν (0.0, 0.25, 0.5 e 2.0, de cima para baixo).

Na figura 4.10, mostramos a evolução temporal da rugosidade em sistemas de tamanhos variados para dois valores do parâmetro ν . Note que tanto a rugosidade de saturação quanto o tempo de saturação crescem com L e que essa dependência pode ser determinada através da construção ilustrada na seção 2.3.1 (página 21). Como pode ser observado da figura 4.10(b), para tempos iniciais a rugosidade exibe um regime oscilatório, que caracteriza um crescimento em monocamada por monocamada, uma consequência direta do fato que sítios para os quais uma partícula possui número de ligações $n = 1$ possuem uma baixa probabilidade de aceitação do crescimento.

Na figura 4.11 mostramos a rugosidade de saturação em função do tamanho do sistema. Na figura 4.11(a), onde usamos um gráfico log-log, podemos ver que a rugosidade de saturação cresce com o tamanho do sistema L de acordo com uma lei de potência quando ν e L são pequenos. O expoente da rugosidade obtido usando essa região foi $\alpha \approx 0.78$ (conforme indicado na figura). Por outro lado, na figura 4.11(b), na qual apresentamos a rugosidade de saturação em um gráfico semi-logarítmico, podemos observar que a rugosidade cresce logaritmicamente com L para $\nu \geq 0.25$. Além disso, para $\nu = 2.0$ e sistemas de tamanhos grandes, existe um desvio do comportamento logarítmico para L grande. Esse é o caso no qual a rugosidade possui um regime de crescimento oscilatório em tempos iniciais (veja, por exemplo, a figura 4.10(b)).

Finalmente, na figura 4.12 apresentamos simulações em sistemas de tamanho linear $L = 500$ para vários valores de ν . Note que em (a), onde usamos um gráfico log-log, a

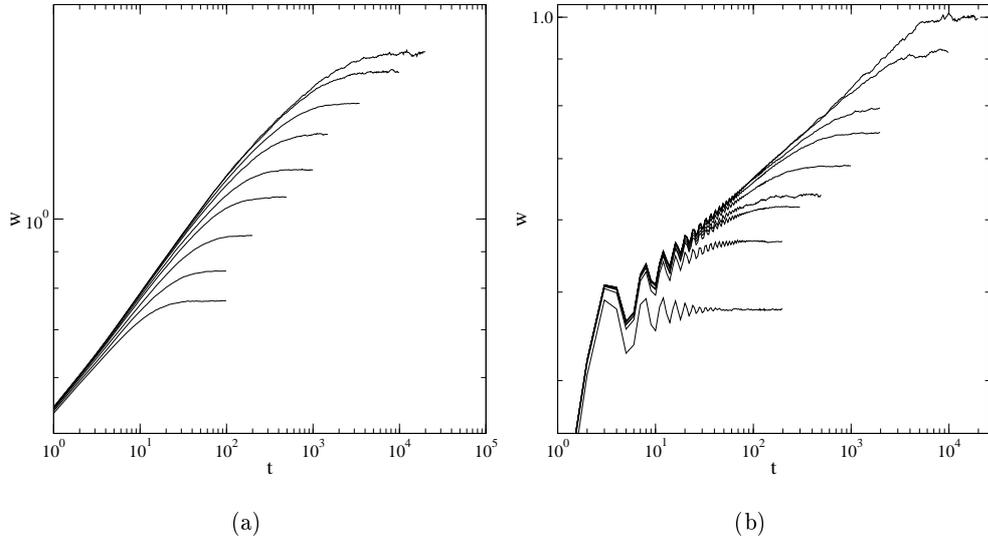


Figura 4.10: Evolução temporal da rugosidade no modelo WV generalizado. As simulações foram realizadas em sistemas de tamanho linear variando de $L = 10$ a 100 para (a) $\nu = 0.25$, e $L = 10$ a 300 com (b) $\nu = 2.0$. Em (b) a rugosidade possui um regime oscilatório, que caracteriza um crescimento em monocamada por monocamada, uma consequência direta do fato que sítios nos quais partículas com número de ligação $n = 1$ possuem uma baixa probabilidade de implementação do crescimento.

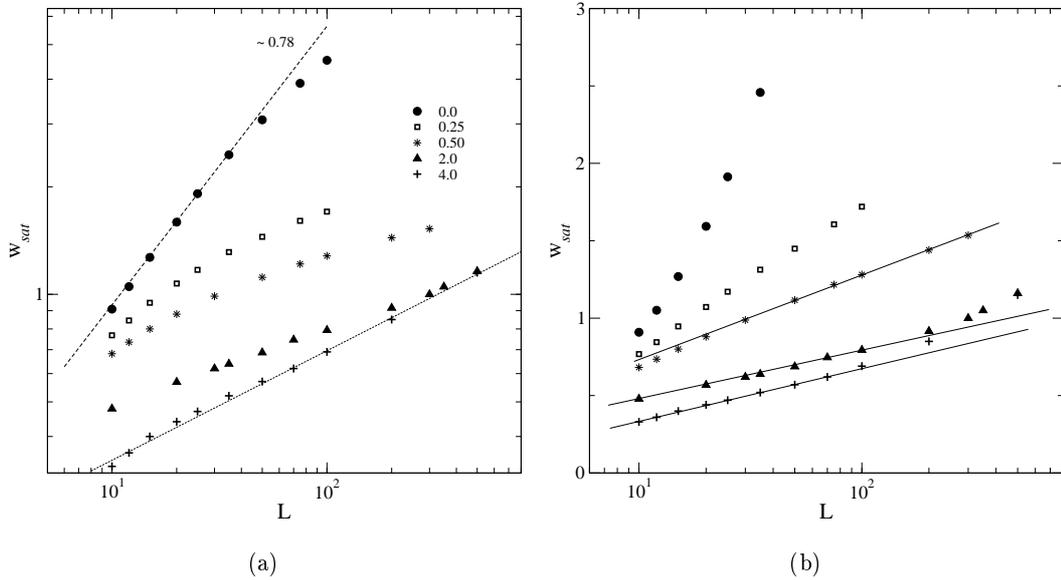


Figura 4.11: Rugosidade de saturação em função do tamanho do sistema obtida a partir das curvas da evolução temporal da rugosidade para valores diferentes de ν . Os gráficos em (a) e (b) estão apenas linearizados de maneiras diferentes (em (a) usamos um gráfico log – log e em (b) semi-logarítmico).

rugosidade cresce nos tempos iniciais segundo uma lei de potência quando usamos valores pequenos do parâmetro ν (valores próximos a zero) e após um tempo de *crossover* existe um

desvio desse comportamento. À medida que ν é aumentado o tempo de *crossover* decresce. Em (b) mostramos um gráfico semi-logarítmico dos mesmos resultados apresentados em (a). Note que a região em cada curva que se desvia do comportamento em lei de potência em (a) aparece linear em (b). Isso indica um crescimento logarítmico da rugosidade no tempo esperado para a classe de universalidade EW em $2 + 1$ dimensões.

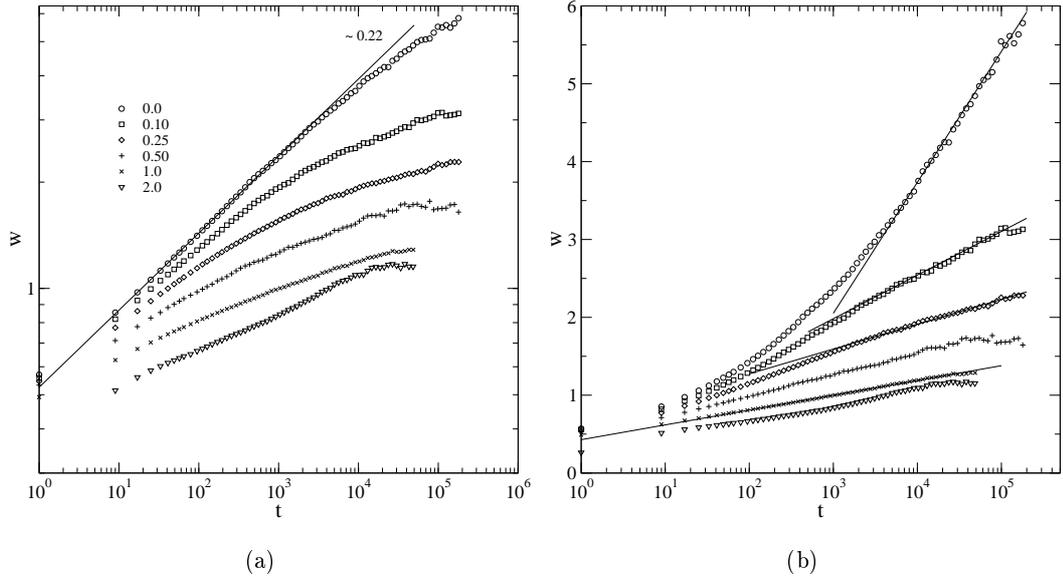


Figura 4.12: Evolução temporal da rugosidade obtida para vários valores de ν (0.0, 0.1, 0.5, 1.0 e 2.0) usando sistemas de tamanho linear $L = 500$. O mesmo procedimento de linearização da figura 4.11 foi adotado nessa figura.

Usando os resultados apresentados nas figuras 4.11 e 4.12, podemos concluir que o modelo generalizado apresenta um comportamento pertencente à classe de universalidade de VLDS para valores de ν baixos em tempos curtos ($\beta \approx 0.22$ e $\alpha \approx 0.78$). Para valores de ν baixos e tempos longos e para valores intermediários de ν ele apresenta um comportamento pertencente à classe de EW, onde tanto a rugosidade quanto a rugosidade de saturação escalam logaritmicamente com o tempo e o tamanho do sistema, respectivamente. No caso da curva para $\nu = 2$, um pequeno desvio do regime de crescimento logarítmico pode ser observado para tempos longos. Esse desvio indica que pode haver outra classe de universalidade dominante assintoticamente. Uma vez que a regra probabilística introduz uma recusa de partículas essa outra classe pode ser a de KPZ conforme já observado nas simulações em $1 + 1$ dimensões.

4.5 Conclusões

Neste capítulo estudamos uma generalização do modelo de Wolf-Villain (WV). Neste modelo, um sítio escolhido de acordo com as regras de evolução do modelo WV recebe uma partícula com probabilidade proporcional a potência ν do número de ligações. Simulações

em $1 + 1$ dimensões com valores do parâmetro ν próximos de zero, as interfaces apresentam uma formação de platôs separados por degraus pronunciados – uma assinatura de modelos de crescimento de interfaces com difusão de partículas. Interfaces mais lisas (sem grandes flutuações) são obtidas para valores maiores de ν , como uma consequência do fato que as probabilidades de crescimento de sítios com número de ligações maior serem privilegiados. Em $1 + 1$ dimensões encontramos um regime regido pela classe de universalidade de Mullins-Hering (MH) com um *crossover* para a de Edwards-Wilkinson (EW) para valores pequenos de ν ($\lesssim 0.5$). Para valores altos de ν a classe de universalidade assintótica é a de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ), uma consequência da recusa de partículas introduzida pela regra estocástica. Em $2 + 1$ dimensões, o parâmetro ν possui um efeito de suavização da interface semelhante ao observado em $1 + 1$ dimensões. Entretanto, para valores de ν próximos a zero, encontramos um regime inicial pertencente à classe de universalidade de Villain-Lai-Das Sarma com um *crossover* para a classe de universalidade de EW. Para $\nu < 2$ encontramos um regime pertencente a classe de universalidade EW com um pequeno desvio para sistemas grandes. Esse desvio indica que pode haver outra classe de universalidade dominante. Uma vez que a regra probabilística introduz uma recusa de partículas essa outra classe deve ser a de KPZ como em $1 + 1$ dimensões.

Capítulo 5

Teoria de Escala em Sistemas com Simetria Radial

5.1 Introdução

Muitos fenômenos naturais exibem crescimento com simetria radial. Como exemplo, podemos citar o crescimento de vários tipos de tumores [66, 67, 68] e experimentos com meios granulares em uma célula de Hele-Shaw [69, 70]. Um modelo proposto para estudar a dinâmica de crescimento de células é aquele proposto por Eden [71]. Ele é baseado em uma regra estocástica na qual a cada passo de tempo apenas os sítios vazios na interface do agregado podem crescer. A motivação inicial para esse modelo foi o crescimento de tumores. A justificativa, embora extremamente simplificada, representa a divisão celular concentrada nas camadas mais externas dos tumores [72]. Três versões do modelo de Eden foram muito estudadas [7, 8]. Na versão denominada Eden A, um sítio vazio na interface do agregado é escolhido ao acaso e ocupado. Na versão Eden B, um sítio da periferia é escolhido e em seguida um de seus vizinhos vazios é sorteado com igual chance e ocupado. Finalmente, na versão Eden C, as ligações entre sítios vazios e ocupados são escolhidas ao acaso e o sítio vazio dessa ligação é ocupado. As condições iniciais, normalmente utilizadas, são uma superfície lisa ou uma única partícula na origem. Para o crescimento a partir de uma superfície lisa foi verificado que o modelo de Eden pertence à classe de universalidade KPZ [8, 32, 73]. Entretanto, para o crescimento a partir de uma semente, os agregados são influenciados fortemente pela anisotropia da rede [74, 75]. Além disso, quando essa condição inicial é usada, os agregados obtidos possuem uma simetria radial com a interface irregular e foi demonstrado que o número de sítios da interface N_s cresce com N , o número de partículas do agregado, como

$$N_s \sim N^\delta. \tag{5.1}$$

Leyvraz [76] encontrou que $\delta = (d - 1)/d$, em que d é dimensão do espaço de imersão do agregado. Portanto, a interface não possui um tamanho definido e, conseqüentemente, a rugosidade não alcança o regime de saturação observado no caso do crescimento a partir de uma superfície. Wang *et al.* [77, 78], usando o centro de massa da interface do agregado para determinar a rugosidade, encontraram um expoente de crescimento $\beta = 0.396$ para o modelo de Eden fora da rede (usando uma regra equivalente à versão C). Embora os autores tenham afirmado que esse expoente está próximo da classe de universalidade KPZ, esse valor é consideravelmente maior que $1/3$ (cerca de 20% maior). Na verdade, esse valor está mais próximo da classe de universalidade Mullins-Herring (MH) para a qual $\beta = 3/8$. Uma aplicação importante de leis de escala para determinação da classe de universalidade em sistemas com simetria radial foi feita em um trabalho recente por Brú *et al.* [66]. Nesse trabalho, usando o centro de massa do agregado para determinar a rugosidade, foi encontrado que o crescimento de vários tipos de tumores pertence à classe de universalidade MH. Esse resultado possui um impacto significativo pois revela uma dinâmica universal no crescimento de tumores.

Entretanto, como iremos discutir neste capítulo, existe uma armadilha associada às estratégias de cálculo da rugosidade que podem resultar em conclusões incorretas acerca do expoente de crescimento e, conseqüentemente, da classe de universalidade do fenômeno investigado [23]. Essa discussão é feita através do estudo da evolução da interface de modelos com simetria radial com ênfase no modelo de Eden fora da rede.

5.2 O modelo de Eden Fora da Rede

As simulações do modelo de Eden fora da rede foram feitas com condição inicial dada por uma partícula ou célula (uma semente) na origem do sistema. As partículas são representadas por discos de diâmetro a . A evolução se dá de acordo com as mesmas regras usadas por Wang *et al.* [77]:

- Uma célula é escolhida ao acaso em uma lista das células ativas (figura 5.1(a)). Uma célula é considerada ativa quando uma nova célula adjacente a ela pode ser adicionada ao agregado sem que ocorra sobreposição com outras.
- Uma vez escolhida uma célula ativa (figura 5.1(b)), as regiões adjacentes a ela, onde não ocorre sobreposição entre a nova célula e as outras existentes, são identificadas. Uma nova célula é adicionada em uma direção escolhida aleatoriamente dentro das regiões permitidas (figura 5.1(c)).
- Caso a célula ativa passe a não ter nenhuma região de crescimento, ela é retirada da lista e denominada como célula inativa (figura 5.1(c)).

Na figura 5.1 mostramos uma ilustração das regras de evolução por meio de dois crescimentos independentes. No primeiro, a célula ativa (1) escolhida possui uma região adjacente onde uma nova célula pode ser adicionada sem que ocorra a sobreposição com outras e no segundo, a célula ativa (2) não possui essa região.

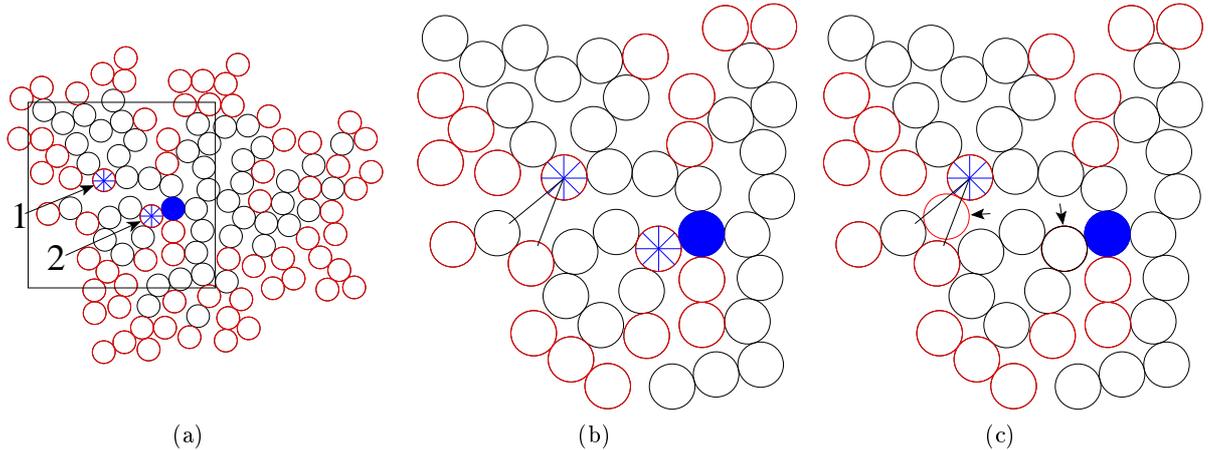


Figura 5.1: Ilustração das regras de crescimento do modelo de Eden fora da rede. A semente é destacada em azul, as células ativas em vermelho e as inativas em preto. (a) Dois exemplos de células ativas selecionadas para crescer (a partícula 1 possui uma região adjacente na qual uma nova pode ser adicionada e a 2 não possui). (b) A região adjacente à célula 1 onde uma nova pode ser adicionada é destacada. (c) Uma nova célula é adicionada em uma direção aleatória dentro da região destacada em (a) e a célula 2 é adicionada à lista de inativas (elas aparecem destacadas por uma seta).

Uma estrutura obtida usando esse procedimento é mostrada na figura 5.2(a). A estrutura é compacta e possui densidade média $\bar{\rho} = 0.648 \pm 0.002$, próxima da estimada por Wang *et al.* ($\rho = 0.6500 \pm 0.0008$) [77].

Dado o interesse restrito à evolução da interface das estruturas, introduzimos uma otimização que exclui todas as células dentro de um raio r_c da lista de células ativas de maneira a evitar o sorteio de células ativas no interior do agregado (figura 5.2(b)). Para evitar que células ativas da interface sejam rotuladas como inativas, usamos a otimização apenas quando o raio médio do agregado \bar{r} ultrapassa o valor $\bar{r} > 100a$ e, além disso, o valor $r_c = 0.8\bar{r}$ foi usado. Esse procedimento restringe o crescimento às células próximas da interface do agregado (figura 5.2(d)) Na figura 5.2(c), mostramos uma estrutura obtida usando o algoritmo otimizado. Para obter essa estrutura usamos $r_c = 0.9\bar{r}$ e $\bar{r} \geq 30a$, pois ela possui um raio igual a $\approx 60a$. A densidade média obtida para esses padrões foi $\bar{\rho} = 0.633 \pm 0.001$, um valor um pouco menor que o encontrado por Wang *et al.*.

A determinação das células pertencentes à interface do agregado é feita em três passos. Inicialmente, mapeamos o agregado em uma rede quadrada aproximando suas coordenadas para os inteiros mais próximos (figura 5.3(a)). Em seguida, determinamos os sítios da rede

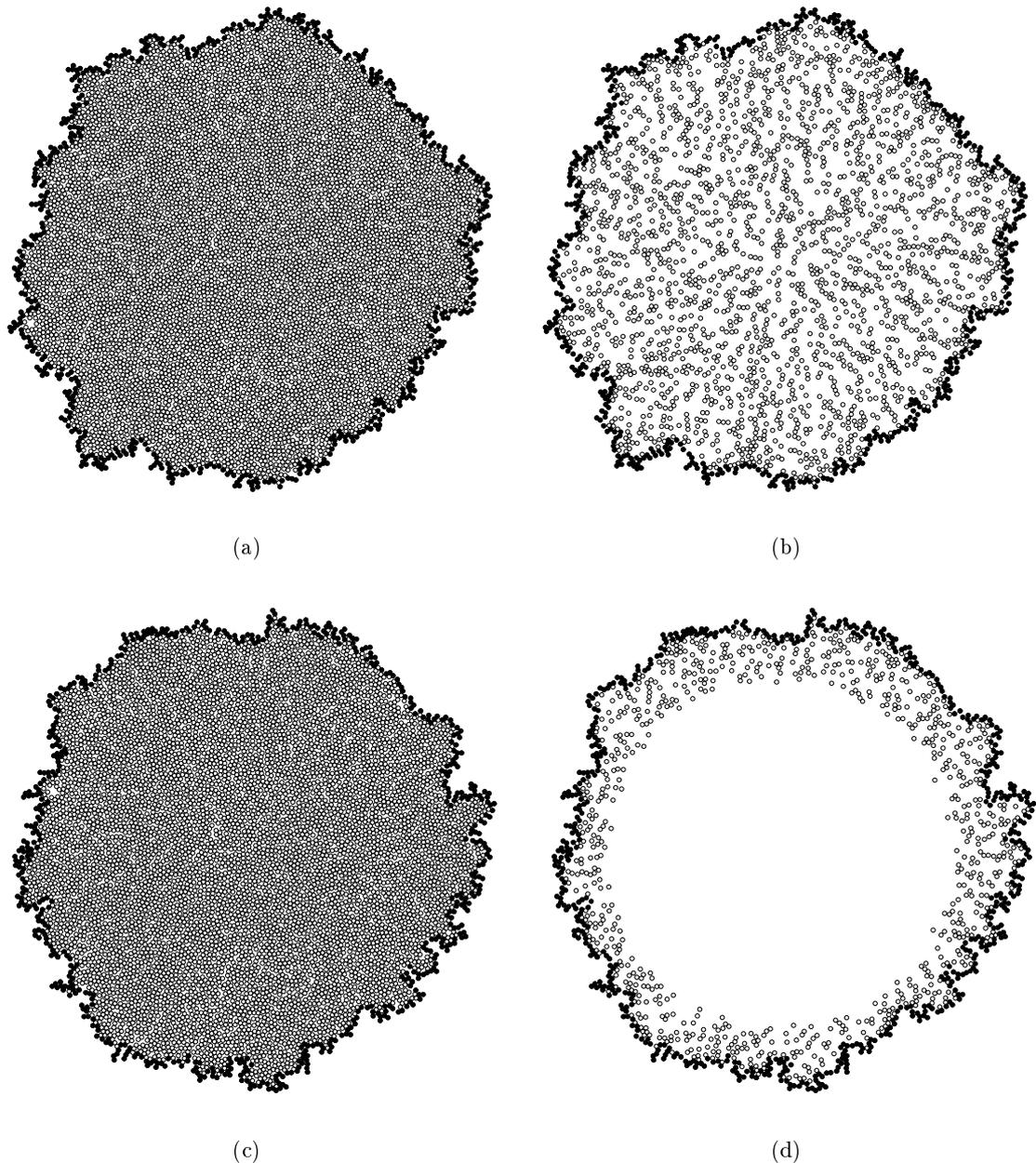


Figura 5.2: Agregados do modelo de Eden obtidos (a) sem e (c) com otimização e as correspondentes células ativas em (b) e (d), respectivamente. As estruturas possuem 6000 partículas cada uma. As partículas da interface são representadas por discos cheios. Nos padrões (c) e (d) a otimização foi usada para $r_c = 0.9\bar{r}$ e $\bar{r} \geq 30a$.

pertencentes à região externa ao agregado (figura 5.3(b), região em cinza) delimitada a uma região definida pelas coordenadas x_{min} , x_{max} , y_{min} e y_{max} dos extremos do agregado com uma tolerância $\delta = 5a$. Finalmente, os sítios da borda são aqueles pertencentes ao agregado na interface da região destacada em cinza (figura 5.3(c)).

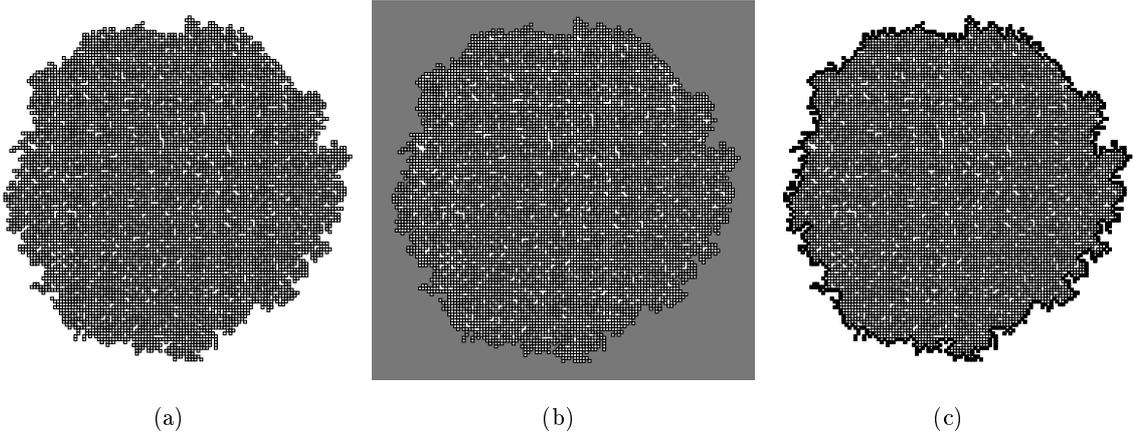


Figura 5.3: Ilustração do método utilizado para determinar a borda das estruturas: (a) agregado na rede, (b) definição da região externa do agregado (em cinza) e (c) agregado na rede com a borda destacada com quadrados cheios.

5.3 Interface dos Agregados e Flutuações dos Centros de Massa

Usamos quatro métodos diferentes para definir o valor da distância r_i que designa a posição da i -ésima partícula pertencente à borda do agregado para determinar a rugosidade. A rugosidade é definida em termos desse conjunto de distâncias $\{r_i\}$ como

$$w(\langle r \rangle) = \left[\frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} (r_i - \langle r \rangle)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.2)$$

em que $\langle r \rangle = \sum r_i / N_s$ é o valor médio e N_s é o número de elementos do conjunto $\{r_i\}$. Inicialmente, discutiremos três dos quatro métodos que diferem nas definições das origens usadas para medir as distâncias $\{r_i\}$:

- *Método do centro de massa da borda* – r_i é a distância da i -ésima partícula pertencente à interface ao centro de massa (CM) da borda.
- *Método do centro de massa da estrutura* – o centro de massa de todas as partículas do agregado é usado no lugar do centro de massa da borda.
- *Método da semente* – a distância do centro de massa é trocada pela distância à semente inicial.

Já que a dinâmica do modelo ocorre essencialmente na borda, podemos fazer uma analogia com o modelo de Eden crescido em uma superfície lisa e considerar o tempo proporcional ao número de partículas da periferia ou, equivalentemente, ao raio médio do agregado \bar{r} , definido como $\bar{r} = \sqrt{(N/\pi)}$. Dessa forma, o expoente de crescimento será obtido a partir do gráfico da rugosidade em função do raio médio.

Na figura 5.4 mostramos a evolução da rugosidade de interfaces usando os três métodos. Para os métodos do centro de massa da borda e da semente (figura 5.4(b)) é evidente a diferença entre os expoentes das leis de potência. Os expoentes encontrados foram $\beta_{CM} = 0.404 \pm 0.013$ e $\beta_0 = 0.333 \pm 0.010$, respectivamente. A estimativa dos erros foi feita usando as flutuações das inclinações locais em torno do valor médio (figura 5.4b). O valor de β_{CM} concorda com o obtido por Wang *et al.* [77], $\beta = 0.396$, enquanto o valor de β_0 está muito próximo do valor referente à classe de universalidade KPZ ($\beta_{KPZ} = 1/3$). No detalhe da figura 5.4(b), mostramos a razão entre a rugosidade avaliada usando o centro de massa da estrutura inteira e os outros dois métodos, ou seja, $\Gamma = w_{CM}^*/w_0$ e $\Gamma = w_{CM}^*/w_{CM}$. Como pode ser visto, o expoente de crescimento fornecido pelo método do centro de massa do agregado converge assintoticamente para o mesmo valor obtido com o método da semente. Isso indica que, para agregados assintoticamente grandes, o expoente de crescimento referente ao método do centro de massa da estrutura converge para $1/3$. Entretanto, é importante observar que essa convergência é lenta. O resultado obtido com o método da semente confirma, pela primeira vez, que agregados radiais obtidos pelo modelo de Eden fora da rede pertencem à classe de universalidade KPZ. É importante mencionar, que a diferença observada entre β_0 e β_{CM} , bem como a convergência lenta encontrada no método do centro de massa do agregado podem levar a conclusões equivocadas a cerca da classe de universalidade do sistema estudado.

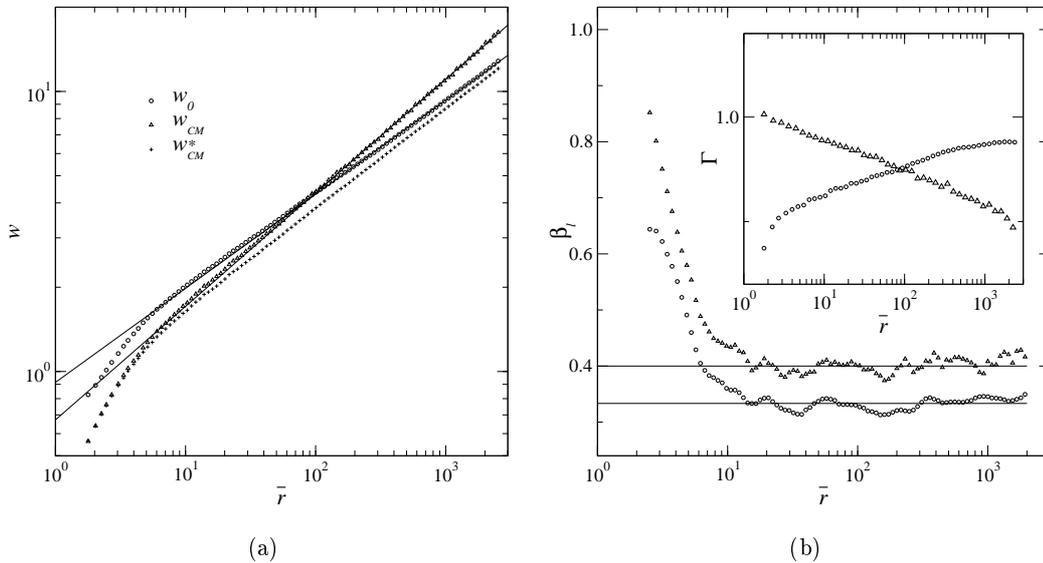


Figura 5.4: (a) Evolução da rugosidade calculada com os métodos do centro de massa da borda (w_{CM}) e do centro de massa do agregado (w_{CM}^*) e da semente (w_0). As linhas retas correspondem aos ajustes obtidos na região $\bar{r} > 10^2 a$. (b) Inclinação local (o expoente de crescimento local) como função do raio médio do agregado. As linhas horizontais representam as inclinações $\frac{1}{3}$ e $\frac{2}{5}$. No destaque mostramos as razões $\Gamma = \frac{w_{CM}^*}{w_{CM}}$ (triângulos) e $\Gamma = \frac{w_{CM}^*}{w_0}$ (círculos). Nessas simulações foram usadas 10^3 amostras.

A diferença observada entre os métodos pode ser compreendida através da análise da evolução dos centros de massa da borda e da estrutura. Na figura 5.5 mostramos três estágios de trajetórias típicas dos centros de massa obtidos ao longo de uma simulação. A caminhada é definida em termos do deslocamento do centro de massa quando o raio de giração do agregado aumenta por um diâmetro das partículas. Como pode ser visto da figura 5.5, a escala no caso do CM da borda é 10 vezes a escala do CM da estrutura. Quando o centro de massa da borda é adotado, a região de deslocamento ao redor da semente cresce rapidamente. Entretanto, o deslocamento do centro de massa do agregado percorre uma região de tamanho igual a poucos diâmetros das partículas e a trajetória observada possui uma dimensão fractal pequena. A trajetória do centro de massa da borda é mais compacta que a do agregado. Além disso, como pode ser visto na figura 5.6, as distâncias dos centros de massa em relação à semente inicial tanto para o centro de massa da borda quanto para o do agregado, crescem como leis de potência do raio médio do agregado $R_{CM} \sim \bar{r}^\gamma$ para $\bar{r} > 200a$. Usando novamente a inclinação local encontramos $\gamma_b = 0.45 \pm 0.04$ e $\gamma_a = 0.24 \pm 0.05$ para os centros de massa da borda e do agregado, respectivamente. Note que, quando o centro de massa da borda é usado, a amplitude do seu deslocamento em relação à semente cresce mais rápido que a largura da interface. Assim, as flutuações do centro de massa da borda levam a um expoente de crescimento $\beta_{CM} > \beta_0$. Entretanto, quando o centro de massa do agregado é usado o expoente de crescimento converge para β_0 como mostrado no destaque da figura 5.4(b), pois suas flutuações crescem mais lentamente que as flutuações (largura) da interface e, portanto,

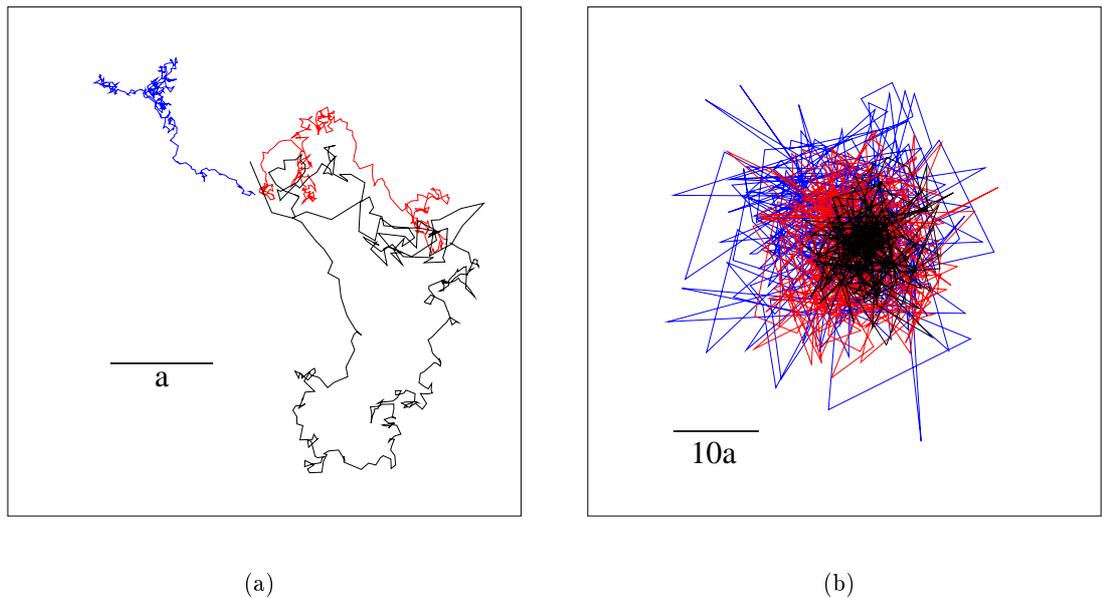


Figura 5.5: Trajetórias típicas dos centros de massa (a) da estrutura e (b) da borda. As cores correspondem a 342 (preto), 684 (vermelho) e 1024 (azul) passos.

tornam-se desprezíveis no limite assintótico. Portanto, esses resultados deixam claro porque os expoentes de crescimento obtidos para os métodos do centro de massa da borda e da semente são diferentes e, também, porque o expoente obtido no método do centro de massa do agregado converge lentamente para $1/3$.

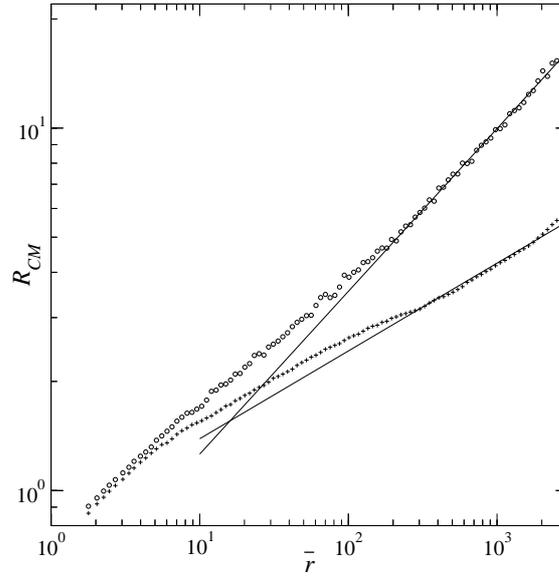


Figura 5.6: Deslocamento médio dos centros de massa da borda (o) e do agregado (+) em relação à semente.

No quarto método utilizado para determinar a rugosidade, denominado método dos setores, a interface é dividida em k setores de mesma separação angular e a rugosidade é definida como a média das rugosidades obtidas para cada setor, ou seja,

$$w = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k w_i. \quad (5.3)$$

A rugosidade w_i dentro do setor i é avaliada usando as distâncias em relação à semente conforme ilustrado na figura 5.7.

Na figura 5.8 mostramos a razão entre a rugosidade obtida usando o método dos setores e os métodos da semente e do centro de massa da borda, ou seja, w_k/w_0 e w_k/w_{CM} . Note que, quando a interface é dividida em um número pequeno de setores, o expoente de crescimento converge rapidamente para β_0 . Entretanto, quando um número grande de setores é usado, um transiente inicial com o expoente próximo a β_{CM} é observado mas, esperamos que esse expoente convergirá para β_0 no limite assintótico como observado para valores intermediários de k para os quais podemos observar um *crossover* do expoente β_{CM} para β_0 . Assim, podemos observar que a classe de universalidade KPZ emerge das flutuações grandes da interface, enquanto as flutuações do centro de massa da borda estão diretamente relacionadas às flutuações pequenas da interface.

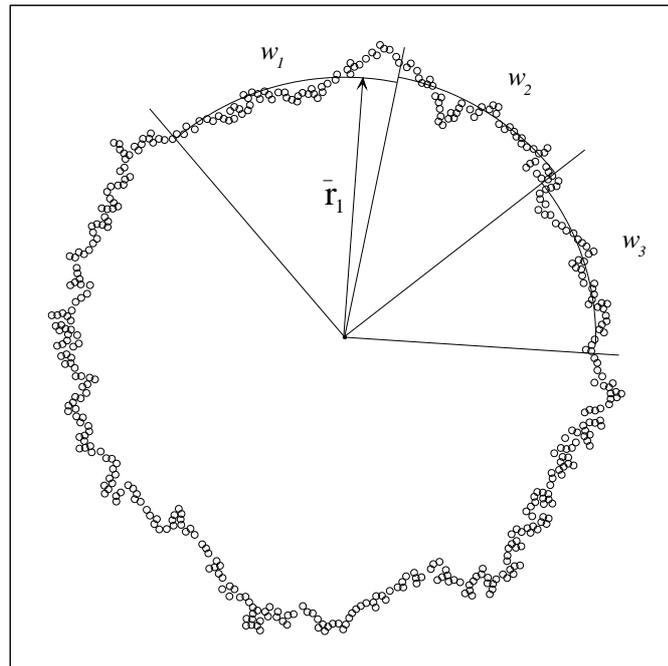


Figura 5.7: Ilustração do método dos setores. Na figura são indicados os semi-círculos de raios \bar{r}_k determinados para três setores.

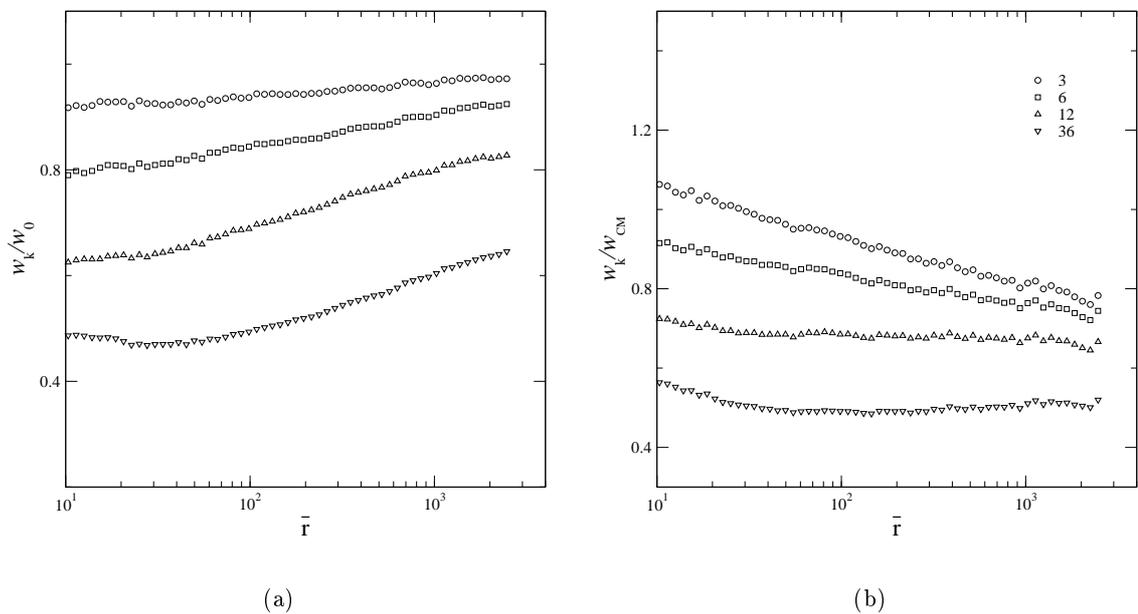


Figura 5.8: Razão entre as rugosidades obtidas usando diferentes métodos: (a) w_k/w_0 e (b) w_k/w_{CM} . Os números de setores usados estão indicados na legenda da figura (b).

5.4 Modelos de crescimento na rede quadrada

Para corroborar os resultados obtidos com o modelo de Eden fora da rede, estudamos três regras distintas para o crescimento de agregados na rede quadrada. Esses modelos foram

construídos de maneira a evitar os efeitos indesejados da anisotropia imposta pela rede. Neles, partículas são lançadas de pontos internos do agregado e seguem trajetórias balísticas até encontrarem um sítio vazio na periferia do agregado. Em todas as versões, as simulações começam com um sítio ocupado no centro da rede e as regras de crescimento são descritas a seguir:

- Modelo I – as partículas são lançadas da semente do agregado em direções aleatórias. Elas seguem trajetórias balísticas até encontrarem o primeiro sítio vazio na periferia do agregado, onde fixam-se irreversivelmente (figura 5.9(a)).
- Modelo II – as partículas são lançadas em direções aleatórias partindo de pontos internos ao agregado escolhidos ao acaso (figura 5.9(b)).
- Modelo III – a mesma regra do modelo II, mas em adição, para cada partícula que se fixa irreversivelmente ao sítio vazio uma outra é adicionada em uma posição radialmente oposta a ela com probabilidade p (figura 5.9(c)).

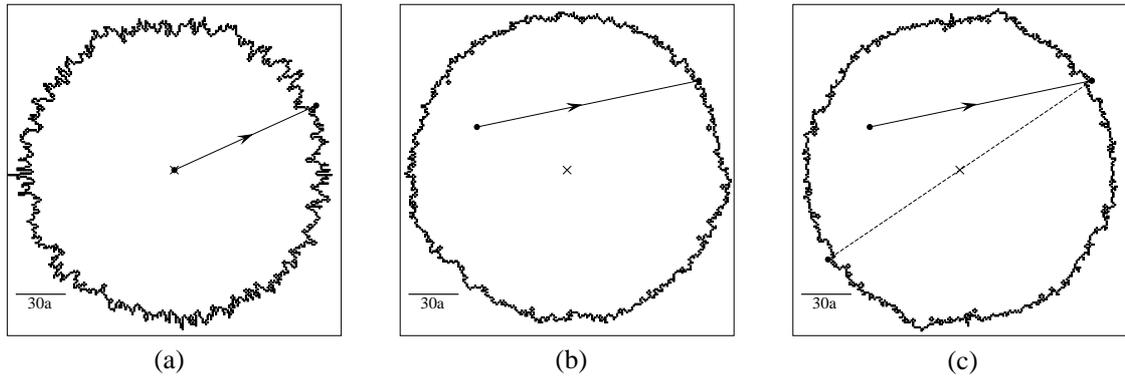


Figura 5.9: Ilustração das regras de crescimento de agregados radiais na rede quadrada: modelos (a) I, (b) II e (c) III.

Os expoentes de crescimento obtidos usando essas três versões são apresentados na tabela 5.1. Como pode ser visto, independentemente do modelo, o expoente β_{CM} possui sempre um valor próximo a $2/5$ enquanto o expoente β_0 possui um valor para o modelo I que é claramente diferente dos demais.

O modelo III permite controlar as flutuações do centro de massa da borda e, conseqüentemente, verificar sua influência sobre os expoentes de crescimento. Na figura 5.10, mostramos as rugosidades w_0 e w_{CM} , a distância R_{CM} e a razão w_{CM}/w_0 como funções do tempo usando $p = 0.9$. Note que a mudança no comportamento da rugosidade w_{CM} aparece quando as flutuações do centro de massa aproximam-se do valor da rugosidade obtida através do método da semente. Isto evidencia que o *crossover* é induzido pelo crescimento das flutuações do centro de massa.

Modelo	β_0	β_{CM}
I	0.284 ± 0.009	0.38 ± 0.02
II	0.209 ± 0.006	0.40 ± 0.05
III ($p = 0.75$)	0.217 ± 0.007	0.40 ± 0.04
III ($p = 0.9$)	0.213 ± 0.009	0.39 ± 0.04

Tabela 5.1: Expoentes de crescimento obtido para os três modelos estudados na rede quadrada.

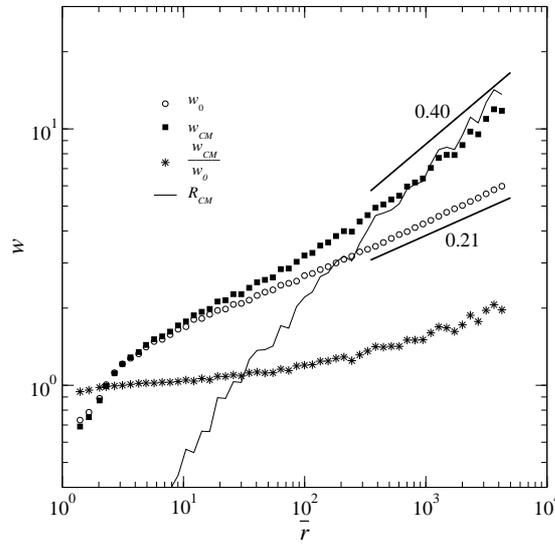


Figura 5.10: Evolução da rugosidade de interfaces obtidas usando o modelo III com $p = 0.9$. As médias foram feitas sobre 140 amostras.

5.5 Conclusões

Neste capítulo, estudamos as propriedades de escala de interfaces com simetria radial utilizando o modelo de crescimento de Eden fora da rede e por três modelos na rede quadrada. Nessa análise mostramos que existe uma armadilha na determinação das classes de universalidade utilizando os métodos dos centros de massa da estrutura e da borda. De fato, mostramos que o expoente de crescimento depende da estratégia adotada para medir a rugosidade da interface. Para o caso particular dos agregados obtidos usando o modelo de Eden fora da rede, encontramos o expoente $\beta \approx 1/3$ somente quando adotamos o método da semente para avaliar a rugosidade da interface. Embora esse valor seja esperado devido ao consenso que o modelo de Eden pertence à classe de universalidade KPZ, essa é a primeira vez que ele é obtido para estruturas com simetria radial. Por outro lado, quando usamos o centro de massa da borda como origem, encontramos $\beta_{CM} = 0.404 \pm 0.013$, um valor muito próximo de $2/5$, em concordância muito boa com o valor de β relatado previamente na literatura [77, 78]. Além

disso, mostramos que, quando a rugosidade da interface é medida em relação ao centro de massa do padrão, o valor do expoente de crescimento apresenta uma convergência lenta para $1/3$. Esses comportamentos aparecem como consequência do crescimento das flutuações dos centros de massa. Em particular, no caso do centro de massa da borda, as flutuações crescem mais rapidamente que as flutuações da interface. Mostramos também que os expoentes β_0 e β_{CM} podem ser associados aos comprimentos de onda grande e pequeno das flutuações da interface, respectivamente. Esses resultados foram confirmados por três modelos construídos na rede quadrada. Finalmente, é importante mencionar que o expoente de crescimento foi usado recentemente para determinar a classe de universalidade, que contém informações acerca dos processos envolvidos na dinâmica dos sistemas, em trabalhos publicados em periódicos científicos de grande relevância [67, 66, 68] sem a verificação da existência das armadilhas mostradas nesse capítulo. Especificamente, os autores desse trabalho usaram o método do centro de massa do agregado celular e seus resultados sugerem que essa dinâmica pertence à classe de universalidade MH. Entretanto, como mostramos nesse capítulo, com esse método o expoente de crescimento converge lentamente para o valor assintótico.

Parte III

Modelos de Agregação de Partículas

Capítulo 6

Transição Morfológica entre os Modelos DLA e BA

6.1 Introdução

Processos de crescimento que ocorrem por agregação de partículas (unidades fundamentais) são facilmente encontrados na natureza. Podemos citar como exemplos eletrodeposição [1], crescimento de colônias de bactérias [3], crescimento de tumores [79, 80, 81], dentre outros. As estruturas encontradas em tais processos variam de compactas com contornos com propriedades de escala não triviais, a estruturas ramificadas que apresentam a propriedade de auto-similaridade estatística.

A formação de padrões em processos fora do equilíbrio é um problema intensivamente estudado em física estatística [7, 8, 9]. Em particular, o modelo de agregação limitada por difusão (DLA) [10] atraiu grande interesse nas últimas décadas. Apesar de sua regra de evolução ser extremamente simples, o modelo DLA gera estruturas fractais com propriedades de escala não triviais. Este modelo está relacionado a vários fenômenos físicos e biológicos, tais como eletrodeposição [1], dedos viscosos [2], crescimento de colônias de bactérias [3] e formação de neurônios [4].

No modelo DLA original, partículas liberadas em pontos distantes do agregado realizam caminhadas aleatórias até encontrarem um sítio vizinho do agregado onde se ancoram irreversivelmente. Quando, no lugar da caminhada aleatória, usamos um trajetória retilínea (balística) com a direção escolhida aleatoriamente no momento do lançamento, obtemos o modelo de agregação balística (BA) [33]. Diferentemente do DLA, o modelo BA gera estruturas homogêneas, que não são fractais, que exibem propriedades de escala não triviais no comportamento da densidade [8, 34].

Neste capítulo, estamos interessados na generalização do modelo DLA na qual as par-

tículas seguem caminhadas aleatórias com tendência [82, 83, 84, 85, 86, 87]. Como veremos na seção seguinte, as caminhadas que estudaremos são aleatórias com dimensão igual a 2 em escalas de comprimentos pequenas. Entretanto, em escalas grandes, a tendência torna-se dominante e a dimensão da caminhada é igual a 1 (figura 6.4(a)). Portanto, agregados obtidos a partir desses modelos comportam-se como o modelo DLA em tamanhos pequenos e em largas escalas como estruturas homogêneas como as observadas no modelo BA. Assim, a massa de um agregado de tamanho ℓ é dada pela relação

$$M(\ell) = \ell^{d_f} f\left(\frac{\ell}{\xi}\right) \quad (6.1)$$

com $f(x) \sim \text{constante}$ se $x \ll 1$ e $f(x) \sim x^{d-d_f}$, caso contrário. Nessa equação, d é a dimensão do espaço de imersão, d_f é a dimensão fractal do DLA e ξ o tamanho característico do ponto de *crossover* entre os regimes de escala do DLA e BA.

Neste capítulo, apresentamos um trabalho desenvolvido para investigar a transição morfológica entre os modelos DLA e BA [24]. A caminhada no modelo é realizada com uma tendência controlada por um parâmetro λ (pertencente ao intervalo $(0, 1)$), que assume os valores $\lambda = 0$ e 1 para os modelos de agregação balística e limitada por difusão, respectivamente.

6.2 Agregação de Partículas com Tendência nas Caminhadas

Em muitos processos de crescimento naturais a agregação pode ocorrer na presença de um campo que gera uma tendência na trajetória das partículas. Se esse campo é uniforme e possui uma intensidade muito grande as partículas seguem uma trajetória balística, mas quando a intensidade é reduzida, a caminhada pode ser representada por uma caminhada aleatória com uma tendência na direção do campo. Para analisar a estrutura dos agregados obtidos nessa situação, Meakin [82] propôs um modelo de agregação no qual as partículas seguem caminhadas aleatórias com tendência em uma direção fixa. Nessas caminhadas, o caminhante executa um passo na direção da tendência (por exemplo, para a esquerda) com probabilidade p e em qualquer direção (incluindo a da tendência) com probabilidade $1 - p$. Note que, quando $p = 1$ a partícula executa passos apenas na direção da tendência e o modelo de deposição balística é recuperado. A figura 6.1 ilustra as regras de evolução do modelo de Meakin. As partículas são lançadas, uma de cada vez, sobre uma linha a uma distância $x_{max} + 5$ da semente (à direita do padrão). As partículas realizam caminhadas aleatórias com tendência (no caso da ilustração com uma tendência para a esquerda) até alcançarem um sítio adjacente ao padrão ou serem descartadas quando alcançam um círculo de descarte (de raio $2R_{max}$), ou alcançar uma linha de descarte à esquerda da estrutura (a uma distância $10/p$ da semente).

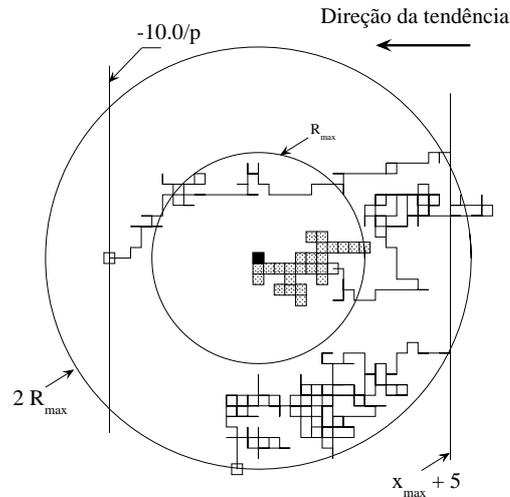


Figura 6.1: Ilustração do modelo de crescimento de agregados com caminhadas anisotrópicas. Nessa ilustração, mostramos três caminhadas nas quais uma delas é bem sucedida (caminhada do meio) e nas outras duas os caminhantes são descartados, um deles ao alcançar a linha de descarte após o agregado (caminhada de cima) e o outro é descartado ao alcançar um círculo de descarte.

Como pode ser visto na figura 6.2, as estruturas obtidas usando o algoritmo de Meakin possuem uma forma de “leque”. Além disso, a densidade interna da estrutura cresce com a probabilidade p . Meakin observou uma transição de estruturas semelhantes àsquelas obtidas no modelo DLA em escalas pequenas para estruturas semelhantes àsquelas do BA em escalas grandes, com a dimensão fractal variando de $d_f \approx 5/3$ para ≈ 2 , respectivamente.

Outro modelo que usa caminhadas com tendência foi proposto por Natagani [85]. Neste modelo, a condição inicial é dada por uma semente central e a tendência é radial. As partículas são lançadas sobre um círculo de raio $r_{max} + 5$ e realizam caminhadas aleatórias nas quais um passo é executado na direção da tendência com probabilidade p ou em qualquer direção com probabilidade $1 - p$. A tendência radial pode ser imposta na direção da semente ou para fora

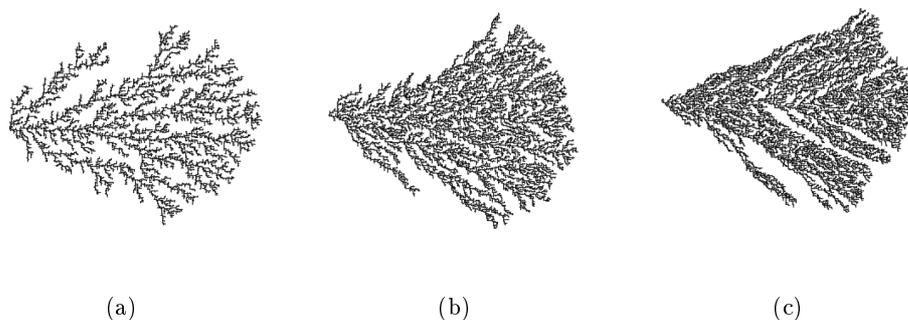


Figura 6.2: Estruturas obtidas usando o algoritmo de Meakin com (a) $p = 0.1$, (b) 0.5 e (c) 1.0 .

dela e são denominadas positiva e negativa, respectivamente.

Nas figuras 6.3 (a)-(d) mostramos estruturas obtidas usando o algoritmo de Natagani com uma tendência positiva e diferentes valores de p . Como pode ser visto, a medida que p é aumentado, os padrões variam de estruturas semelhantes àquelas obtidas no modelo DLA a estruturas homogêneas como as do BA. Nas figuras 6.3(e)-(h), mostramos padrões obtidos utilizando uma tendência negativa e diferentes valores de p . Nesse caso as estruturas são semelhantes àquelas do DLA para $p \approx 0$ e à medida que p é aumentado as estruturas exibem formas com maior excentricidade. Além disso, Natagani observou que, para tendências positivas, as estruturas obtidas exibem uma transição semelhante àquela obtida no modelo de Meakin, com dimensões fractais $d_f \approx 5/3$ e 2, respectivamente. Para uma tendência negativa as estruturas exibem uma transição de padrões semelhantes aos do DLA em escalas pequenas para padrões excêntricos em escalas grandes, com dimensões fractais $d_f \approx 5/3$ e 1, respectivamente.

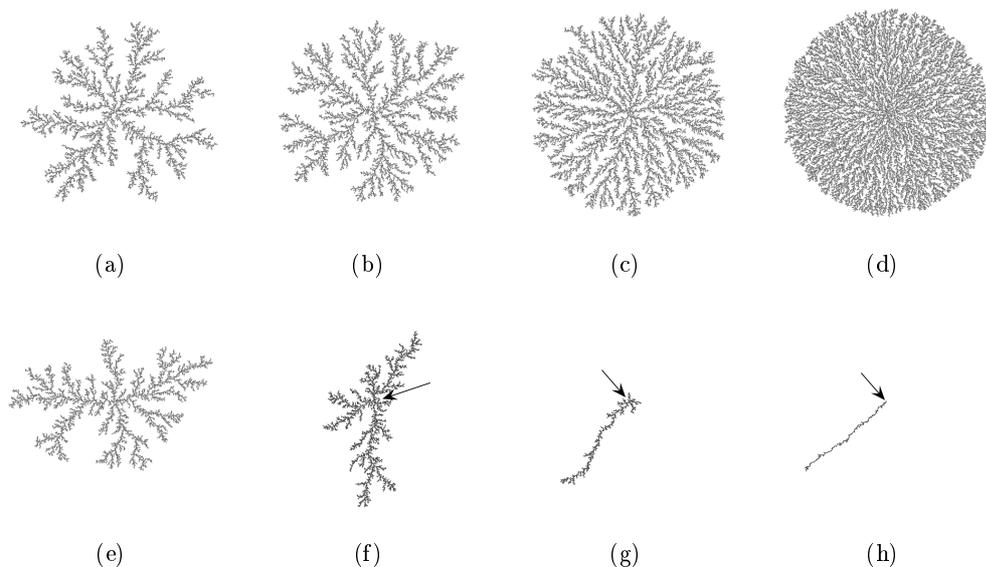


Figura 6.3: Estruturas obtidas usando o algoritmo de Natagani. Usamos uma tendência radial para dentro em (a)-(d), com $p = 0.0001, 0.0005, 0.0025$ e 0.0125 , respectivamente. E uma tendência radial para fora em (e)-(h), com $p = 0.0001, 0.0005, 0.0025$ e 0.0125 , respectivamente. As setas em (f)-(h) indicam a semente do agregado

6.3 Modelo de Agregação de Caminhantes com Tendências Aleatórias

Nesta seção iremos descrever as regras de evolução do modelo de agregação usado para estudar a transição morfológica entre os modelos DLA e BA. Como nos modelos DLA e BA originais, a condição inicial é definida por uma semente localizada na origem do sistema.

A cada instante partículas são liberadas, uma de cada vez, sobre um círculo distante do agregado. A distância entre a origem e o círculo de lançamento é denotada por r_ℓ . Cada partícula executa uma caminhada com tendência em uma direção escolhida ao acaso definida por

$$x_{n+1} = x_n + \cos(\phi + \lambda\theta_n) \quad (6.2a)$$

$$y_{n+1} = y_n + \text{sen}(\phi + \lambda\theta_n), \quad (6.2b)$$

em que (x_n, y_n) são as coordenadas da partícula no n -ésimo passo da caminhada, ϕ é um ângulo aleatório que define a direção da tendência escolhido no início da caminhada, θ_n é uma direção aleatória escolhida a cada passo da caminhada. Os valores de ϕ e θ_n pertencem ao intervalo $[-\pi, \pi]$. Nesse modelo, o parâmetro λ controla a aleatoriedade associada à caminhada. Em particular, quando $\lambda = 1$ a caminhada é puramente aleatória e quando $\lambda = 0$ ela é retilínea, recuperando os modelos DLA e BA, respectivamente. Na figura 6.4 mostramos duas caminhadas geradas com os parâmetros $\lambda = 0.95$ e 1.0 . Como nos modelos originais, o crescimento do agregado ocorre quando uma partícula visita um sítio da vizinhança do agregado, no qual ela se ancora permanentemente. Quando a distância entre o caminhante e a origem excede um valor r_k , muito maior que o tamanho do agregado, ela é excluída e uma outra é liberada no círculo de lançamento.

Os valores de r_ℓ e r_k devem ser tão grandes quanto possível, mas limitações computacionais restringem tais valores. Como usualmente é feito, definimos $r_\ell = r_{max} + r_0$ em que r_{max}

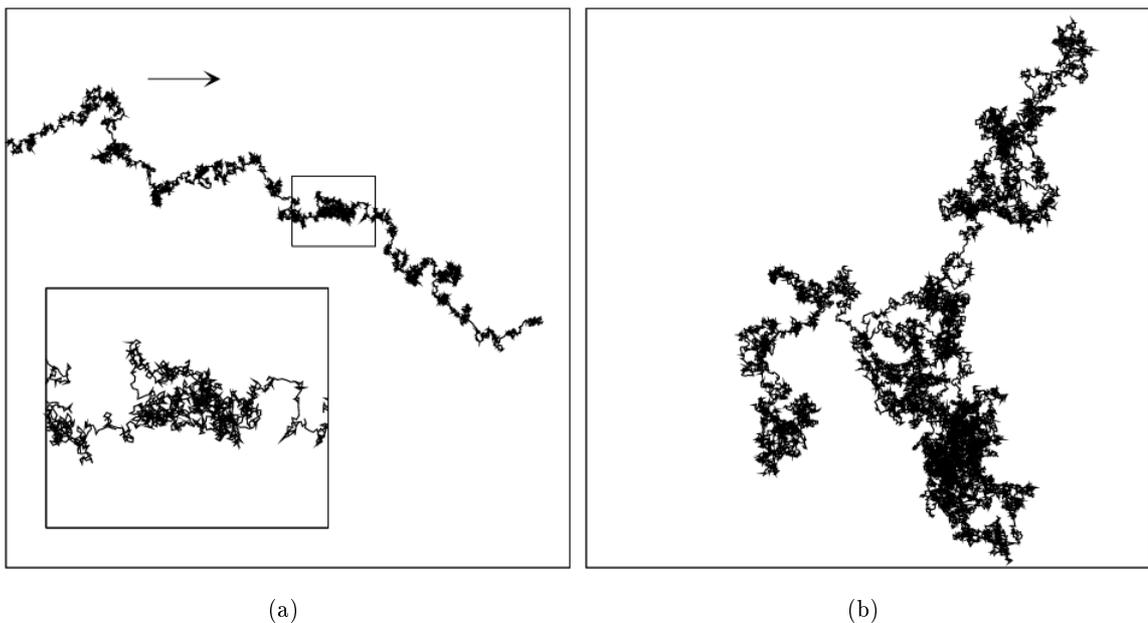


Figura 6.4: Caminhadas com tendência: em (a) usamos $\lambda = 0.95$ e em (b) $\lambda = 1.0$. Como pode ser visto no destaque a caminhada em pequenas escalas comporta-se como uma caminhada aleatória.

é a maior distância de uma partícula pertencente ao agregado à origem. Para o modelo DLA, r_0 é tipicamente entre 5 e 10 unidades de rede [8, 7]. Entretanto, para o modelo BA, r_0 necessita ser muito maior para minimizar os efeitos de sombra que geram instabilidades [88, 89]. Na figura 6.5 mostramos o efeito de sombras sobre agregados usando como condições iniciais uma semente e uma linha de partículas. Em ambos os casos é evidente a formação de um ramo muito maior que os demais.

O primeiro passo desse trabalho foi determinar quais os valores adequados para os parâmetros r_0 e r_k . Os testes sugerem que os padrões se tornam poucos sensíveis a variações de r_0 quando $r_0 > 300$, em concordância com os valores adotados por Kim [87] em um modelo de deposição no qual a caminhada das partículas tem tendência. Assim, adotamos $r_0 = 400$ em todas simulações. O valor do raio r_k , usual para gerar agregados grandes no modelo DLA é de 10 a 100 vezes que o raio de lançamento, enquanto no modelo BA apenas algumas unidades de rede maior que r_0 são necessárias. Entretanto, devido à tendência nas caminhadas, podemos usar um valor intermediário. Assim, adotamos $r_k = 2r_{max} + r_0$, estratégia também adotada por Kim [87].

Na tabela 6.1 apresentamos um resumo dos parâmetros, bem como seus significados, utilizados neste modelo de agregação.

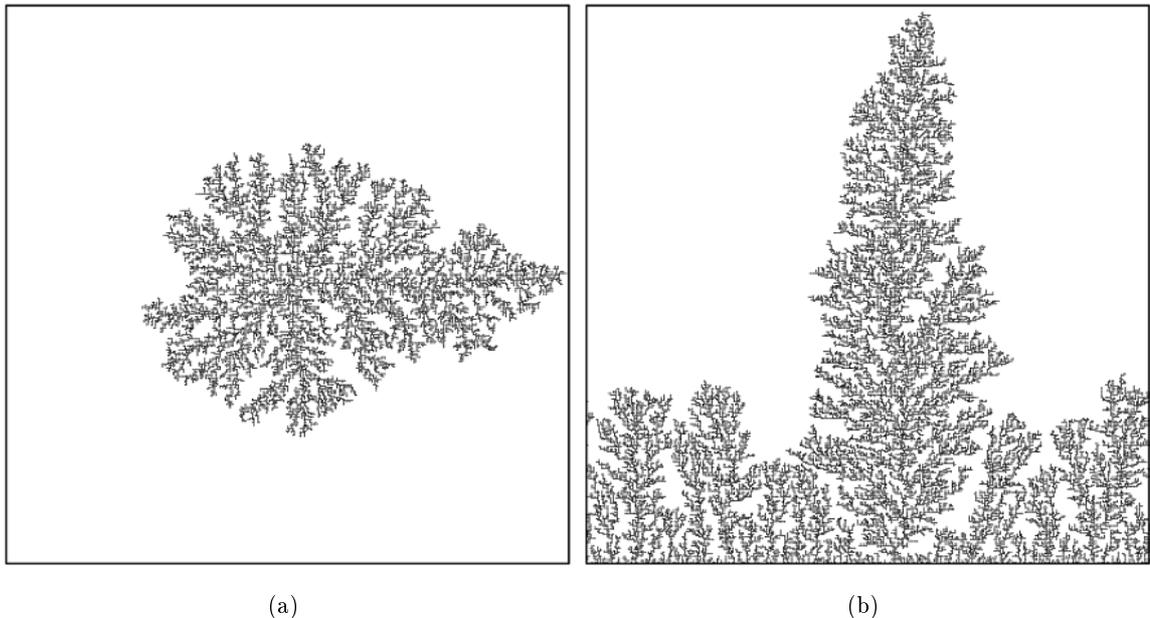


Figura 6.5: Padrões obtidos nos modelos de (a) agregação e (b) deposição balística com $r_0 = h_0 = 100$. A estrutura em (b) foi obtida por meio do modelo de deposição balística com as direções das trajetórias das partículas escolhidas aleatoriamente no intervalo $[-\pi/2, \pi/2]$.

significado	parâmetro
raio do agregado	r_{max}
raio de lançamento	r_ℓ
raio de descarte	r_k
ângulo da tendência	ϕ
ângulo aleatório no n -ésimo passo	θ_n
parâmetro que controla a aleatoriedade	λ
tamanho do salto	r_s
direção do salto	ϕ_s

Tabela 6.1: Um breve resumo dos parâmetros do modelo apresentado nesse capítulo.

6.4 Caminhada e Otimização

Para analisar a transição entre DLA e BA foi necessário simular agregados de larga escala em redes de até $10^4 \times 10^4$ sítios. A simulação em larga escala no modelo DLA só é possível com as estratégias de otimização como as descritas na seção 2.2.1. Entretanto, aquelas estratégias não podem ser usadas aqui, pois a distribuição de partículas que passam sobre um círculo de raio r não é homogênea como no caso da caminhada aleatória. Como o tempo computacional necessário em simulações de larga escala sem otimizações é proibitivo, um algoritmo mais eficiente deve ser construído. Na figura 6.6 mostramos 50 caminhadas com $\lambda = 0.3, 0.5, 0.7$ e 0.9 . Como pode ser visto, as trajetórias são aproximadamente limitadas por uma abertura angular limitada com concentração de partículas na região central. A abertura angular aumenta com o valor de λ . Na figura 6.7, mostramos as funções de distribuição dos

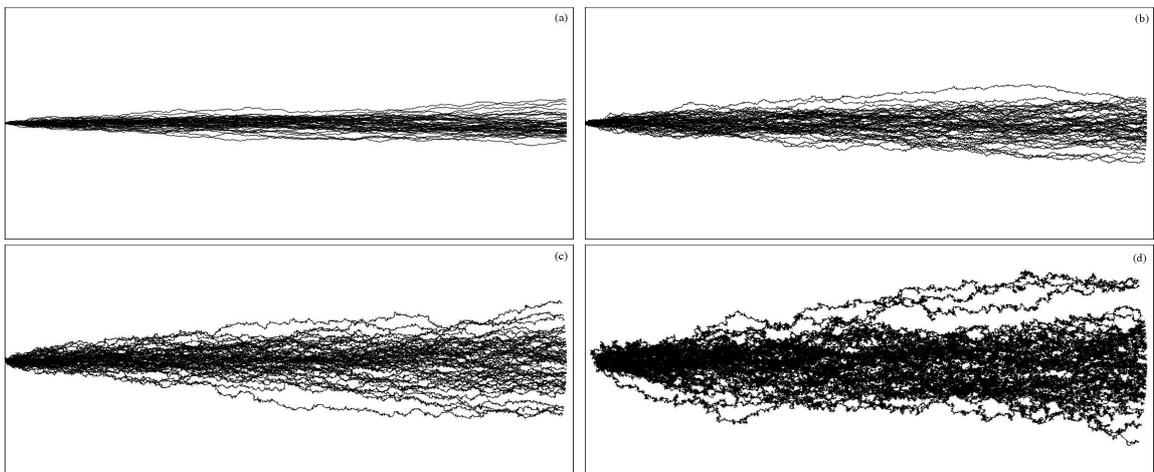


Figura 6.6: Ilustração da distribuição angular de caminhadas aleatórias com tendência na direção $\phi = 0$. 50 partículas foram liberadas da mesma posição com $\lambda = 0.3, 0.5, 0.7$ e 0.9 , em (a), (b), (c) e (d), respectivamente.

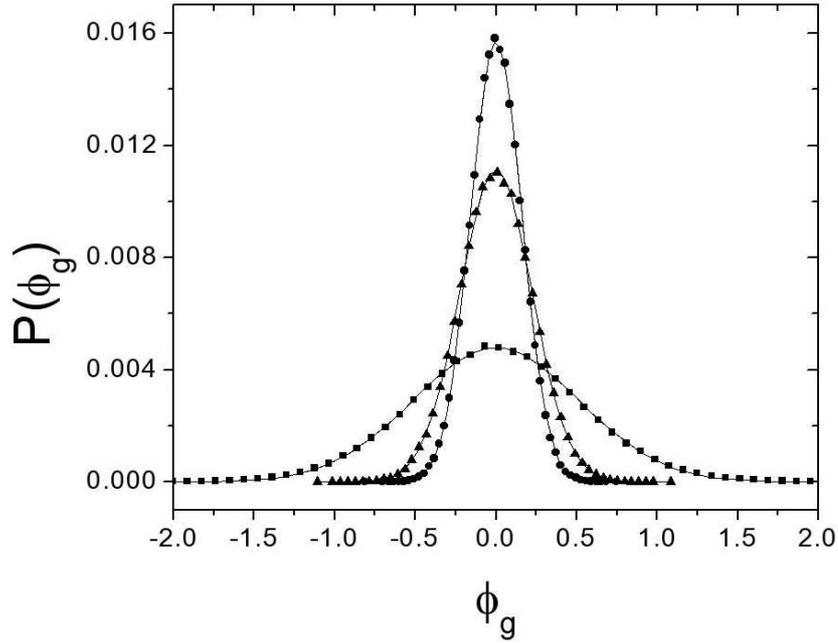


Figura 6.7: Distribuição angular de caminhantes com uma tendência na direção $\phi = 0$ e os ajustes gaussianos correspondentes. As curvas correspondem a $\lambda = 0.99$ e $r = 200$ (quadrados), $\lambda = 0.99$ e $r = 1000$ (triângulos), e $\lambda = 0.90$ e $r = 200$ (círculos).

ângulos de saída, ou seja, ângulos nos quais os caminhantes cruzam círculos de raio r . Nela mostramos casos nos quais usamos círculos de raios $r = 200$ e 1000 , com $\lambda = 0.99$, e um círculo de raio $r = 200$, com $\lambda = 0.9$. As linhas sólidas são ajustes usando funções gaussianas centradas em ϕ , a direção da tendência. É importante mencionar que para $\lambda \rightarrow 1$ e $r \rightarrow 0$ são necessárias amostragem mais cuidadosa e a qualidade do ajuste gaussiano piora. Logo, os demais conjuntos usados em nossas simulações (exceto quando $\lambda = 0.995$) fornecem curvas com ajustes melhores que os mostrados nesta figura.

Usando o fato que o ângulo de saída dos caminhantes é bem ajustado por uma distribuição gaussiana, podemos generalizar a estratégia de executar saltos longos quando o caminhante está longe do agregado. Assim, o seguinte procedimento foi adotado: se a distância r_i entre o caminhante e o centro da rede for maior que $r_{max} + \delta$ com $\delta > 200$, o caminhante executa um salto de tamanho definido. Usamos dois tamanhos para os saltos: $r_s = 200$, quando o caminhante se encontra dentro da região em que sua distância ao agregado é maior que 200 e menor que 1000; e $r_s = 1000$, quando sua distância for maior que 1000. A direção do salto, denominada ϕ_s , é dada por $\phi_s = \phi + \phi_g$ em que ϕ_g é um ângulo aleatório entre $-\pi$ e π selecionado de uma distribuição gaussiana de variância σ , ou seja,

$$P(\phi_g) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi/2}} \exp\left(-\frac{2\phi_g^2}{\sigma^2}\right) \quad (6.3)$$

em que a variância σ é função de λ e r_s . Para determinar σ , construímos o histograma do

número de partículas que alcança uma distância r_s em um ângulo ϕ_g usando um número grande de caminhantes para vários valores de λ e $r_s = 200$ e 1000 (os tamanhos dos saltos que utilizamos). Na tabela 6.2 fornecemos os valores de σ encontrados. Para todos os pares λ e r usados nas simulações um coeficiente de correlação $r^2 \geq 0.999$ foi exigido para determinar σ .

λ	$\sigma(r_s = 200)$	$\sigma(r_s = 1000)$
0.100	0.02585	0.01202
0.300	0.07591	0.03413
0.500	0.12535	0.05613
0.700	0.18206	0.08139
0.900	0.31933	0.14216
0.950	0.45109	0.20057
0.990	1.03575	0.45130
0.995	1.53278	0.63451

Tabela 6.2: Valores de σ determinados usando um ajuste gaussiano.

6.5 Resultados

As simulações foram realizadas em redes quadrada e triangular de tamanhos variando de $L = 10^3$ a 10^4 , com um número de amostras variando de 10 a 100 dependendo do tamanho do sistema.

6.5.1 Validade do Algoritmo Otimizado

Para confirmar a validade da otimização descrita anteriormente, inicialmente fizemos simulações em redes com $L = 10^3$ e $\lambda = 0.99$, com e sem a otimização. Conforme mencionado anteriormente, à medida que os valores de λ se afastam de 1, os ajustes gaussianos, usados para saltos longos, são cada vez melhores. Na figura 6.8 mostramos agregados obtidos com e sem otimização. Comparando esses padrões não é possível ver diferenças morfológicas, ou seja, os padrões são muito similares ou estatisticamente indistinguíveis. Usando o método massa-raio encontramos $d_f = 1.70(2)$ e $1.72(2)$ para agregados obtidos com e sem a otimização, respectivamente. Avaliamos também o raio de giração em função do número de partículas no agregado, que forneceu $\nu = 0.560(3)$ e $0.561(2)$, em agregados com e sem a otimização, respectivamente. Estes expoentes reforçam a validade do algoritmo otimizado. O tempo computacional gasto para obter uma amostra gerada sem otimização foi por volta de uma

hora em um pentium IV (3GHz), entretanto, a mesma simulação usando otimização levou aproximadamente 10min. Portanto, mesmo para pequenas simulações, a otimização mostrou-se bastante eficiente.

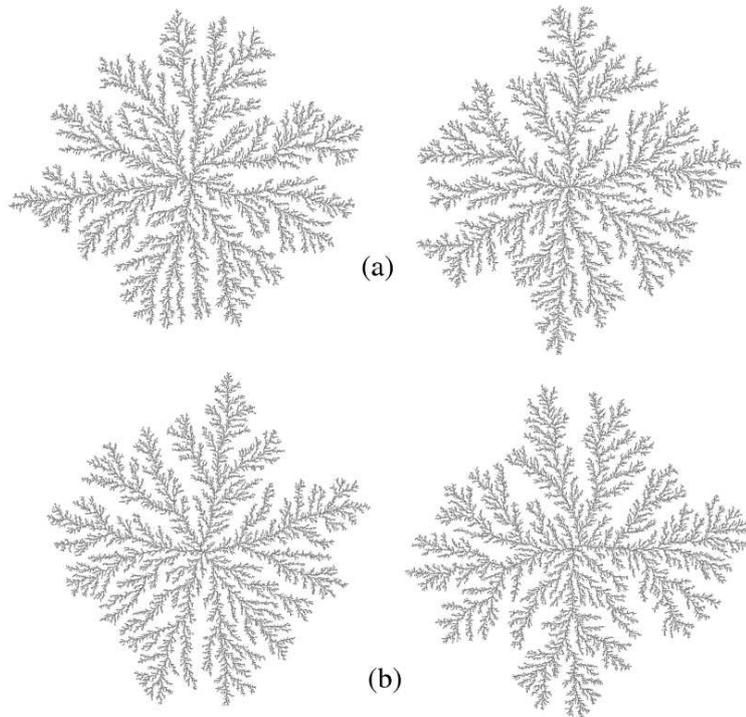


Figura 6.8: Teste da otimização utilizada. Dois agregados obtidos usando ou não a otimização, em (a) e (b), respectivamente. Nestas simulações usamos $L = 1000$ e $\lambda = 0.99$.

6.5.2 Caracterização da Transição Morfológica

Na figura 6.9 mostramos padrões obtidos para distintos valores de λ . Para obter estes padrões foram usadas redes com tamanho $L = 10^3$. Podemos observar uma transição suave de estruturas densas para ramificadas. Para valores pequenos de λ os padrões são muito semelhantes aos obtidos no modelo BA (veja a figura 2.13(a), página 19). Contudo, à medida que $\lambda \rightarrow 1$, os padrões tornam-se muito similares aos gerados pelo modelo DLA (veja figura 2.6, página 14). O agregado obtido com $\lambda = 0.99$ é caracterizado pela anisotropia da rede quadrada, uma assinatura do modelo DLA. Entretanto, esperamos que no limite assintótico de $L \rightarrow \infty$ todos os padrões, exceto quando $\lambda = 1$, sejam homogêneos. Isso se deve ao fato que a medida que os agregados crescem as distâncias percorridas pelas partículas no interior dos agregados são cada vez maiores de modo que quando $\lambda \neq 1$ a tendência nas trajetórias se tornam evidentes e assim a blindagem das partículas é cada vez mais suprimida. Diferentemente do caso em que $\lambda = 1$, em que o modelo DLA é recuperado.

Para quantificar a transição morfológica entre os modelos BA e DLA usamos duas

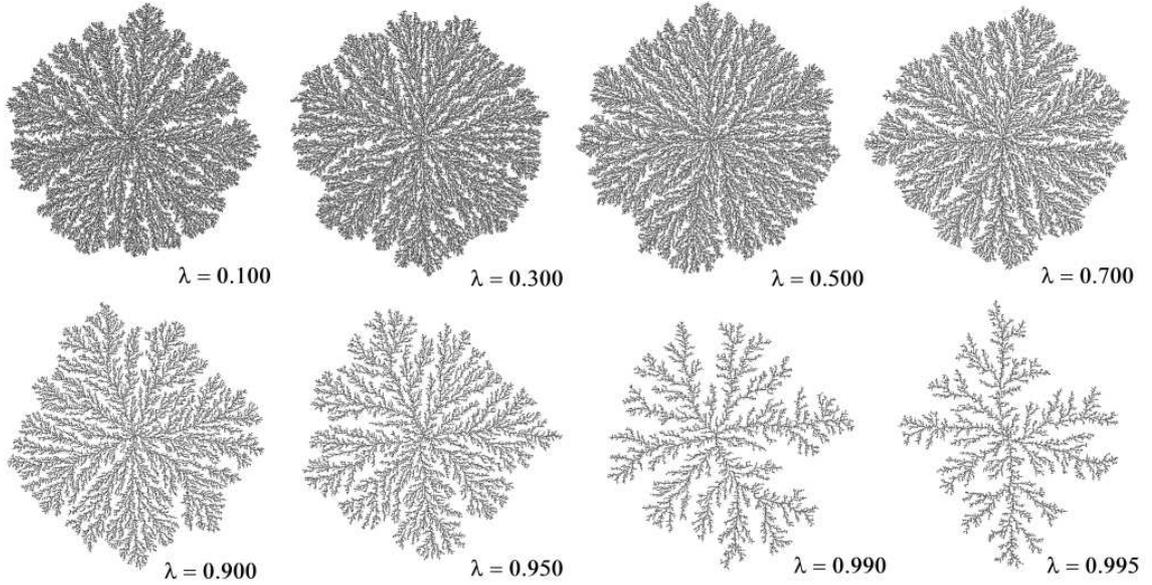


Figura 6.9: Transição morfológica entre BA and DLA. O número de partículas nos agregados varia de 2.5×10^5 ($\lambda = 0.1$) a 5×10^4 ($\lambda = 0.995$). Nestas simulações usamos uma rede de tamanho $L = 1000$.

medidas: a massa e a densidade média do agregado no interior de um círculo de raio r , determinadas por meio do método massa-raio (seção 2.1.2, página 11).

A densidade média $\bar{\rho}(r)$ é definida como a razão entre o número de sítios ocupados e o número total de sítios dentro da região limitada pelo círculo de raio r centrado na semente. Uma vez que esperamos obter uma estrutura homogênea (que não é fractal) no limite $r \rightarrow \infty$, a densidade deve alcançar um valor finito ρ_0 diferente de zero nesse limite. A aproximação da densidade ρ_0 é lenta e toma a forma

$$\bar{\rho}(r) = \rho_0 + Ar^{-\gamma} \quad (6.4)$$

em que γ é o expoente que caracteriza a aproximação do valor assintótico da densidade ρ_0 e A uma constante. Esta hipótese de escala foi usada por Liang e Kadanoff [34] para estudar o modelo de agregação balística, no qual as partículas seguem trajetórias em uma única direção (seção 2.2.2, 19). Eles concluíram que γ é um expoente não universal, ou seja, depende da estrutura da rede.

Para determinar os parâmetros ρ_0 , A e γ , inicialmente fizemos um ajuste utilizando o método dos mínimos quadrados para a equação (6.4). Desse ajuste retiramos uma estimativa para o valor de ρ_0 e então construímos um gráfico de $\bar{\rho}(r) - \rho_0$ como uma função de r para cada valor de λ , procurando pela maior região linear (no gráfico logarítmico). Na figura 6.10 mostramos curvas obtidas para $\lambda = 0.3$ e 0.99 . O valor da densidade ρ_0 foi ajustado para obter o melhor ajuste em lei de potência dentro da maior região possível. Para evitar a zona

ativa do agregado, limitamos os ajustes à região correspondente à metade do tamanho da estrutura. Podemos ver que o regime em lei de potência para $r > 10$ mostra que a densidade aproxima-se do valor estacionário obedecendo a relação (6.4).

Na figura 6.11(a) mostramos a densidade assintótica ρ_0 e o expoente γ como função de $1 - \lambda$, a distância do ponto de transição. Aqui, ρ_0 age como um parâmetro de ordem que

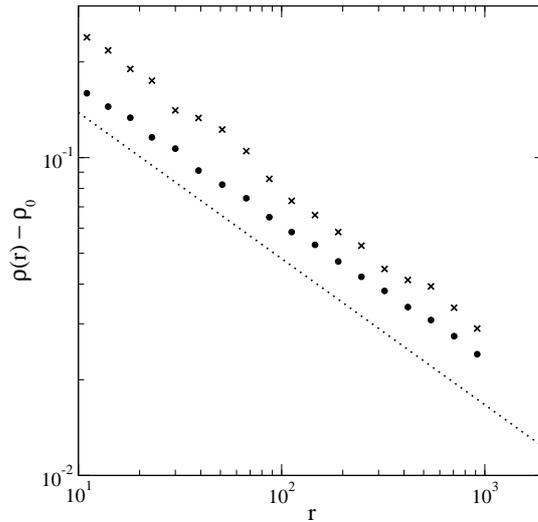


Figura 6.10: Gráfico em escala logarítmica de $\bar{\rho} - \rho_0$ contra r para $\lambda = 0.3$ (\times) e $\lambda = 0.99$ (\bullet). A linha pontilhada corresponde à inclinação -0.46 . O ajuste linear dos dados fornecem a $\gamma \approx 0.45$ e $\gamma \approx 0.47$ para $\lambda = 0.3$ e $\lambda = 0.99$, respectivamente.

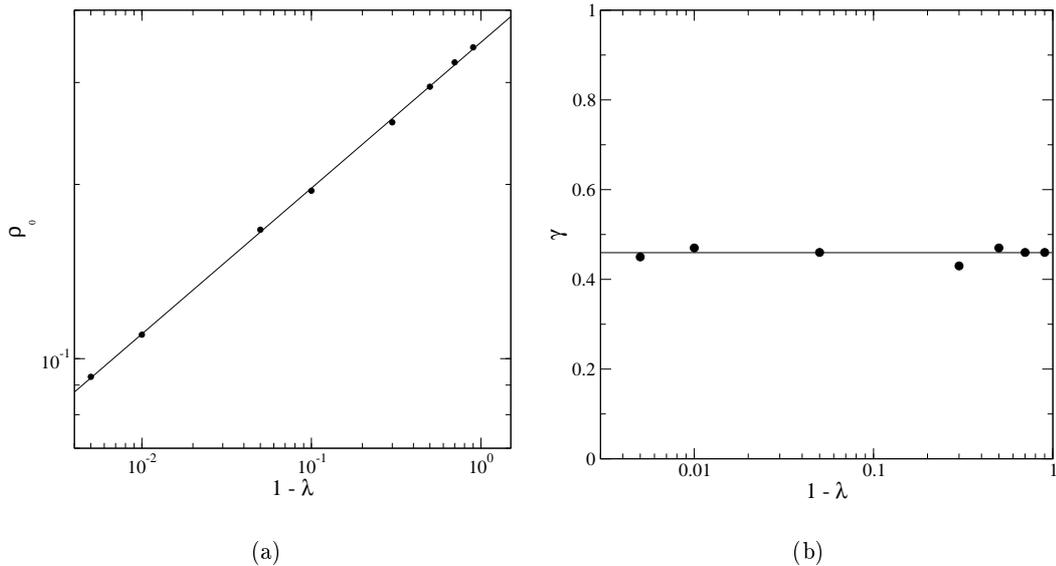


Figura 6.11: (a) Densidade estacionária ρ_0 e (b) expoente γ definidos na equação (6.4) como uma função da distância ao ponto crítico. O tamanho da rede usado foi $L = 5 \times 10^3$ e as simulações foram finalizadas quando o raio do agregado alcançou a borda da rede.

vai a zero no ponto crítico $\lambda_c = 1$ seguindo a relação

$$\rho_0 \sim |1 - \lambda|^\beta, \quad (6.5)$$

em que os expoentes encontrados foram $\beta = 0.27(2)$, $0.28(2)$ e $0.26(1)$ para tamanhos $L = 10^3$, 2×10^3 e 10^4 , respectivamente. Na figura 6.11(b) mostramos γ contra $1 - \lambda$. Podemos observar que γ flutua em torno do valor 0.46, sugerindo que γ é independente de λ e seu valor médio é 0.46(2).

Para testar a universalidade de γ e β estudamos outras duas versões do modelo. Na primeira consideramos que o caminhante ancora ao chegar em um sítio primeiro ou segundo vizinho do agregado. Na segunda usamos uma rede triangular no lugar da rede quadrada. Usamos $L = 2000$ em ambos os testes. Os expoentes encontrados na primeira modificação foram $\beta = 0.27(2)$ e $\gamma = 0.49(3)$ e os expoentes na rede triangular foram $\beta = 0.28(2)$ e $\gamma = 0.49(3)$. Estes resultados levam-nos a concluir que esses expoentes são universais, ao contrário do relatado por Liang e Kadanoff.

A transição morfológica pode também ser caracterizada pelo raio característico ξ definido na equação 6.1. Usando o método massa-raio, podemos determinar a massa $M(r)$ como uma função de r . A curva de $M(r)$ contra r apresenta uma mudança suave determinando a transição do regime de escala do DLA para o BA. Na figura 6.12(a) mostramos uma curva de $M(r)$ para $\lambda = 0.9$, bem como os ajustes usando $M(r) \sim r^{d_f}$ com $d_f = 1.71$ na região de r pequeno e $d_f = 2.0$ na região de r grande. O comprimento característico ξ foi obtido a partir do ponto onde as retas se cruzam, conforme mostrado nessa figura. Na figura 6.12(b) mostramos o raio característico como função da distância do ponto de transição. O comprimento diverge em $\lambda = 1$ seguindo uma lei de potência

$$\xi \sim |1 - \lambda|^{-\nu} \quad (6.6)$$

com $\nu = 0.61(1)$. Mostramos também na figura 6.12(b) que a massa no ponto de cruzamento diverge como

$$M_\xi \sim |1 - \lambda|^{-\alpha} \quad (6.7)$$

com $\alpha = 0.97(2)$. Na figura 6.13, mostramos o colapso das curvas obtidas para diferentes valores de λ . Esse colapso foi obtido construindo o gráfico $M(r)/|1 - \lambda|^{-\alpha}$ em função de $r/|1 - \lambda|^{-\nu}$ considerando a hipótese de escala

$$M(r) = M_\xi f\left(\frac{r}{\xi}\right), \quad (6.8)$$

em que a função de escala $f(x)$ cresce com uma lei de potência dada por $x^{1.70}$ para $x \ll 1$ e x^2 se $x \gg 1$, ou seja, as dimensões fractais dos agregados do DLA e BA, respectivamente.

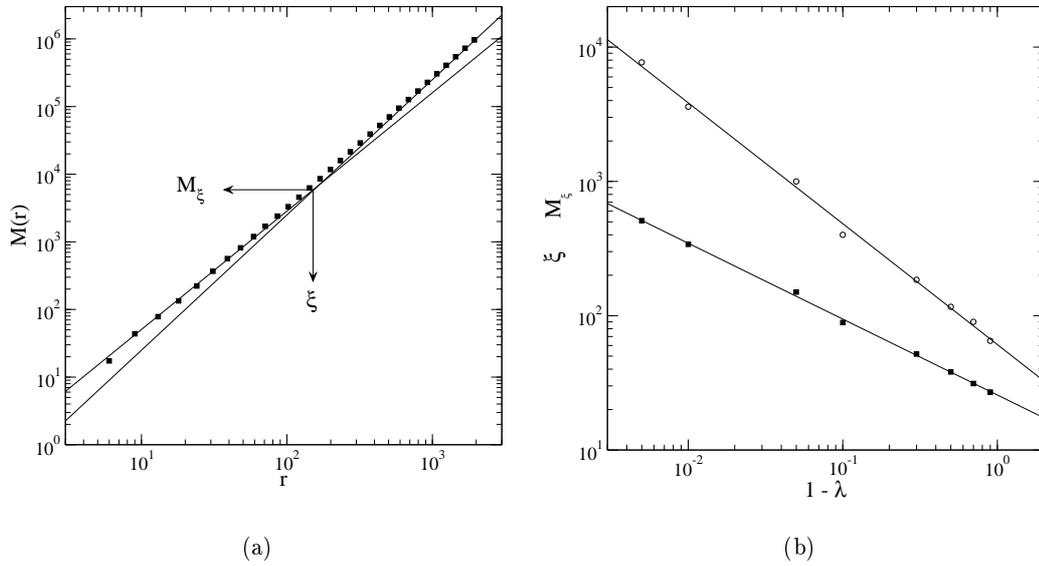


Figura 6.12: (a) Ilustração da determinação do tamanho característico na transição entre os regimes de escala DLA e BA para $\lambda = 0.90$. As linhas retas representam as inclinações 1.71 e 2, i.e., a dimensão fractal para os modelos DLA e BA, respectivamente. (b) O comprimento característico (quadrados) e a massa correspondente (círculos) como funções da distância ao ponto de transição. Estes resultados foram obtidos para $L = 5 \times 10^3$.

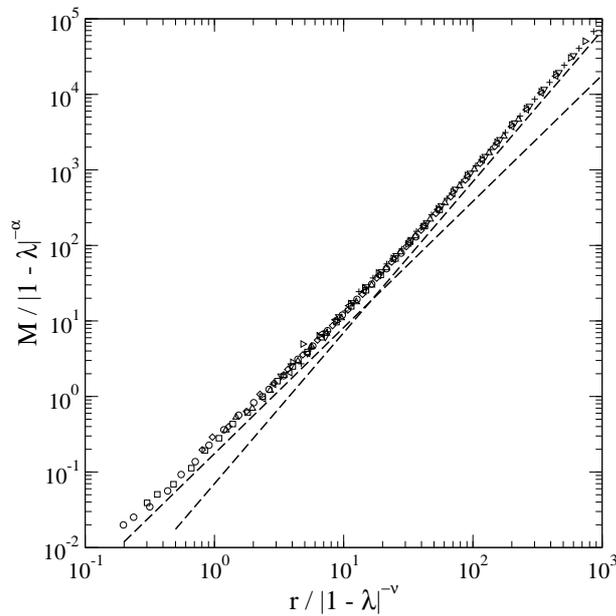


Figura 6.13: Colapso das curvas obtidas para agregados usando vários valores de λ (0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 0.95, 0.99 e 0.995). Os expoentes $\nu = 0.60$ e $\alpha = 0.97$ foram usados para obter os colapsos. As retas tracejadas representam as inclinações 1.7 e 2.

6.5.3 Relações de Escala

Note que a equação (6.4) descreve o comportamento da densidade média quando $r \gtrsim \xi$. Assim, usando as equações (6.4) a (6.6), encontramos que a densidade média no tamanho característico pode ser escrita como

$$\overline{\rho_\xi} = A_1|1 - \lambda|^\beta + A_2|1 - \lambda|^{\nu\gamma} \quad (6.9)$$

em que A_1 e A_2 são constantes. Mas a densidade média no ponto de *crossover* também pode ser escrita como

$$\overline{\rho_\xi} \approx \frac{M_\xi}{\xi^2} \propto |1 - \lambda|^{2\nu - \alpha}. \quad (6.10)$$

Comparando as equações (6.9) e (6.10), as relações

$$\beta = \nu\gamma, \quad \text{e} \quad \beta = 2\nu - \alpha \quad (6.11)$$

devem ser satisfeitas para que elas sejam consistentes. Assim, o número de expoentes críticos independentes fica reduzido a 2. Usando os expoentes obtidos para $L = 5000$ encontramos $\nu\gamma = 0.28(2)$ e $2\nu - \alpha = 0.25(3)$ enquanto $\beta = 0.27(1)$. As diferenças entre esses valores encontram-se dentro das margens de erro fornecidas dentro dos parênteses. Acreditamos que as incertezas encontradas são originadas da dificuldade na determinação precisa do tamanho característico.

6.6 Transição na Caminhada

A transição do modelo DLA para BA está associada à mudança na dimensão das caminhadas de $d = 2$, em comprimentos curtos, para $d = 1$, em comprimentos grandes. Para determinar essa transição na caminhada, podemos considerar a equação (6.2) com a tendência na direção $\phi = 0$ e a condição inicial dada por $x_0 = y_0 = 0$. Depois de n passos, o deslocamento médio de um caminhante é dado por

$$\langle r_n \rangle = \sqrt{\langle x_n \rangle^2 + \langle y_n \rangle^2}, \quad (6.12)$$

em que

$$\langle x_n \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \cos(\lambda\theta_i) \rangle \quad (6.13a)$$

$$\langle y_n \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \text{sen}(\lambda\theta_i) \rangle, \quad (6.13b)$$

e a média do quadrado do deslocamento é

$$\langle r_n^2 \rangle = \langle x_n^2 \rangle + \langle y_n^2 \rangle \quad (6.14)$$

em que,

$$\langle x_n^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle \cos(\lambda\theta_i) \cos(\lambda\theta_j) \rangle \quad (6.15a)$$

$$\langle y_n^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle \text{sen}(\lambda\theta_i) \text{sen}(\lambda\theta_j) \rangle. \quad (6.15b)$$

Considerando a coordenada x do caminhante, obtemos

$$\langle \cos(\lambda\theta_i) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(\lambda\theta) d\theta = \frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda}. \quad (6.16)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \cos(\lambda\theta_i) \cos(\lambda\theta_j) \rangle &= \left[\frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \right]^2 (1 - \delta_{ij}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{\text{sen}(2\pi\lambda)}{2\pi\lambda} + 1 \right] \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

em que δ_{ij} é a função delta de Kronecker. Aqui usamos que:

$$\langle \cos(\lambda\theta_i) \cos(\lambda\theta_j) \rangle = \begin{cases} \langle \cos^2(\lambda\theta_i) \rangle, & \text{se } i = j \\ \langle \cos(\lambda\theta_i) \cos(\lambda\theta_j) \rangle, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

bem como

$$\langle \cos^2(\lambda\theta_i) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2(\lambda\theta) d\theta = \frac{1}{2} + \frac{\text{sen}(2\pi\lambda)}{4\pi\lambda}$$

e

$$\langle \cos(\lambda\theta_i) \cos(\lambda\theta_j) \rangle = \langle \cos(\lambda\theta_i) \rangle \langle \cos(\lambda\theta_j) \rangle = \left[\frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \right]^2$$

Substituindo as equações (6.16) e (6.17) nas equações (6.13a) e (6.15a), respectivamente, encontramos

$$\langle x_n \rangle = n \frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \quad (6.18)$$

e

$$\langle x_n^2 \rangle = n \left\{ (n-1) \left[\frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\text{sen}(2\pi\lambda)}{2\pi\lambda} \right] \right\}, \quad (6.19)$$

Utilizando uma análise semelhante para a coordenada y , podemos obter

$$\langle y_n \rangle = 0 \quad (6.20)$$

e

$$\langle y_n^2 \rangle = n \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\text{sen}(2\pi\lambda)}{2\pi\lambda} \right]. \quad (6.21)$$

Finalmente, o deslocamento médio de um caminhante é

$$\langle r_n \rangle = n \frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \quad (6.22)$$

e a variância, que é dada por,

$$\sigma^2(n) = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 \quad (6.23)$$

em que $\sigma_x^2(n) = \langle x_n^2 \rangle - \langle x_n \rangle^2$ e $\sigma_y^2(n) = \langle y_n^2 \rangle - \langle y_n \rangle^2$, fica

$$\sigma(n) = n^{1/2} \left\{ 1 - \left[\frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (6.24)$$

A transição na dimensão da caminhada, de $d = 2$ em tempos curtos para $d = 1$ em tempos longos, ocorre quando $\langle r_n \rangle \sim \sigma(n)$. Usando as equações (6.22) e (6.24), podemos obter uma estimativa do número característico \mathcal{N} de passos necessários para ocorrer o *crossover*

$$\mathcal{N} = \left[\frac{\pi\lambda}{\text{sen}(\pi\lambda)} \right]^2 - 1. \quad (6.25)$$

Assim, o comprimento característico da transição é

$$\xi_w = \langle r_{\mathcal{N}} \rangle = \frac{\pi\lambda}{\text{sen}(\pi\lambda)} - \frac{\text{sen}(\pi\lambda)}{\pi\lambda}. \quad (6.26)$$

Mostramos na figura (6.14), ξ_w como uma função de $1 - \lambda$. Expandindo a equação (6.26) em torno de $\lambda = 1$, encontramos $\xi_w \sim |1 - \lambda|^{-1}$. Assim, apesar da transição entre os modelos DLA e BA ocorrer devido à transição na caminhada, os comprimentos característicos dos agregados e das caminhadas não são proporcionais.

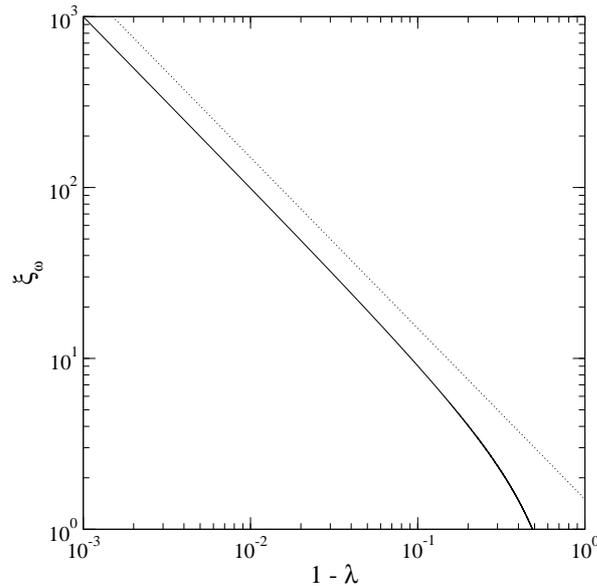


Figura 6.14: Comprimento característico da transição ξ_w como uma função de $1 - \lambda$. A linha pontilhada representa uma reta com inclinação -1 .

6.7 Conclusões

Neste capítulo, estudamos a transição morfológica entre os modelos BA e DLA através de um modelo no qual as caminhadas aleatórias do modelo DLA foram trocadas por caminhadas aleatórias com tendências em direções aleatórias. A aleatoriedade nas caminhadas foi controlada por um parâmetro $\lambda \in [0, 1]$ que fornece o modelo BA (quando $\lambda = 0$) e o modelo DLA (quando $\lambda = 1$). Apresentamos também uma estratégia de otimização que permite a análise em larga escala.

Para $\lambda < 1$, os agregados são fractais em escalas de comprimento pequenas mas deixam de ser em escalas grandes. A transição entre os regimes de escala do DLA e BA foi determinada usando o comprimento característico ξ que diverge quando $\lambda \rightarrow 1$ seguindo uma lei de potência $\xi \sim |1 - \lambda|^\nu$, com expoente $\nu = 0.61(1)$, enquanto a massa do agregado no ponto de cruzamento segue a relação $M_\xi \sim |1 - \lambda|^{-\alpha}$, com $\alpha = 0.97(2)$. A densidade média dentro do agregado atinge um valor assintótico $\rho_0 \sim |1 - \lambda|^\beta$, em que $\beta = 0.26(1)$. Além disso, esta aproximação é lenta e segue um decaimento em lei de potência com um expoente universal $\gamma = 0.46(2)$ independente de λ . Estes expoentes obedecem as relações de escala $\beta = \nu\gamma$ e $\beta = 2\nu - \alpha$. Diferentes versões do nosso modelo foram usadas para verificar a universalidade dos expoentes γ e β e em todos os casos encontramos valores muito próximos. Portanto, podemos concluir que esses expoentes são universais, ao contrário do relatado por Liang e Kadanoff [34].

Capítulo 7

Estudo da Anisotropia em um Modelo DLA Generalizado

7.1 Introdução

Os agregados gerados pelo modelo DLA na rede são muito sensíveis a anisotropia imposta por ela [7, 11]. Essa anisotropia está presente em outros processos como, por exemplo, o modelo de Eden [71]. Um procedimento amplamente utilizado para revelar a anisotropia nos agregados é a redução de ruído, que consiste em associar um contador a cada sítio vazio da rede. Sempre que um sítio é escolhido para crescer, o seu contador é acrescido de uma unidade. Um sítio vazio somente é ocupado quando o seu contador alcança um valor M . Na figura 7.1, mostramos agregados gerados pelo modelo DLA em uma rede quadrada usando diferentes valores de M . Podemos observar que o efeito da anisotropia torna-se mais evidente à medida que o parâmetro de redução de ruído é aumentado.

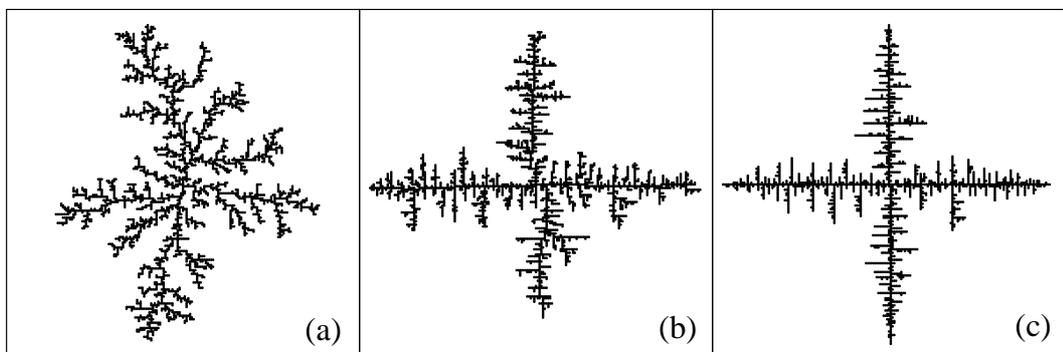


Figura 7.1: Padrões do modelo DLA obtidos com redução de ruído em redes quadradas. Usamos redes de tamanho $L = 200$ e $M = 1$ em (a), $M = 2$ em (b) e $M = 16$ em (c). O número de partículas em cada agregado varia de 1900 (para $M = 16$) a 2800 (para $M = 1$).

Recentemente Bogoyavlenskiy [26] propôs uma regra probabilística de agregação para o modelo DLA com o objetivo de remover a anisotropia dos agregados obtidos em redes quadradas. A regra é definida da seguinte maneira: Quando um caminhante alcança um sítio vazio vizinho ao agregado, ele irá fixar-se neste sítio permanentemente com uma probabilidade p_k proporcional ao quadrado do número k de vizinhos ocupados do caminhante. Quando essa condição não é satisfeita, ou seja, não ocorre agregação, a partícula é excluída da simulação e uma nova caminhada é iniciada. Em tal trabalho, três procedimentos foram usados por Bogoyavlenskiy para testar a validade do algoritmo: (i) o uso da técnica de redução de ruído com $M \leq 2^4$; (ii) a determinação da distribuição angular da densidade de partículas; e (iii) simulação em larga escala (agregados com 10^5 partículas). Nos itens (ii) e (iii), agregados sem redução de ruído ($M = 1$) foram gerados. Esta idéia foi baseada em um trabalho anterior do mesmo autor, no qual foi verificado que uma probabilidade de agregação p proporcional ao quadrado da densidade média de partículas ρ é uma regra que gera padrões isotrópicos em uma versão quase contínua do modelo DLA [90]. Desvios dessa regra ($p \propto \rho^\alpha$ com $\alpha \neq 2$) resultam em padrões anisotrópicos com crescimento preferencial ao longo das direções axial, se $\alpha < 2$, ou diagonal, se $\alpha > 2$.

Neste capítulo, utilizamos o algoritmo de Bogoyavlenskiy para crescer agregados do DLA nas redes quadrada e triangular. Analisamos esse algoritmo usando simulações em larga escala e a técnica de redução de ruído. Em simulações de larga escala encontramos que os agregados gerados com o algoritmo de Bogoyavlenskiy possuem a anisotropia usual da rede quadrada. Além disso, quando usamos valores grandes do parâmetro M observamos que o algoritmo de Bogoyavlenskiy não gera estruturas isotrópicas, mas apenas uma rotação da anisotropia e um aumento da espessura dos capilares dos padrões. Com base nos resultados dessa análise, propomos uma generalização desse algoritmo na qual a probabilidade de crescimento é proporcional a uma potência ν do número de vizinhos ocupados [25].

7.2 Redução de Ruído no Algoritmo de Bogoyavlenskiy

Conforme discutido anteriormente, no modelo DLA original, proposto por Witten e Sander [10], as partículas são liberadas, uma por vez, em pontos distantes do agregado e executam uma caminhada aleatória na rede quadrada. Se uma partícula encontra um sítio vizinho do agregado ela se fixa irreversivelmente a ele. Quando ela alcança um raio r_k muito distante dele, ela é descartada. Assumimos como raio de lançamento e descarte, $r_l = r_{max} + 5$ e $r_k = 100r_{max}$, respectivamente (r_{max} é a distância máxima ao centro da rede das partículas pertencentes ao agregado). Uma vez que o algoritmo original do modelo DLA é muito ineficiente, a análise com redução de ruído para valores de M grandes se torna proibitiva mesmo para sistemas pequenos. Portanto, é necessário o uso dos métodos descritos na seção 2.2.1

para otimizar o algoritmo.

No algoritmo de Bogoyavlenskiy a regra de agregação probabilística é dada por

$$p_k = \left(\frac{k}{3}\right)^2, \quad (7.1)$$

em que $k = 1, 2$ ou 3 é o número de vizinhos ocupados do caminhante ao encontrar o agregado. Quando essa probabilidade não é satisfeita, o caminhante é descartado e uma nova caminhada é iniciada. Na figura 7.2, mostramos padrões obtidos com redução de ruído. Estes padrões sugerem a ausência da anisotropia observada em agregados obtidos com o algoritmo original (figura 7.1). De fato, quando comparamos o padrão da figura 7.2(d) com o da 7.1(c), nos quais $M = 2^4$, podemos ser induzidos a concluir que o procedimento de Bogoyavlenskiy obteve sucesso. Entretanto, quando o parâmetro de redução de ruído é aumentado, como no caso dos padrões da figura 7.3, podemos observar claramente que as diagonais possuem crescimento preferencial. No limite de M muito grande (ruído nulo), uma estrutura de quatro pontas com um ângulo de rotação de 45° em relação à direção axial é encontrada. Portanto, com base nesses resultados concluimos que o algoritmo de Bogoyavlenskiy não remove a anisotropia das estruturas obtidas. Na verdade, ele apenas gera um aumento da espessura dos capilares dos agregados e uma rotação da direção de anisotropia.

A origem física dessa rotação pode ser compreendida através do seguinte argumento. Na rede quadrada, o efeito da anisotropia é aumentar a probabilidade de crescimento nas

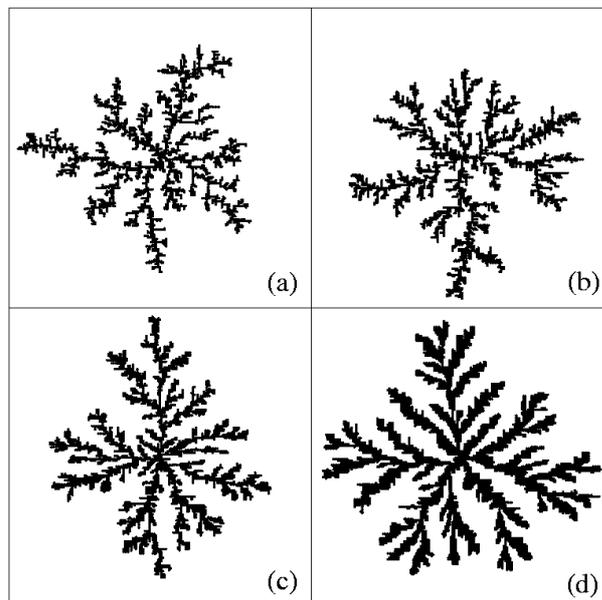


Figura 7.2: Agregados gerados na rede quadrada usando as regras de crescimento de Bogoyavlenskiy e valores diferentes de M . (a) $M = 2^0$ (sem redução de ruído), (b) $M = 2^1$, (c) $M = 2^2$, e (d) $M = 2^4$. O tamanho da rede é $L = 200$ e o número de partículas varia de 3000 ($M = 2^0$) a 7000 ($M = 2^4$). Estes valores de M foram os mesmos usados por Bogoyavlenskiy [26].

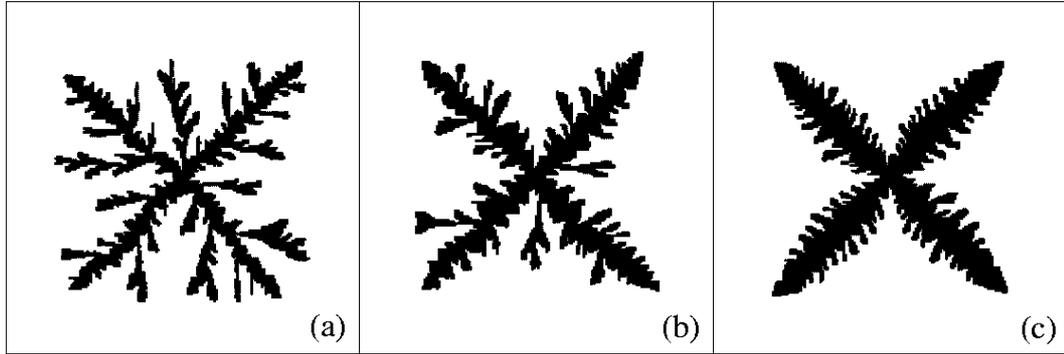


Figura 7.3: Agregados gerados na rede quadrada usando as regras de crescimento de Bogoyavlenskiy. Os valores de M usados foram: (a) $M = 2^5$, (b) $M = 2^6$ e (c) $M = 2^8$. O tamanho das redes é $L = 200$.

direções axiais. Quando usamos um algoritmo com probabilidade de agregação que aumenta com o número de vizinhos ocupados, o crescimento de sítios com dois e três vizinhos ocupados é favorecido. Devido à morfologia ramificada dos agregados do DLA, sítios vazios com três vizinhos ocupados são muito mais raros que aqueles com um ou dois vizinhos. Assim, o resultado efetivo desta regra é aumentar a possibilidade de crescimento de sítios com dois vizinhos ocupados, e conseqüentemente, aumentar a probabilidade de crescimento nas direções diagonais. Se a probabilidade de crescimento de sítios com dois vizinhos ocupados torna-se maior que a daqueles com um vizinho ocupado, a rotação da direção de anisotropia emerge.

O ângulo de rotação da direção da anisotropia depende da estrutura da rede como pode ser observado na figura 7.4. Nesta figura, mostramos agregados obtidos usando o modelo original do DLA e o algoritmo de Bogoyavlenskiy em uma rede triangular. A probabilidade de agregação do algoritmo de Bogoyavlenskiy na rede triangular é dada por

$$p_k = \left(\frac{k}{5}\right)^2, \quad (7.2)$$

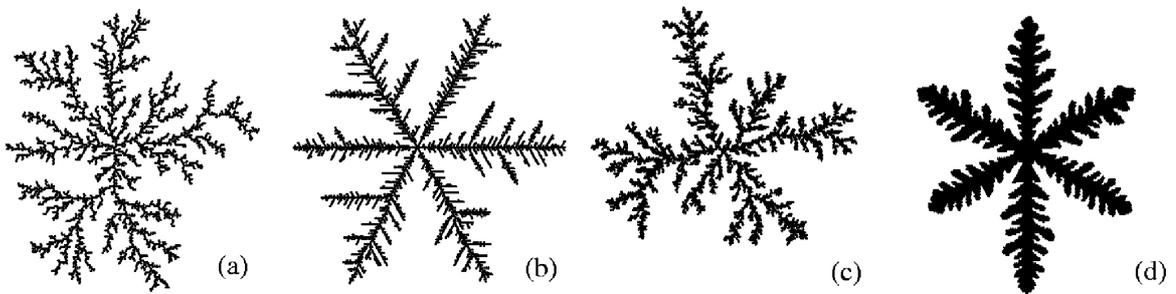


Figura 7.4: Agregados obtidos na rede triangular com o algoritmo original – ((a) e (b)) – e com o algoritmo de Bogoyavlenskiy – ((c) e (d)). O parâmetro de redução de ruído $M = 2$ foi usado em (a) e (c), enquanto $M = 2^8$ foi usado em (b) e (d). Em todos os casos usamos redes de tamanho $L = 200$.

em que $k = 1, 2, \dots, 5$. Na figura 7.4, como no caso da rede quadrada, podemos observar que o efeito do algoritmo de Bogoyavlenskiy é aumentar a capilaridade dos ramos dos agregados e gerar uma rotação na direção de anisotropia que, neste caso, é de 30° . No limite de ruído nulo, os padrões são caracterizados por uma estrutura regular de seis ramos principais.

Na figura 7.5 mostramos agregados de larga escala gerados usando o modelo DLA original e o algoritmo de Bogoyavlenskiy. Como no trabalho original de Bogoyavlenskiy [26], não verificamos a anisotropia em agregados contendo aproximadamente 10^5 partículas gerados sem redução de ruído. De fato, quando comparamos os agregados de (a) e (b), o procedimento de Bogoyavlenskiy parece remover a anisotropia. Entretanto, quando o agregado possui um número maior de partículas, como no caso do agregado da figura 7.5(c) que possui aproximadamente 10^6 partículas, a anisotropia usual começa a ficar evidente.

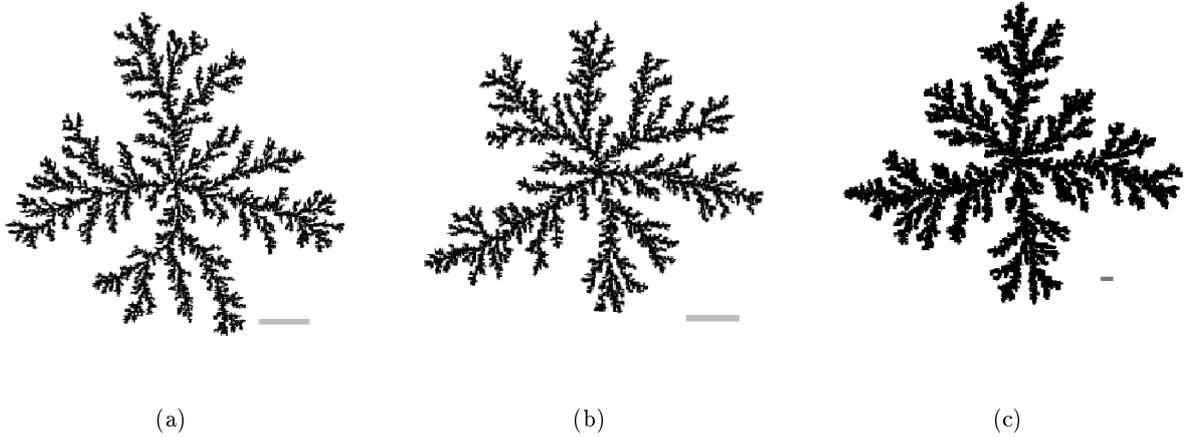


Figura 7.5: (a) Agregado com 10^5 partículas gerado com o modelo DLA e agregados gerados com o algoritmo de Bogoyavlenskiy com (b) 10^5 e (c) 10^6 partículas. A linha horizontal próxima aos agregados corresponde a 200 unidades de rede nos três casos. O agregado em (c) é a continuação da simulação mostrada em (b).

7.3 Algoritmo Generalizado

As estruturas distintas observadas em agregados gerados pelo modelo DLA e pelo algoritmo de Bogoyavlenskiy no limite de ruído nulo sugerem que este procedimento pode ser generalizado. Nós modificamos esse algoritmo definindo uma probabilidade de agregação proporcional a uma potência do número de vizinhos ocupados, ou seja,

$$p_k = \left(\frac{k}{n}\right)^\nu, \quad (7.3)$$

em que $k = 1, 2, \dots, n-1$, com n sendo o número de coordenação da rede e ν um parâmetro de generalização. Para $\nu = 0$ recuperamos o modelo DLA original e, quando $\nu = 2$, o algoritmo de Bogoyavlenskiy. Esperamos um valor crítico de $\nu \in (0, 2)$ delimitando estes regimes. Esta

regra de agregação é similar a uma usada em uma modificação do DLA investigada por Batchelor e Henry [75]. Neste modelo, que foi estudado na rede quadrada, a probabilidade de agregação em um sítio com k vizinhos ocupados é dada por $p_k = r^{3-k}$, em que $r \in (0, 1]$ é um parâmetro. Note que, nesse modelo, o número de vizinhos ocupados aparece na potência que define a probabilidade de crescimento, diferentemente de nossa generalização, em que definimos a probabilidade como uma potência de k . O limite de ruído nulo do modelo revela uma rica variedade de morfologias que obedecem a uma relação que não é trivial com o parâmetro r .

Na figura 7.6(a)-(c) mostramos agregados gerados com três valores distintos de ν em uma rede quadrada e alta redução de ruído. Para valores pequenos de ν , as morfologias possuem a anisotropia usual da rede quadrada. Quando o valor de ν é aumentado, os agregados exibem pequenos ramos na direção diagonal coexistindo com a estrutura de quatro pontas de 7.6(a). Para valores maiores de ν , as pequenas pontas tornam-se mais evidentes e acima de um valor crítico ν_c a anisotropia diagonal torna-se dominante (7.6(c)). Simulações com $L = 200$ e $M = 2^{13}$ mostram que o valor crítico de ν está no intervalo $1.39 < \nu_c < 1.40$. Portanto, a melhor estimativa que pode ser feita é $\nu_c = 1.395 \pm 0.005$. O efeito do parâmetro ν na morfologia dos agregados obtidos na rede triangular é mostrado nas figuras 7.6(d)-(f). Mesmo usando uma redução de ruído dezesseis vezes maior que a usada na rede quadrada ($M = 2^{17}$), os padrões obtidos não apresentam estruturas tão regulares quanto as observadas na primeira rede. Estas simulações indicam que o valor crítico de ν encontra-se no intervalo $0.81 < \nu < 0.83$. Assim, a nossa estimativa é $\nu_c = 0.82 \pm 0.01$.

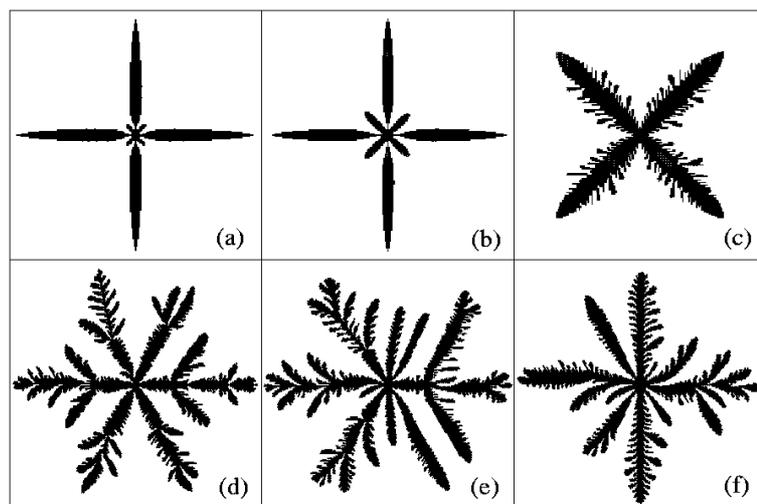


Figura 7.6: Agregados do modelo DLA obtidos com o algoritmo generalizado. Usamos para redução de ruído $M = 2^{13}$ e $M = 2^{17}$ para as redes quadrada ((a)-(c)) e triangular ((d)-(f)), respectivamente. Os parâmetros de generalização usados foram (a) $\nu = 1.10$, (b) $\nu = 1.36$, (c) $\nu = 1.40$, (d) $\nu = 0.77$, (e) $\nu = 0.80$ e (f) $\nu = 0.83$.

Na figura 7.7 mostramos um diagrama morfológico obtido para vários valores de ν e M . Para gerar esses agregados utilizamos redes quadradas de tamanho $L = 2000$. A relação entre os parâmetros ν do algoritmo generalizado e M da redução de ruído não é trivial. Quando o valor de ν é baixo, por exemplo para $\nu = 1.0$, a anisotropia usual é evidente mesmo para M pequeno enquanto para ν alto, por exemplo $\nu = 4.0$, a anisotropia diagonal aparece. Além disso, um aumento no valor de M torna a anisotropia mais evidente em ambos os casos. Entretanto, para valores intermediários de ν podemos facilmente observar uma rotação na direção da anisotropia quando aumentamos o valor do parâmetro M . Por exemplo, para $\nu = 2.0$ é fácil observar que a anisotropia é a usual para M pequeno, mas a anisotropia diagonal fica evidente para valores de M grandes. Em particular, o agregado obtido para $\nu = 2.0$ e $M = 2^4$ (simulações de Bogoyavlenskiy) está próximo do ponto de transição entre as diferentes anisotropias. Para esse conjunto de parâmetros as direções axiais

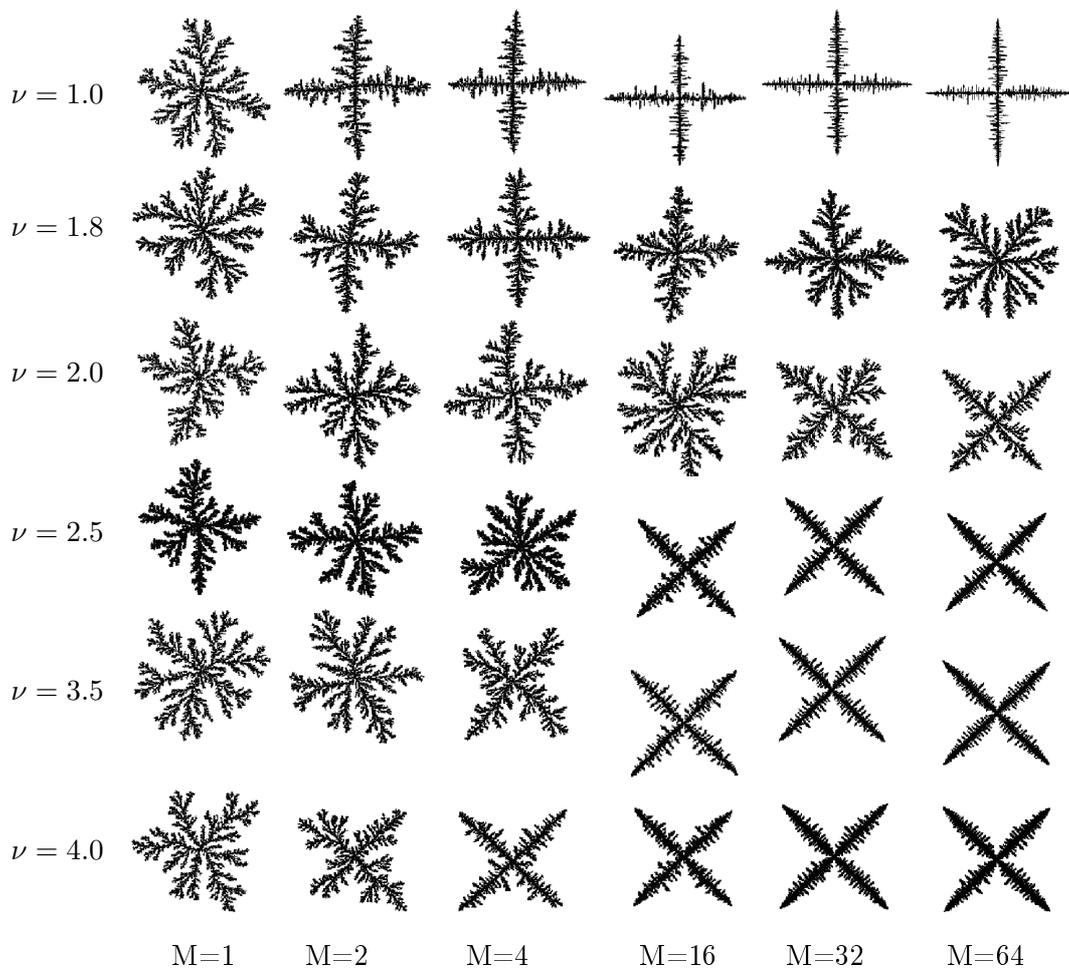


Figura 7.7: Diagrama morfológico do modelo DLA generalizado usando redes quadradas de tamanho $L = 2000$. Os valores do parâmetro de generalização são indicados a esquerda enquanto os valores do parâmetro de redução de ruído são indicados na parte de baixo. O número de partículas em cada agregado é da ordem de 10^5 .

e diagonais possuem aproximadamente a mesma probabilidade de crescimento e a estrutura é aparentemente anisotrópica. Nesse caso existe a competição entre oito direções de crescimento diferentes.

A determinação da linha de transição que separa as duas direções de anisotropia no diagrama morfológico requer uma medida quantitativa que aponte qual delas é a dominante. Devido à simetria dos agregados gerados na rede quadrada, uma medida útil nessa análise é o quarto harmônico circular [11, 91] definido como

$$\langle \cos 4\theta \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \cos 4\theta_i \quad (7.4)$$

em que o somatório é realizado sobre todas as partículas do agregado e θ_i é a posição angular da i -ésima partícula do agregado. Note que, no caso dos padrões do DLA (que possuem a anisotropia usual) as partículas encontram-se concentradas próximas aos eixos axiais. Logo, ao multiplicarmos por 4 o ângulo referente a cada uma dessas partículas todos eles são rebatidos para regiões próximas à direção \hat{x} para as quais $\cos \theta \approx 1$. Assim, para estruturas que possuem a anisotropia usual, $\langle \cos 4\theta \rangle$ assume um valor positivo. Para o caso de estruturas com a anisotropia diagonal, o produto $4\theta_i$ leva a ângulos próximos à direção $-\hat{x}$, em que $\cos \theta \approx -1$. Assim, para estruturas com a anisotropia diagonal, $\langle \cos 4\theta \rangle$ assume um valor negativo. Finalmente, para estruturas isotrópicas e também para aquelas com uma mistura equiponderada das duas direções de anisotropia (axial e diagonal), encontramos $\langle \cos 4\theta \rangle = 0$.

Na figura 7.8, mostramos $\langle \cos 4\theta \rangle$ como uma função do parâmetro ν para estruturas obtidas com $M = 2$ e redes de tamanhos variados. Como pode ser observado $\langle \cos 4\theta \rangle$ é positivo para valores pequenos de ν , característico da anisotropia axial, e fica negativo para valores grandes de ν onde a anisotropia diagonal é dominante. A medida $\langle \cos 4\theta \rangle$ é nula em um valor ν' para o qual as direções de anisotropia aparecem com igual peso. Usando a figura 7.8 podemos obter $\nu' = 3.0 \pm 0.1$ para $M = 2$, que é aproximadamente independente do tamanho do sistema.

Outra medida quantitativa que pode ser utilizada para determinar a linha de transição no diagrama morfológico é a transformada de Fourier da distribuição de ângulos definida por [92]

$$C_k = \left| \sum_{j=1}^N \exp(ik\theta_j) \right| \quad (7.5)$$

Devido à simetria das estruturas obtidas discutida anteriormente, usaremos a razão $R_4 = C_4/C_0$. Note que, nesse caso, $R_4 > 0$ tanto para a anisotropia usual quanto para a diagonal e $R_4 = 0$ para estruturas isotrópicas e para aquelas que possuem duas direções de anisotropia com igual peso. Na figura 7.9(a), mostramos R_4 como uma função do parâmetro ν para $M = 2$ e vários tamanhos da rede. Note que R_4 exhibe um mínimo em $\nu = \nu'$ independentemente

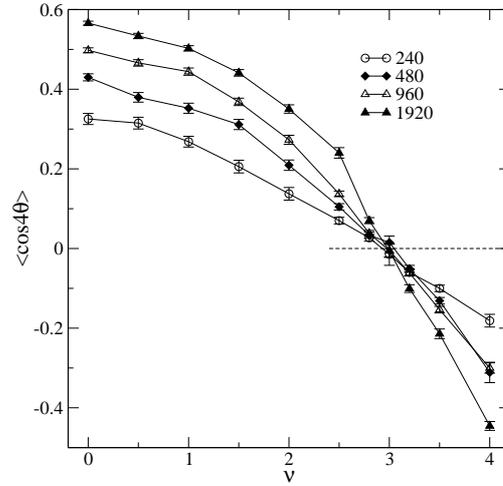


Figura 7.8: Medida da anisotropia como uma função do parâmetro ν em agregados obtidos com $M = 2$. Foi realizada uma média sobre 50 e 200 amostras para $|\nu - \nu'| > 0.5$ e $|\nu - \nu'| \leq 0.5$, respectivamente. O tamanho das redes utilizadas estão indicados na legenda.

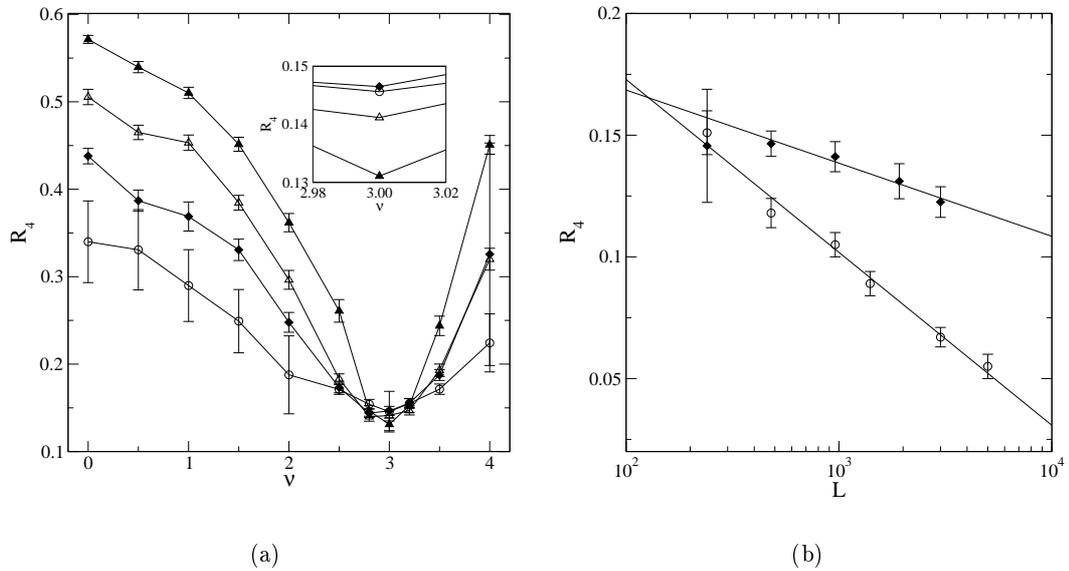


Figura 7.9: (a) Medida da anisotropia, R_4 como uma função do parâmetro ν . A mesma amostragem e tamanhos de rede da figura 7.8 foram utilizados nesses gráficos. (b) R_4 como uma função do tamanho da rede para o modelo DLA fora da rede (o) e o modelo generalizado com $\nu = \nu'$ (♦). As linhas retas são ajustes logarítmicos.

do tamanho da rede. É importante notar que o valor mínimo decresce lentamente com o tamanho do sistema (destaque da figura 7.9(a)). Podemos comparar esse mínimo com os valores obtidos em agregados do DLA fora da rede que não apresentam anisotropia. Na figura 7.9(b), mostramos R_4 como uma função do tamanho da rede para agregados obtidos com

$\nu \approx \nu'$ e com o modelo DLA fora da rede. Como pode ser visto, R_4 decresce logarithmicamente até mesmo para os agregados fora da rede. Para os agregados obtidos com valores de ν próximos do mínimo de R_4 observamos um decaimento logarithmico mais lento que o observado para os agregados fora da rede. Esse decaimento lento indica que a anisotropia das estruturas para $\nu = \nu'$ é uma mistura das anisotropias usual e diagonal. É importante observar que mesmo com $R_4 \rightarrow 0$ em $\nu = \nu'$, não podemos afirmar que os agregados são isotrópicos.

Como pode ser observado nas figuras 7.8 e 7.9(a), tanto $|\langle \cos 4\theta \rangle|$ quanto R_4 são funções crescentes do tamanho do sistema para $\nu \neq \nu'$. Esse crescimento concorda com o fato que a anisotropia nos agregados fica mais evidente à medida que seu tamanho cresce. Na tabela 7.1, mostramos os valores para ν' encontrados usando outros valores do parâmetro da redução de ruído.

M	1	4	16	32
ν'	3.4 ± 0.2	2.35 ± 0.05	1.92 ± 0.02	1.79 ± 0.01

Tabela 7.1: Valores de ν' para diferentes valores de M .

Baker e Ball [93] investigaram a anisotropia imposta pela rede em um modelo DLA no qual, além das partículas se fixarem nos primeiros vizinhos do agregado, elas também fixam-se aos segundos vizinhos com uma probabilidade p . O parâmetro p controla a direção da anisotropia. Nesse trabalho, por meio de grupo de renormalização no espaço real, eles encontraram dois pontos estáveis e um instável no diagrama de fluxo $p - \epsilon$, em que $\epsilon = 1/M$ é uma medida do ruído. O parâmetro $\epsilon = 1$ representa uma simulação sem redução de ruído e $\epsilon = 0$ uma simulação no limite sem ruído. Os pontos estáveis nesse diagrama, $(p = 0, \epsilon = 0)$ e $(p = 1, \epsilon = 0)$, representam a anisotropia axial e diagonal, respectivamente. E o ponto instável ($p^* = 0.464, \epsilon^* = 0.0064$) representa uma estrutura com oito pontas, na qual os ramos nas direções axiais e diagonais crescem com a mesma chance. Esse resultado reforça os mostrados no diagrama morfológico do algoritmo generalizado (figura 7.7), uma vez que em ambos os casos os parâmetros envolvidos controlam o crescimento na direção diagonal. Podemos ainda, construir uma representação esquemática do diagrama morfológico do modelo BDLA generalizado mostrado na figura 7.10. A região hachurada representa a incerteza ao redor da linha que separa as duas regiões do diagrama morfológico.

7.4 Conclusões

Neste capítulo estudamos o algoritmo de Bogoyavlennyi proposto para gerar agregados isotrópicos do modelo DLA na rede. Nesse algoritmo a agregação das partículas ocorre com uma probabilidade proporcional ao quadrado do número de vizinhos ocupados, ou seja, $p_k \propto$

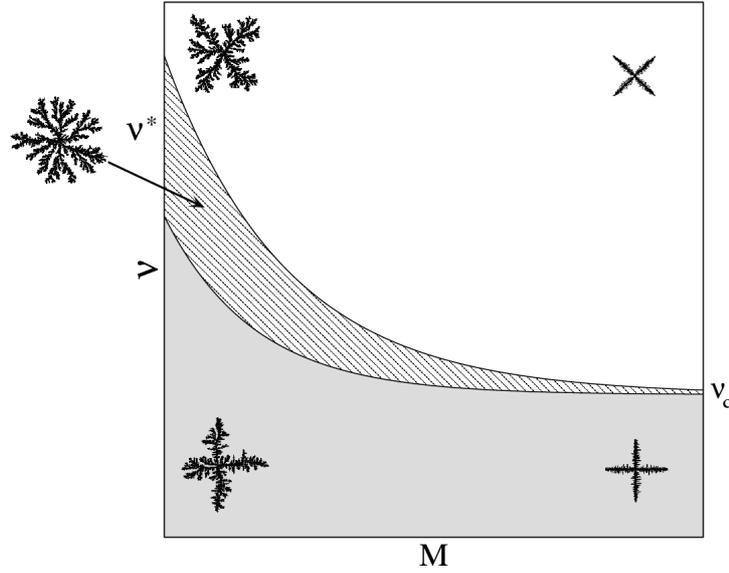


Figura 7.10: Representação esquemática do diagrama morfológico. Duas regiões são observadas nesse diagrama, na primeira, destacada em cinza, a anisotropia usual é observada e na segunda, em branco, a anisotropia diagonal. Essas regiões são separadas por uma linha na qual uma mistura das duas anisotropias (a região hachurada representa a incerteza). Estruturas típicas correspondentes às regiões distintas do diagrama são ilustradas.

k^2 . Contrariando a proposta original, nós demonstramos que o algoritmo não gera estruturas isotrópicas, mas apenas aumenta a espessura dos capilares das estruturas e gera uma rotação na direção da anisotropia. Além disso, estudamos uma generalização do algoritmo estudada por Bogoyavlenny, na qual a probabilidade de crescimento foi mudada para $p_k \propto k^\nu$, em que ν é um parâmetro de controle do modelo. Observamos que o expoente ν possui um valor crítico não universal, no qual os padrões exibem a anisotropia usual e girada para $\nu < \nu_c$ e $\nu > \nu_c$, respectivamente. Obtivemos $\nu_c = 1.395 \pm 0.005$ (0.82 ± 0.01) na rede quadrada (triangular).

A hipótese da rotação da anisotropia foi confirmada através de simulações em larga escala de agregados obtidos usando a rede quadrada. Encontramos que a relação entre a anisotropia e os parâmetros ν e M não é simples. Conforme mostrado no diagrama morfológico, quando o valor de ν é baixo, a anisotropia usual é evidente mesmo para M pequeno e a anisotropia diagonal é obtida para ν grande. Entretanto, no caso de valores intermediários de ν podemos observar uma rotação na direção da anisotropia quando aumentamos o valor do parâmetro M . Além disso, usando medidas quantitativas, determinamos o valor ν' que separa as direções axial e diagonal de anisotropia para vários valores do parâmetro M .

É importante mencionar que, para testar os resultados, todos os detalhes da implementação foram variados (por exemplo, o gerador de números aleatórios ou o uso ou não das otimizações). Em todos os casos, o mesmo resultado foi observado. Assim, como conclusão

final, podemos afirmar que a possibilidade do crescimento de agregados isotrópicos do DLA na rede ainda não foi alcançada. Na melhor das hipóteses, podemos apenas mascarar os efeitos da anisotropia incluindo uma direção de crescimento anisotrópica a mais, ou seja, usar o modelo generalizado com o valor do parâmetro $\nu' = 3.4 \pm 0.2$, ponto de *crossover* das anisotropias. Entretanto, devemos mencionar que as simulações do modelo generalizado para a obtenção de padrões com anisotropia minimizada são mais lentas que aquelas usando o modelo do DLA fora da rede.

Capítulo 8

Agregação em uma Mistura de Caminhantes Brownianos e Balísticos

8.1 Introdução

Várias versões do DLA foram estudadas, dentre elas, versões que procuram incluir uma direção preferencial na caminhada, ou por meio de uma probabilidade [82, 85, 86, 87, 25] ou de uma perturbação aleatória na trajetória balística, como aquele estudado no capítulo 6 [24]. Nestas aproximações, quando as caminhadas são observadas em escalas pequenas, elas se assemelham às caminhadas aleatórias, mas em escalas grandes elas tornam-se lineares. Como consequência os agregados obtidos nesses modelos apresentam uma mudança entre o DLA em escalas pequenas e o BA, em escalas grandes. Eles caracterizaram esta transição morfológica em função de um parâmetro que controla a aleatoriedade da caminhada.

Estudaremos neste capítulo, através de simulações cuidadosas, a transição entre os modelos DLA e BA em um modelo de agregação que inclui partículas executando caminhadas aleatórias e balísticas. Neste modelo, como nos modelos DLA e BA, as partículas são lançadas de pontos distantes do agregado. Cada partícula segue uma trajetória balística com probabilidade $P_{BA} = p$ ou uma caminhada aleatória com probabilidade $P_{DLA} = 1 - p$. A probabilidade P_{BA} é o único parâmetro do modelo e quando ela for igual a 1 recuperamos o modelo BA e, quando $P_{BA} = 0$, o modelo DLA.

8.2 Modelo e Implementação Computacional

Neste trabalho investigamos um modelo de agregação utilizando dois tipos de partículas que executam trajetórias diferentes, ou seja, não possuem componentes aleatória e balística simultaneamente como o modelo apresentado no capítulo 6. Simulações bidimensionais fora da rede são iniciadas a partir de uma semente de raio unitário colocada sobre a origem. É

importante ressaltar que as simulações foram feitas fora da rede para evitar a anisotropia observada em agregados obtidos em redes. As regras do modelo são muito simples. A cada passo, uma partícula é adicionada ao agregado usando as regras do DLA com probabilidade $1 - p$, ou usando as regras do BA com probabilidade p . Note que nestas regras estamos considerando apenas partículas que são adicionadas ao agregado e não aquelas que são eliminadas ao atingirem distâncias muito grandes.

As partículas são lançadas de um círculo de raio $r_l > r_{max}$ centrado na origem, em que r_{max} é o raio do agregado. Como no modelo DLA fora da rede [12], o agregado cresce quando um caminhante alcança a vizinhança de qualquer partícula do agregado, onde fixa-se irreversivelmente. Além disso, quando um caminhante alcança um raio de descarte $r_k \gg r_l$ centrado na origem, ele é eliminado e outro é lançado em uma nova posição sobre o círculo de lançamento. Introduziremos a variável δ pela definição $r_l = r_{max} + \delta$. Os valores de δ e r_k dependem do tipo da trajetória de uma partícula lançada. Quando consideramos um caminhante aleatório, assumimos em nossas simulações $\delta = 5$ e $r_k = 100r_{max}$. Para partículas que seguem trajetórias retilíneas, efeitos de sombra (figura 6.5, página 92) são reduzidos quando r_l é aumentado. Assim, usamos $r_l = 100r_{max} + 800$. Finalmente, uma partícula balística que alcança um círculo de raio $r_k = r_l + 2$ é descartada e uma nova é lançada.

Simulações fora da rede em larga escala com uma amostragem cuidadosa requerem um algoritmo muito eficiente. Diferentemente de simulações realizadas em redes onde é necessária apenas a implementação de otimizações nas caminhadas das partículas, em simulações fora da rede também é indispensável determinar de maneira eficiente se o caminhante alcançou a vizinhança do agregado. Para construir uma caminhada eficiente utilizamos os procedimentos descritos na seção 2.2.1. Diferentemente de simulações em redes, nas quais o agregado é armazenado em uma matriz, nas simulações fora da rede as coordenadas reais das partículas pertencentes ao agregado são armazenadas em uma lista. Dessa maneira, a verificação de quando um caminhante é vizinho do agregado e a qual partícula ele está adjacente é uma tarefa árdua. Podemos otimizar essas verificações utilizando um procedimento dividido nas duas etapas ilustradas na figura 8.1. Na primeira (figura 8.1(a)), as posições das partículas do agregado são mapeadas em uma rede quadrada auxiliar aproximando suas coordenadas reais para as coordenadas inteiras mais próximas. Os sítios correspondentes às coordenadas inteiras das partículas, seus primeiros e segundos vizinhos são ocupados (sítios destacados em cinza na figura 8.1(a)). Assim, para verificar se um caminhante está na vizinhança do agregado basta verificar na rede auxiliar se existe um sítio ocupado na vizinhança do sítio designado por suas coordenadas inteiras. A segunda etapa, consiste em utilizar uma malha auxiliar com células de tamanhos 8×8 (figura 8.1(b)), para limitar a procura de qual das partículas do agregado é a vizinha do caminhante a uma região próxima do mesmo.

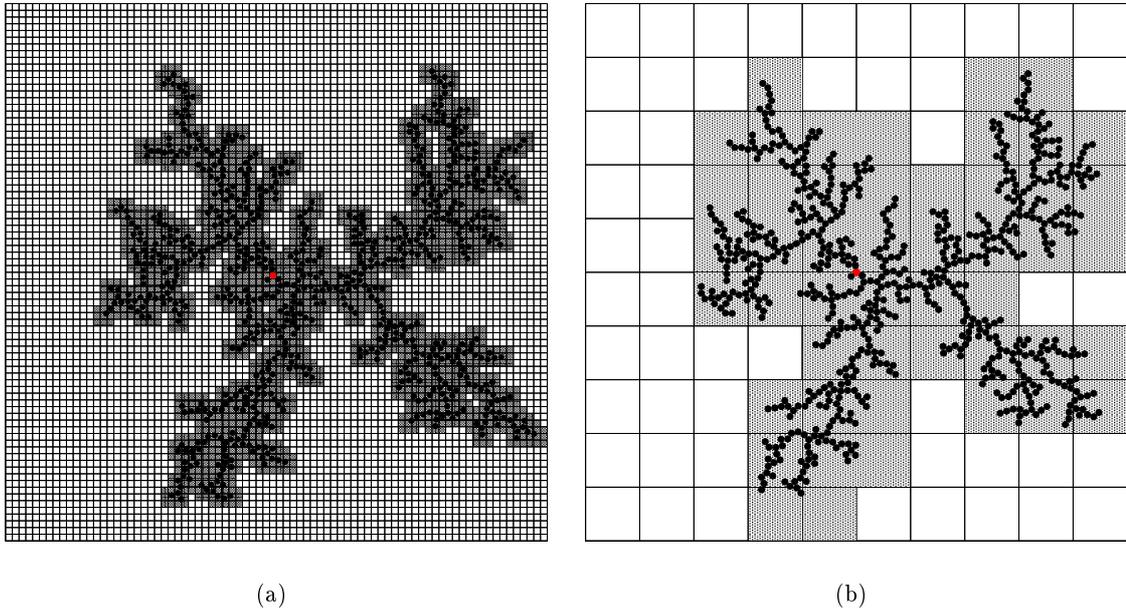


Figura 8.1: Ilustração das otimizações utilizadas para agregação de partículas. (a) Uma rede auxiliar é usada para determinar quando um caminhante é vizinho do agregado. (b) Uma malha auxiliar com células de tamanhos 8×8 é utilizada para limitar a procura das partículas do agregado a região próxima do caminhante.

8.3 Distribuições Radial e Angular de Partículas

O modelo exibe uma transição suave de padrões semelhantes àqueles gerados pelo modelo DLA para padrões semelhantes aos do BA à medida que o parâmetro p varia de 0 a 1. Na figura 8.2 são mostrados padrões obtidos para valores distintos da probabilidade p . Para $p < 0.5$, os padrões são muito similares aos obtidos pelo modelo DLA, enquanto aqueles obtidos para $p > 0.95$ são muito semelhantes aos obtidos usando o modelo BA. Note que $p = 0.5$ é um caso importante no qual metade das partículas que são agregadas usa as regras do modelo DLA e a outra metade usa as regras do modelo BA.

As propriedades de escala dos agregados obtidos foram caracterizadas pelas distribuições angular e radial das partículas, bem como pelo tamanho da zona ativa (discutida na seção 2.2.1). Utilizamos agregados bidimensionais delimitados por uma região de tamanho $10^4 \times 10^4$ e as simulações foram paradas quando os agregados alcançavam uma das bordas dessa região. A distribuição radial de partículas foi caracterizada usando a dimensão fractal e a lacunaridade [7]. A dimensão fractal d_f e a lacunaridade A foram determinadas usando os métodos da massa-raio e do raio de giração discutidos na seção 2.1.2. Para objetos auto-similares é esperado que a massa $M(r)$ obedeça uma relação em lei de potência com o raio da hiper-esfera, ou seja,

$$M(r) = A_m r^{d_f}, \quad (8.1)$$

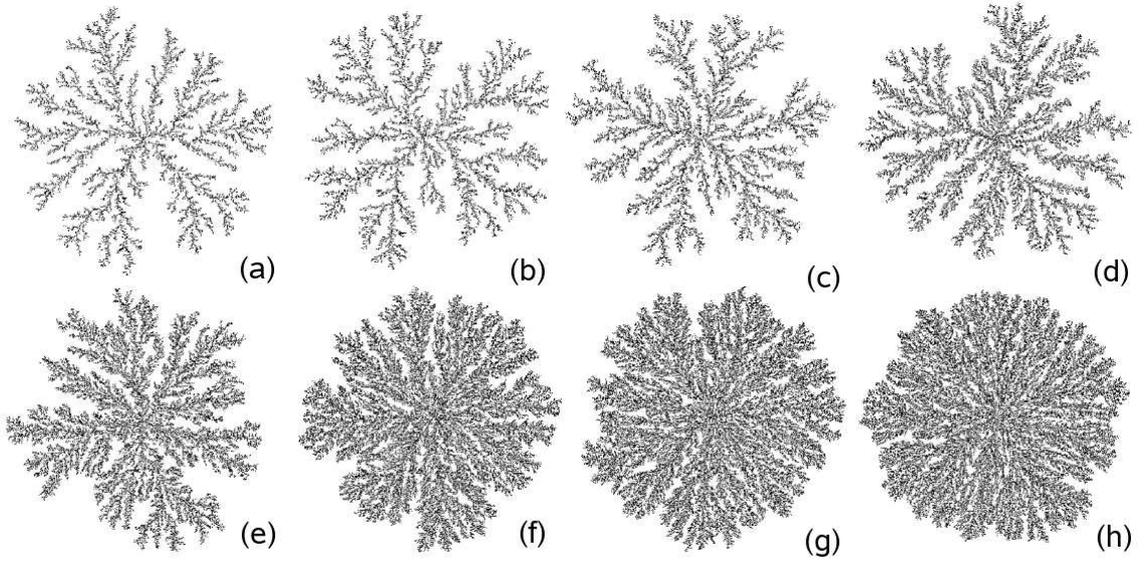


Figura 8.2: Padrões obtidos para valores distintos de p : (a) 0.1, (b) 0.3, (c) 0.5, (d) 0.7, (e) 0.9, (f) 0.95, (g) 0.99, e, (h) 0.995. Todas as simulações foram finalizadas quando o agregado alcançou a borda de uma região de tamanho 750×750 centrada na origem. O número de partículas varia de $N \simeq 3 \times 10^4$ ($p = 0.1$) a $N \simeq 1.6 \times 10^5$ ($p = 0.995$).

em que a amplitude A_m é uma medida da lacunaridade. Conforme demonstrado na literatura [94], os agregados do DLA são caracterizados por uma multi-escala, que leva a uma convergência lenta aos expoentes de escala. Entretanto, simulações de agregados de larga escala confirmam que estes agregados são assintoticamente fractais [7, 94]. O raio de giração cresce com o número de partículas do agregado de acordo com a lei de potência

$$r_g = BN^\nu, \quad (8.2)$$

em que $\nu = 1/d_f$ e B pode ser relacionado à lacunaridade usando a relação

$$A_g = \frac{1}{B^{\frac{1}{\nu}}}. \quad (8.3)$$

É bom salientar que $A_m \neq A_g$, uma vez que suas definições são diferentes, mas como veremos adiante (destaque da figura 8.3) elas exibem o mesmo comportamento, ou seja, $A_m \propto A_g$.

Na figura 8.3(a) mostramos curvas de $M(r)$ para diferentes valores de p . A inclinação aumenta continuamente de $d_f = 1.723 \pm 0.007$, para $p = 0.10$ (um valor muito próximo ao da dimensão fractal do DLA $d_f = 1.715 \pm 0.004$ [12]), até valores próximos a 2.0 quando $p \rightarrow 1$, como pode ser observado na figura 8.3(b), na qual mostramos a dimensão fractal dos agregados como uma função de p . Como pode ser visto no destaque da figura 8.3(a), a lacunaridade é uma função convexa de p com um máximo em $p \approx 0.5$, diferentemente do comportamento qualitativo observado para a dimensão fractal (uma função crescente de p). Estes resultados mostram que se o número de partículas que seguem as regras do modelo

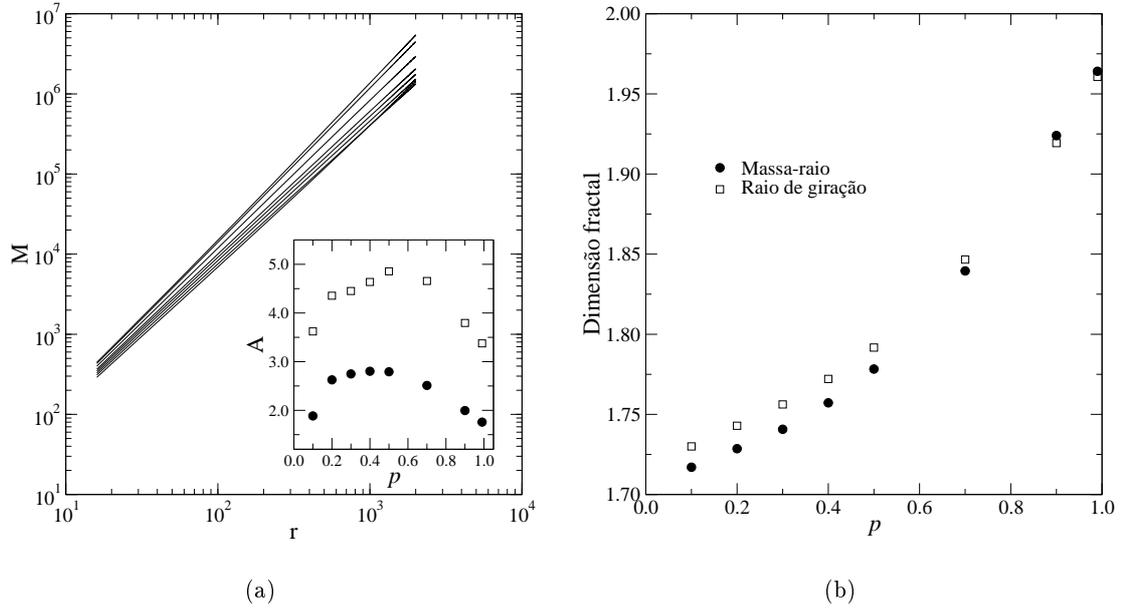


Figura 8.3: (a) Massa em função do raio para vários valores de p : 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7, 0.9 e 0.99, de baixo para cima. (b) Dimensão fractal como uma função de p determinada a partir dos métodos massa-raio (●) e do raio de giração (□). No destaque em (a), mostramos a lacunaridade como uma função de p obtida a partir dos métodos massa-raio (●) e do raio de giração (□). Para essas simulações utilizamos agregados de tamanho $L = 10^4$ e uma média sobre 500 amostras.

DLA é maior que o daquelas que seguem as regras do modelo BA ($p < 0.5$), um aumento no valor de p leva a padrões com ramos mais densos (maior dimensão fractal) mas com regiões vazias maiores (maior lacunaridade). Entretanto, quando o número de partículas que segue as regras do modelo BA excede o número daquelas do modelo DLA ($p > 0.5$), a largura dos ramos continua aumentando enquanto o tamanho dos buracos diminui quando p é aumentado. Uma explicação para tal comportamento pode ser obtida a partir da análise da largura da zona ativa como uma função de p . A largura da zona ativa pode ser visualizada usando o procedimento discutido na seção 2.2.1. Neste procedimento, depois de gerar um agregado, soltamos mais 10^4 partículas sem agrega-las e marcamos a posição em que cada caminhante encontra o agregado. Os resultados obtidos para alguns valores de p podem ser vistos na figura 8.4. Note que a espessura da zona ativa (região alcançada pelas partículas no interior do agregado) é maior quando o valor de p aproxima-se de 0.5 (figuras 8.4(c) e (d)).

Outra medida quantitativa da largura da zona ativa é o desvio padrão das posições da fração f das últimas partículas adicionadas ao agregado, ou seja,

$$\sigma^2 = \frac{1}{fN} \sum_{i=N_f}^N (r_i - \langle r \rangle)^2, \quad (8.4)$$

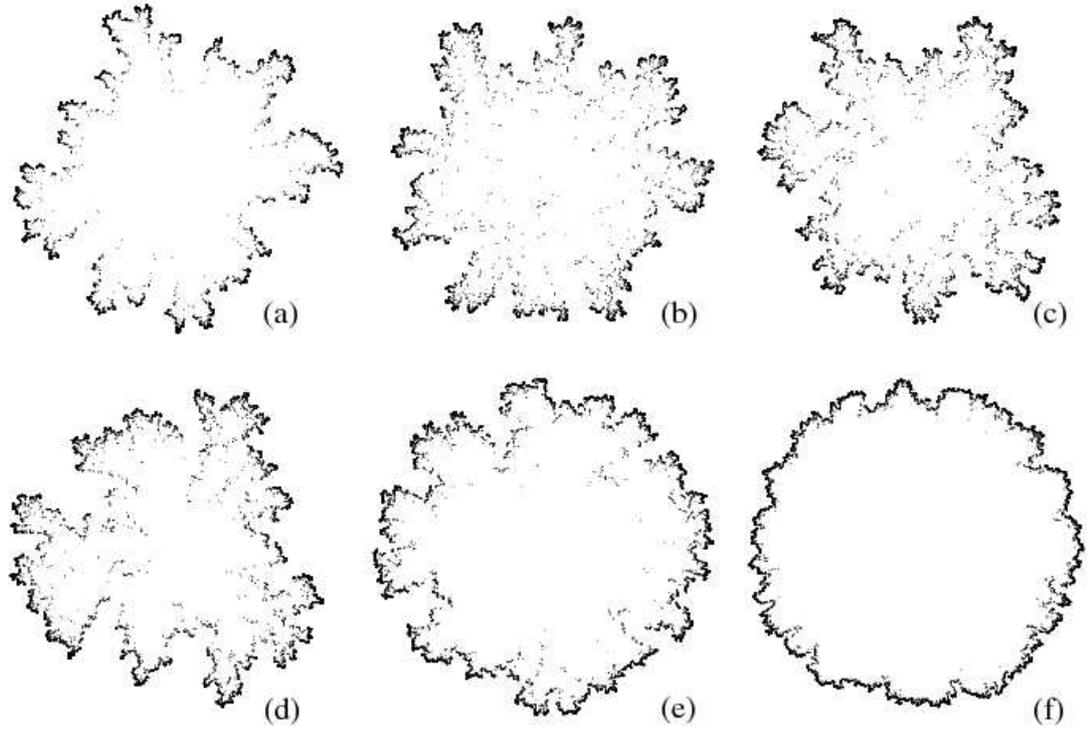


Figura 8.4: Zona ativa dos agregados obtidos para diferentes valores de p (0.0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.8 e 1.0 de (a) a (f), respectivamente).

em que $N_f = (1 - f)N$, e

$$\langle r \rangle = \frac{1}{fN} \sum_{i=N_f}^N r_i \quad (8.5)$$

é a média das posições alcançadas pela fração f das últimas partículas agregadas. Usamos $f = 0.1$ em todas as simulações. Na figura 8.5, mostramos a largura da zona ativa como uma função do número de partículas para dois valores particulares de p . Para $p < 0.5$, as simulações indicam que existe um único regime em lei de potência $\sigma \sim N^\zeta$. Entretanto, quando $p \geq 0.5$ observamos um *crossover* entre duas leis de potência, $\sigma \sim N^{\zeta'}$ para agregados pequenos e $\sigma \sim N^\zeta$ no limite de agregados grandes. No regime assintótico ($N \rightarrow \infty$), o expoente $\zeta \rightarrow \nu$ para $p \lesssim 1$ como observado para o modelo DLA [12]. Encontramos $\zeta' \approx 0.46, 0.42$ e 0.36 para $p = 0.5, 0.7$ e 0.9 , respectivamente. De fato, nossas simulações sugerem que $\zeta' \rightarrow 0.33$ à medida que $p \rightarrow 1$, em concordância com a hipótese que a interface do modelo BA pertence à classe de universalidade Kardar-Parisi-Zhang [19]. Conforme visto na seção 2.4.4, as leis de escalas em interfaces obtidas no modelo de deposição balística foram amplamente estudadas e simulações rigorosas confirmam que $\sigma \sim N^{1/3}$ [7, 9].

Uma característica muito interessante é observada no comportamento de σ como uma função de p para um raio médio fixo da zona ativa. No destaque da figura 8.5 mostramos $\sigma(r = 340)$. A largura da zona ativa é uma função convexa de p com um máximo em

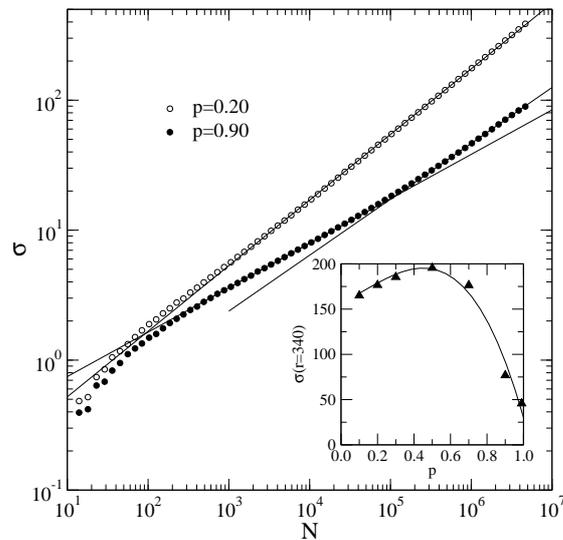


Figura 8.5: Largura da zona ativa σ como uma função do número de partículas do agregado para dois valores de p , 0.20 (\bullet) e 0.90 (\circ). As linhas contínuas são ajustes em leis de potência. No detalhe, mostramos σ como uma função de p para um raio médio da zona ativa $r \approx 340$. A linha é um ajuste cúbico usado como um guia para os olhos. Para estas simulações usamos agregados confinados a uma caixa de tamanho $10^4 \times 10^4$ com uma média realizada sobre 500 amostras.

$p = 1/2$, o que explica a dependência da lacunaridade com p . O início desse comportamento qualitativo pode ser compreendido por meio de uma análise das propriedades de blindagem nos agregados: para $p \gtrsim 0$, os agregados possuem ramos grandes de modo que os caminhantes balísticos podem alcançar as regiões mais internas dos agregados proibidas para caminhadas aleatórias. Assim, a blindagem é reduzida quando comparada com a do modelo DLA original e, conseqüentemente, a zona ativa é maior. À medida que p é aumentado, mais partículas rompem a blindagem de maneira que a zona ativa aumenta. Entretanto, se um número muito grande de partículas alcançam as regiões internas dos agregados, o tamanho dos buracos e, conseqüentemente, a zona ativa dos agregados começam a diminuir. Assim, a convexidade de σ como uma função de p está esclarecida. Intrigantemente, esta mudança no comportamento parece ocorrer quando o número de partículas que executam uma caminhada aleatória é igual ao número daquelas que executam um movimento balístico, mas não podemos fornecer uma justificativa rigorosa além das evidências numéricas.

Agregados obtidos com o modelo DLA apresentam a propriedade de multi-escala [94], *i.e.*, a dimensão dos agregados varia com o tamanho e a região de observação do mesmo. Essa propriedade foi inicialmente observada por Amitrano *et al.* [94], que analisaram a densidade $g(r, R)$ dentro de uma casca a uma distância r da semente em um agregado de raio R . Eles

encontraram que essa função satisfaz a equação

$$g(r, R) = r^{-d+D(\frac{r}{R})} f\left(\frac{r}{R}\right) \quad (8.6)$$

em que $D(x)$ é a dimensão fractal local para a casca. Recentemente, Mandelbrot *et al.* analisaram a propriedade de multi-escala dos agregados do modelo DLA sob a luz da distribuição de separação angular dos ramos [15]. Eles encontram o valor $d_f \approx 1.71$ apenas em agregados assintoticamente grandes ($M \approx 10^8$) para os quais a separação angular dos ramos é muito pequena. Pelos padrões mostrados na figura 8.2, podemos observar que a distribuição da separação angular nos agregados obtidos usando uma mistura de partículas varia com a probabilidade p . Assim outra análise que se faz importante é da distribuição angular de partículas a uma distância R do centro do agregados. Meakin e Vicsek [30] analisaram a correlação angular dos agregados do modelo DLA usando o procedimento descrito na seção 2.1.2. A função de correlação angular (equação (2.14)) fornece a probabilidade de encontrar duas partículas, sobre um círculo de raio R centrado na origem, com uma separação angular θ . Ela segue um decaimento em lei de potência para valores pequenos de θ

$$\Phi_R(\theta) \sim \theta^{-\alpha_\theta}. \quad (8.7)$$

O expoente encontrado para o DLA foi $\alpha_\theta \approx 0.41$ que é muito diferente daquele encontrado para a função de correlação entre dois pontos (equação (2.12)), $\alpha_r \approx 0.29$.

A figura 8.6 ilustra as funções de correlação angular calculadas em $R = 300$ para valores distintos de p . Em todas as curvas, $\Phi_R(\theta)$ decai como uma lei de potência para ângulos pequenos seguidos por um mínimo global e depois alcança um valor constante para ângulos grandes. Este comportamento reproduz qualitativamente o encontrado por Meakin e Vicsek [30], mas os expoentes das leis de potência decrescem com p conforme mostrado no destaque da figura 8.6, no qual α_θ e α_r , assim como a diferença entre eles $\Delta\alpha$, são mostrados como funções de p . O expoente α_r foi determinado usando a relação $\alpha_r = 2 - \bar{d}_f$, em que \bar{d}_f é a média das dimensões fractais obtidas através do método massa-raio e do raio de giração (figura 8.3(b)). A diferença $\Delta\alpha \approx 0.12$ observada para o modelo DLA decresce com p e vai rapidamente a zero para $p > 0.5$, indicando que a correlação angular cai da mesma forma que a correlação espacial entre sítios pertencentes ao agregado.

Os mínimos globais observados nas curvas, que representam uma estimativa da metade da separação angular entre dois ramos consecutivos, se deslocam para ângulos pequenos à medida que p é aumentado. Como é mostrado na figura 8.7, a extrapolação das posições dos mínimos θ_{min} sugere que seus valores vão a zero em $p = 1$ de acordo com a lei de potência $\theta_{min} \sim (1 - p)^\vartheta$, em que $\vartheta \approx 0.45$. A posição do mínimo foi determinada usando um ajuste cúbico como indicado no destaque da figura 8.7.

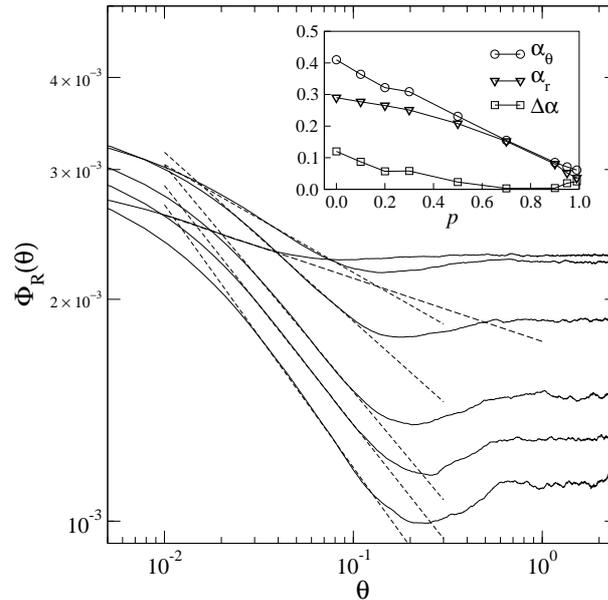


Figura 8.6: Função de correlação angular para vários valores de p : 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.7 e 0.9 (curvas de baixo para cima, respectivamente). As linhas tracejadas são ajustes em leis de potência para pequenos valores de θ . No destaque, mostramos uma comparação entre os expoentes das funções de correlação angular e radial. Utilizamos agregados limitados a uma região de tamanho 5×10^3 e Φ_R foi determinado usando $R = 300$ e $\delta R = 15$. As médias foram realizadas sobre 10^3 agregados.

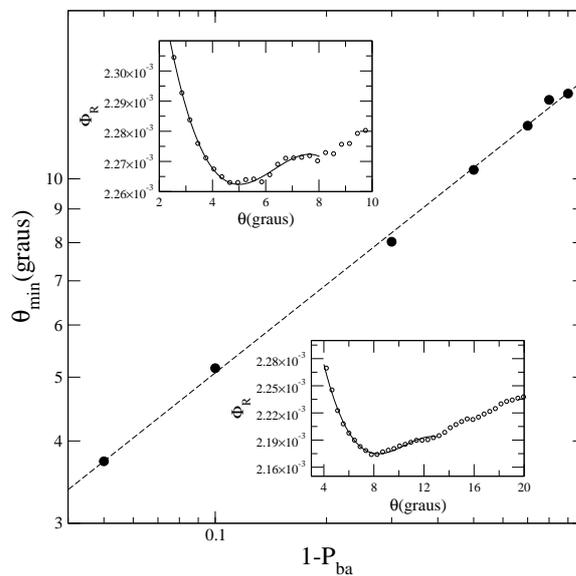


Figura 8.7: Comportamento do mínimo da função de correlação como uma função da probabilidade p . No destaque mostramos gráficos de Φ_R para as regiões próximas aos mínimos para dois valores de p : na curva de baixo $p = 0.7$ e na de cima $p = 0.9$. As linhas sólidas são ajustes cúbicos usados para determinar as posições do mínimo.

8.4 Conclusões

Neste capítulo, apresentamos um modelo de agregação no qual dois tipos de partículas são considerados: uma fração das partículas segue movimentos brownianos e a fração remanescente segue trajetórias balísticas. O modelo, que inclui os de agregação limitada por difusão e de agregação balística como casos limite, é controlado por uma probabilidade p que corresponde à fração de partículas que constituem o agregado adicionadas seguindo as regras do modelo de agregação balística. Simulações em larga escala e amostragens cuidadosas foram usadas para caracterizar as distribuições radial e angular de partículas em agregados obtidos fora da rede. Especialmente, medimos a dimensão fractal d_f , a lacunaridade, a evolução da largura da zona ativa σ e a função de correlação angular Φ_R para diferentes valores de p .

A dimensão fractal d_f cresce continuamente como uma função de p de $d_f = 1.723 \pm 0.004$ para $p = 0.1$ (um valor muito próximo ao obtido para agregados do modelo DLA) a $d_f \approx 2.0$ quando $p \rightarrow 1$ (esperado para agregados do BA). Entretanto, a lacunaridade e a largura da zona ativa para um raio fixo são funções convexas da probabilidade p com máximos próximos a $p = 1/2$. A convexidade da lacunaridade está diretamente relacionada à convexidade da largura da zona ativa, que por sua vez, pode ser explicada pela blindagem que impede que os caminhantes alcancem regiões internas dos agregados.

A função de correlação angular Φ_R determinada para $R = 300$ exibe um decaimento em lei de potência para ângulos pequenos com um expoente que é uma função decrescente de p . A diferença entre os expoentes relacionados às distribuições angular e radial observada para o modelo DLA foi obtida mas, ela decai com p e para $p > 1/2$, ela vai rapidamente a zero. As curvas Φ_R em função de θ exibem um mínimo global que representa a metade da separação entre dois ramos consecutivos. As simulações mostraram que a posição desse mínimo vai a zero quando $p \rightarrow 1$ de acordo com uma lei de potência, $\theta_{min} \sim (1 - p)^\vartheta$ com $\vartheta \approx 0.45$. Estes resultados indicam que os agregados são assintoticamente homogêneos quando $p \rightarrow 1$.

Parte IV

Conclusões e Perspectivas

Nesta tese de doutoramento estudamos leis de escala e transições em modelos de crescimento de agregados e de interfaces através de simulações computacionais. Especificamente, os trabalhos dessa tese foram divididos em duas partes. Nos capítulos 3 e 4 começamos com o estudo da classe de universalidade e *crossovers* em modelos de crescimento de interfaces. No capítulo 3 estudamos um modelo de crescimento de interfaces que possui dois ingredientes, a deposição e a difusão de partículas. Neste modelo, encontramos um crescimento em monocamada por monocamada, que antecipa um crescimento em lei de potência para taxas de deposição muito pequenas. Em $1 + 1$ dimensões, o modelo apresenta uma mudança da classe de universalidade de Mullins-Hering (MH) para a de Villain-Lai-Das Sarma (VLDS). Ao contrário de substratos unidimensionais, não encontramos esse *crossover* em $2 + 1$ dimensões – o modelo apresenta os expoentes da classe VLDS. Além disso, quando incluímos uma tendência nas caminhadas, aparecem instabilidades responsáveis pela formação de morros nas interfaces e um expoente de crescimento próximo de $1/2$. Analisando a rugosidade dentro de caixas pequenas, encontramos que as grandes flutuações nas interfaces, as paredes dos morros, são as responsáveis pela mudança no expoente de crescimento e, além disso, dentro dos morros a rugosidade não apresenta a mudança no expoente de crescimento.

No capítulo 4, estudamos uma versão modificada do modelo de Wolf-Villain (WV). Neste trabalho, investigamos o *crossover* no modelo WV pela introdução de uma probabilidade de crescimento que privilegia os sítios cujo número de ligações é maior. Mostramos que essa modificação acelera o *crossover* da classe de universalidade MH para a EW, em $1 + 1$ e $2 + 1$ dimensões. Entretanto, como essa modificação introduz uma recusa de partículas, um *crossover* para a classe de universalidade KPZ aparece.

No capítulo 5, estudamos as propriedades de escala de interfaces com simetria radial utilizando agregados obtidos pelo modelo de crescimento de Eden fora da rede e por três modelos na rede quadrada. Nessa análise, mostramos que diferentes estratégias adotadas para medir a rugosidade da interface podem levar a expoentes de crescimento diferentes. No capítulo 5, estudamos as propriedades de escala de interfaces com simetria radial. Mostramos que diferentes estratégias adotadas para medir a rugosidade da interface podem levar a expoentes de crescimento diferentes. Para o caso particular dos agregados obtidos usando o modelo de Eden fora da rede, encontramos os expoentes $\beta \approx 1/3$ e $\beta_{CM} = 0.404 \pm 0.013$ quando usamos os métodos da semente e do centro de massa da borda como origens para avaliar a rugosidade da interface, respectivamente. Além disso, mostramos que o expoente de crescimento, quando a rugosidade é medida em relação ao centro de massa do padrão, apresenta uma convergência para $1/3$. Esses comportamentos foram entendidos através do crescimento das flutuações dos centros de massa. Em particular, no caso do centro de massa da borda, as flutuações crescem mais rapidamente que as flutuações da borda.

Nos demais capítulos estudamos transições morfológicas em agregados bidimensionais.

Em particular, estudamos as generalizações do modelo de agregação limitada por difusão (DLA). No capítulo 6, estudamos a transição morfológica entre os modelos BA e DLA através de um modelo no qual as caminhadas aleatórias do modelo DLA foram substituídas por caminhadas aleatórias com tendências em direções aleatórias. Encontramos uma transição de agregados fractais (DLA) em escalas de comprimento pequenas para objetos homogêneos (BA) em escalas grandes. A transição entre os regimes de escala do DLA e BA foi determinada usando o comprimento característico ξ que diverge quando $\lambda \rightarrow 1$ seguindo uma lei de potência $\xi \sim |1 - \lambda|^\nu$, com expoente $\nu = 0.61(1)$, enquanto a massa do agregado no ponto de *crossover* segue a relação $M_\xi \sim |1 - \lambda|^{-\alpha}$, com $\alpha = 0.97(2)$.

No capítulo 7, estudamos um algoritmo proposto para gerar agregados isotrópicos do modelo DLA na rede. Nesse algoritmo a agregação das partículas ocorre com uma probabilidade proporcional ao quadrado do número de vizinhos ocupados, ou seja, $p_k \propto k^2$. Contrariando a proposta original [26], nós demonstramos que o algoritmo não gera estruturas isotrópicas, apenas aumenta a espessura dos capilares das estruturas e gera uma rotação na direção da anisotropia. Além disso, estudamos uma generalização do algoritmo, na qual a probabilidade de crescimento foi mudada para $p_k \propto k^\nu$, em que ν é um parâmetro de controle do modelo. Observamos que o expoente ν possui um valor crítico não universal, no qual os padrões exibem a anisotropia usual e girada para $\nu < \nu_c$ e $\nu > \nu_c$, respectivamente. Encontramos que a relação entre a anisotropia e os parâmetros ν e M (da redução de ruído) não é simples.

No capítulo 8, apresentamos um modelo de agregação fora da rede no qual uma fração das partículas segue movimentos brownianos e a fração restante segue trajetórias balísticas. O modelo, que inclui os de agregação limitada por difusão e de agregação balística como casos limite, é controlado por uma probabilidade p que corresponde à fração de partículas que constituem o agregado adicionadas de acordo com as regras do modelo de agregação balística. Encontramos que a dimensão fractal d_f cresce continuamente como uma função de p de $d_f = 1.723 \pm 0.004$ para $p = 0.1$ (um valor muito próximo ao obtido para agregados do modelo DLA) a $d_f \approx 2.0$ quando $p \rightarrow 1$ (esperado para agregados do BA).

Como perspectivas para trabalhos futuros baseados nessa tese de doutoramento temos:

- Uma análise cuidadosa, em tempos curtos, da formação de ilhas no modelo de crescimento de interfaces, bem como, um estudo detalhado dos modelos de crescimento de interfaces com a caminhada direcionada, apresentados no capítulo 3.
- Aplicar a modificação usada no modelo de Wolf-Villain (capítulo 4) ao modelo de Das Sarma-Tamborenea.
- Utilizar a caminhada com tendência do modelo de agregação apresentada no capítulo 6 ao modelo de agregação agregado-agregado (CCA, de *cluster-cluster aggregation*). Esse

trabalho possui como motivação o crescimento de células em cultura para o qual foi demonstrado que os agregados possuem a tendência de executar uma caminhada direcionada com pequenos desvios [95].

- Investigar as transições morfológicas dos modelos apresentados nos capítulos 6 e 8 em três dimensões.
- Aplicar técnicas de grupo de renormalização [93] ao modelo estudado no capítulo 7 para obter seu diagrama de fases.

Referências Bibliográficas

- [1] M. Matsushita, M. Sano, Y. Hayakawa, H. Honjo, e Y. Sawada, “Fractal structures of zinc metal leaves grown by electrodeposition”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pág. 286, 1984.
- [2] K. J. Måløy, J. Feder, e T. J. Ssang, “Viscous fingering fractals in porous media”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 55, pág. 2688, 1985.
- [3] M. Matsushita e H. Fujikawa, “Diffusion-limited growth in bacterial colony formation”, *Phys. A*, vol. 168, pág. 498, 1990.
- [4] F. Caserta, H. E. Stanley, W. D. Eirdred, G. Daccord, R. E. Hausman, e J. Nittman, “Physical mechanisms underlying neurite outgrowth: a quantitative analysis of neuronal shape”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, pág. 95, 1990.
- [5] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*. New York: W. H. Freeman, 1982.
- [6] J. Feder, *Fractals*. Ney York: Plenum Press, 1988.
- [7] P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium*. Cambridge: Cambridge Univerty Press, 1998.
- [8] T. Vicsek, *Fractal growth phenomena*. Singapore: World Scientific, 1992.
- [9] A. L. Barabasi e H. E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge: Cambridge Univerty Press, 1995.
- [10] T. A. Witten e L. M. Sander, “Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 47, pág. 1400, 1981.
- [11] R. C. Ball e R. M. Brady, “Large-scale lattice effect in diffusion-limited aggregation”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 18, pág. L809, 1985.
- [12] S. Tolman e P. Meakin, “Off-lattice and hypercubic-lattice models for diffusion-limited aggregation in dimensionalities 2–8”, *Phys. Rev. A*, vol. 40, pág. 428, 1989.

- [13] H. Kaufman, A. Vespignan, e B. B. M. L. Woog, “Parallel diffusion-limited aggregation”, *Phys. Rev. E*, vol. 52, pág. 5602, 1995.
- [14] E. Somfai, L. M. Sander, e R. C. Ball, “Scaling and crossovers in diffusion limited aggregation”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, pág. 5523, 2000.
- [15] B. B. Mandelbrot, B. Kol, e A. Aharony, “Angular gaps in radial diffusion-limited aggregation: two fractal dimensions and nontransient deviations from linear self-similarity”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, nº. 055501, 2002.
- [16] D. E. Wolf e J. Villain, “Growth with surface-diffusion”, *Europhys. Lett.*, vol. 13, pág. 389, 1990.
- [17] S. D. Sarma e P. Tamborenea, “A new universality class for kinetic growth: one-dimensional molecular-beam epitaxy”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, pág. 325, 1991.
- [18] S. F. Edwards e D. R. Wilkinson, “The surface statistics of a granular aggregate”, *Proc. R. Soc. Lond.*, vol. A381, pág. 17, 1982.
- [19] M. Kardar, G. Parisi, e Y. Zhang, “Dynamic scaling of growing interfaces”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, pág. 889, 1986.
- [20] S. D. Sarma e P. Punyindu, “A discrete model for non-equilibrium growth under surface diffusion bias”, *Surf. Scien. Lett.*, vol. 424, pág. 339, 1999.
- [21] S. V. Ghaisas, “Mounding formation and incoherent surface kinetics”, *Phys. Rev. E*, vol. 67, nº. 01061, 2003.
- [22] S. D. Sarmas, P. Punyindu, e Z. Toroczkai, “Non-universal mound formation in non-equilibrium surface growth”, *Surface Science Letters*, vol. 457, pág. 369, 2000.
- [23] S. C. Ferreira Jr. e S. G. Alves, “Pitfalls on the determination of the universality class of radial clusters”, *J. Stat. Mech.: Theory and Experiments*, vol. 11, pág. 1, 2006.
- [24] S. C. Ferreira Jr., S. G. Alves, A. F. Brito, e J. G. Moreira, “Morphological transition between diffusion-limited and ballistic aggregation growth patterns”, *Phys. Rev. E*, vol. 71, nº. 051402, 2005.
- [25] S. G. Alves e S. C. Ferreira Jr., “Is it really possible to grow isotropic on-lattice diffusion-limited aggregates?”, *J. Phys. A: Mathematical and General*, vol. 39, pág. 2843, 2006.
- [26] V. A. Bogoyavlenskiy, “How to grow isotropic on-lattice diffusion-limited aggregates”, *J. Phys. A: Mathematical and General*, vol. 35, pág. 2533, 2002.

- [27] S. G. Alves e S. C. Ferreira Jr., “Aggregation in a mixture of brownian and ballistic wandering particles”, *Phys. Rev. E*, vol. 73, n^o. 051401, 2006.
- [28] A. Czirók, E. Somfai, e T. Vicsek, “Experimental evidence for self-affine roughening in a micromodel of geomorphological evolution”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pág. 2154, 1993.
- [29] H.-O. Peitgen, H. Jürgens, e D. Saupe, *Chaos and fractals – new frontiers of science*. New York: Springer-Verlag, 1993.
- [30] P. Meakin e T. Vicsek, “Internal structure of diffusion-limited aggregates”, *Phys. Rev. A*, vol. 32, pág. 685, 1985.
- [31] P. Meakin, “Diffusion-controlled cluster formation in 2–6-dimensional space”, *Phys. Rev. A*, vol. 27, pág. 1495, 1983.
- [32] J. Kertész e D. E. Wolf, “Noise-reduction in Eden models - II. surface-structure and intrinsic width”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 21, pág. 747, 1988.
- [33] M. J. Vold, “Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension”, *Journal of colloid science*, vol. 18, pág. 684, 1963.
- [34] S. Liang e L. P. Kadanoff, “Scaling in a ballistic aggregation model”, *Phys. Rev. A*, vol. 31, pág. 2628, 1985.
- [35] P. S. Joag, A. V. Limaye, e R. E. Amritkar, “Scaling and shadowing effects in ballistic aggregation”, *Phys. Rev. A*, vol. 36, pág. 3395, 1987.
- [36] F. Family e T. Vicsek, “Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model”, *J. Phys. A: Mathematical and General*, vol. 18, pág. L75, 1985.
- [37] B. Dubuc, J. F. Quiniou, C. Roques-Carmes, C. Tricot, e S. W. Zucker, “Evaluating the fractal dimension of profiles”, *Phys. Rev. A*, vol. 39, pág. 1500, 1989.
- [38] J. G. Moreira, J. K. L. Silva, e S. O. Kamphorst, “On the fractal dimension of self-affine profiles”, *J. Phys. A: Mathematical and General*, vol. 27, pág. 8079, 1994.
- [39] Z.-W. Lai e S. D. Sarma, “Kinetic growth with surface relaxation: continuum versus atomistic models”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, pág. 2348, 1991.
- [40] J. Villain, “Continuum models of crystal-growth from atomic-beams with and without desorption”, *J. Phys. I*, vol. 1, pág. 19, 1991.
- [41] T. J. da Silva e J. G. Moreira, “Growth model with restricted surface relaxation”, *Phys. Rev. E*, vol. 66, n^o. 061604, 2002.

- [42] F. Family, “Scaling of rough surface: effects of surface diffusion”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 19, pág. L441, 1986.
- [43] J. M. Kim e J. M. Kosterlitz, “Growth in a restricted solid-on-solid model”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 62, pág. 2289, 1989.
- [44] M. J. Vold, “A numerical approach to the problem of sediment volume”, *Journal of Colloid Science*, vol. 14, pág. 168, 1959.
- [45] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander, e R. C. Ball, “Ballistic deposition on surface”, *Phys. Rev. A*, vol. 34, pág. 5091, 1986.
- [46] D. P. Landau e S. Pal, “Monte carlo simulations of simple models for thin film growth by MBE”, *Thin Solid Films*, vol. 272, pág. 184, 1996.
- [47] P. I. Tamborenea e S. D. Sarma, “Surface-diffusion-driven kinetic growth on one-dimensional substrates”, *Phys. Rev. E*, vol. 48, pág. 2575, 1993.
- [48] S. D. Sarma, C. J. Lanczycki, R. Kotlyar, e S. V. Ghaisas, “Scale invariance and dynamical correlations in growth models of molecular beam epitaxy”, *Phys. Rev. E*, vol. 53, pág. 359, 1996.
- [49] P. Šmilauer e M. Kotrla, “Crossover effects in the Wolf-Villain model of epitaxial growth in 1+1 and 2+1 dimensions”, *Phys. Rev. B*, vol. 49, pág. 5769, 1994.
- [50] S. D. Sarma, P. P. Chatrathorn, e Z. Toroczkai, “Universality class of discrete solid-on-solid limited mobility nonequilibrium growth models for kinetic surface roughening”, *Phys. Rev. E*, vol. 65, n^o. 036144, 2002.
- [51] H. Kallabis, L. Brendel, J. Krug, e D. E. Wolf, “Damping oscillations in layer-by-layer growth”, *Int. J. of Mod. Phys. B*, vol. 11, pág. 3621, 1997.
- [52] P. P. Chatrathorn e S. D. Sarma, “Layer-by-layer epitaxy in limited mobility nonequilibrium models of surface growth”, *Phys. Rev. E*, vol. 66, n^o. 041601, 2002.
- [53] L. Brendel, H. Kallabis, e D. E. Wolf, “Layer-by-layer in noise-reduced growth models”, *Phys. Rev. E*, vol. 58, pág. 664, 1998.
- [54] S. Park, H. Jeong, e B. Kahng, “Numerical test of the damping time of layer-by-layer growth on stochastic models”, *Phys. Rev. E*, vol. 59, pág. 6148, 1999.
- [55] A. L.-S. Chua, C. A. Haselwandter, C. Baggio, e D. D. Vvedensky, “Langevin equations for fluctuating surfaces”, *Phys. Rev. E*, vol. 72, n^o. 051103, 2005.

- [56] C. S. Ryu e I. mook Kim, “Crossover behaviours in a molecular-beam epitaxial growth model”, *Phys. Rev. E*, vol. 51, pág. 3069, 1995.
- [57] B. S. Costa, J. A. R. Euzébio, e F. D. A. A. Reis, “Finite-size effects on the growth models of Das Sarma and Tamborenea and Wolf and Villain”, *Physica A*, vol. 328, pág. 193, 2002.
- [58] D. D. Vvedensky, “Crossover and universality in the Wolf-Villain model”, *Phys. Rev. E*, vol. 68, pág. 010601, 2003.
- [59] M. Kotrla, A. C. Levi, e P. Šmilauer, “Roughness and nonlinearities in (2+1)-dimensional growth-models with diffusion”, *Europhys. Lett.*, vol. 20, pág. 25, 1992.
- [60] C. S. Ryu e I. mook Kim, “Solid-on-solid model with next-nearest-neighbor interaction for epitaxial growth”, *Phys. Rev. E*, vol. 52, pág. 2424, 1995.
- [61] J. Krug, M. Plischke, e M. Siegert, “Surface diffusion currents and the univerlaty classes of growth”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, pág. 3271, 1993.
- [62] S. D. Sarma e S. V. Ghaisas, “Solid-on-solid rules and models for nonequilibrium growth in 2+1 dimensions”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, pág. 3762, 1992.
- [63] M. Plischke e J. D. Shore, “Comment on “solid-on-solid rules and models for nonequilibrium growth in 2+1 dimensions””, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pág. 2509, 1993.
- [64] S. D. Sarma e S. V. Ghaisas, “Das Sarma and Ghaisas reply”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pág. 2510, 1993.
- [65] T. J. Silva, *Modelos de crescimento de interfaces rugosas*. Tese de Doutorado: Universidade Federal de Minas Gerais – Brasil, 2001.
- [66] A. Brú, S. Albertos, J. L. Subiza, J. L. Garcia-Asenjo, e I. Brú, “The universal dynamics of tumor growth”, *Biophys. J.*, vol. 85, pág. 2948, 2003.
- [67] A. Brú, J. M. Pastor, I. Feraud, I. Brú, S. Melle, e C. Berenguer, “Super-rough dynamics on tumor growth”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pág. 4008, 1998.
- [68] A. Brú, S. Albertos, J. A. L. Garcia-Asenjo, e I. Brú, “Pinning of tumoral growth by enhancement of the immune response”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 23, n^o. 238101, 2004.
- [69] M. S. Couto, S. F. Pinto, A. Atman, e S. G. A. *et al.*, “Granular fingers on jammed systems: new fluid-like patterns arising in grain-grain invasion experiments”, *submetido a Phys. Rev. Lett.*, 2006.
- [70] S. F. Pinto, *Formação de padrões em meios granulares*. Departamento de Física – UFV: dissertação de mestrado, 2006.

- [71] M. Eden, “A two-dimensional growth process”, (Berkeley), pág. 223, Proc. Fourth Berkeley Symp. on Math. Stat. and Prob., University of California Press, 1961.
- [72] G. J. Pettet, C. P. Please, M. J. Tindall, e D. L. S. McElwain, “The migration of cells in multicell tumor spheroids”, *Bull. Math. Biol.*, vol. 63, pág. 231, 2001.
- [73] P. Devillard e H. E. Stanley, “Scaling properties of Eden clusters in three and four dimensions”, *Physica A*, vol. 34, pág. 298, 1989.
- [74] J. G. Zabolitzky e D. Stauffer, “Simulation of large Eden clusters”, *Phys. Rev. A*, vol. 34, pág. 1523, 1986.
- [75] M. T. Batchelor e H. I. Henry, “Limits to Eden growth in two and three dimensions”, *Phys. Lett. A*, vol. 157, pág. 229, 1991.
- [76] F. Leyvraz, “The active perimeter in cluster growth-models - a rigorous bound”, *J. Phys. A*, vol. 18, pág. L941, 1985.
- [77] C. Y. Wang, P. L. Liu, e J. G. Bassingthwaite, “Off-lattice Eden-C cluster growth model”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 28, pág. 2141, 1995.
- [78] C. Y. Wang e J. G. Bassingthwaite, “Biological growth on a surface”, *Math. Biosci.*, vol. 142, pág. 91, 1997.
- [79] S. S. Cross, “Fractals in pathology”, *J. Pathol.*, vol. 182, pág. 1, 1997.
- [80] S. C. Ferreira Jr., M. L. Martins, e M. J. Vilela, “Morphological transitions induced by chemotherapy in carcinomas in situ”, *Phys. Rev. E*, vol. 65, n^o. 021907, 2002.
- [81] T. S. Deisboeck, M. E. Berens, A. R. Kansal, S. Torquato, e A. O. Stemmer-Racha, “Pattern of self-organization in tumour systems: complex growth dynamics in a novel brain tumour spheroid model”, *Cell Prolif.*, vol. 34, pág. 115, 2001.
- [82] P. Meakin, “Effects of particle drift on diffusion-limited aggregation”, *Phys. Rev. B*, vol. 28, pág. 5221, 1983.
- [83] Y. Kim, K. R. Choi, e H. Pak, “Aggregates with biased random walks on a square lattice”, *Phys. Rev. A*, vol. 45, pág. 5805, 1992.
- [84] Y. Kim e K. R. Choi, “Anisotropies in aggregates with biased random walks on two-dimensional lattices”, *Phys. Rev. E*, vol. 48, pág. 1586, 1993.
- [85] T. Natagani, “Growth model with phase transition: drift-diffusion-limited aggregation”, *Phys. Rev. A*, vol. 39, pág. 438, 1989.

- [86] M. Castro, R. Cuerno, A. Sánchez, e F. Domínguez-Adame, “Multiparticle biased diffusion-limited aggregation with surface diffusion: a comprehensive model of electrodeposition”, *Phys. Rev. E*, vol. 62, pág. 161, 2002.
- [87] Y. Kim, “Surface structures of depositions from biased random walks to the substrate”, *J. Korean Phys. Soc.*, vol. 30, pág. 511, 1997.
- [88] C. Tang e S. Liang, “Patterns and scaling properties in a ballistic deposition model”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pág. 2769, 1993.
- [89] J. Yu e J. G. Amar, “Dynamical scaling behavior in two-dimensional deposition with shadowing”, *Phys. Rev. E*, vol. 66, n.º. 021603, 2002.
- [90] V. A. Bogoyavlenskiy, “Bridge from diffusion-limited aggregation to the Saffman-Taylor problem”, *Phys. Rev. E*, vol. 63, n.º. R045305, 2001.
- [91] S. C. Ferreira Jr., “Effects of the screening breakdown in the diffusion-limited aggregation model”, *Eur. Phys. J. B*, vol. 42, pág. 263, 2004.
- [92] C. Moukarzel, “Laplacian growth on a random lattice”, *Physica A*, vol. 190, pág. 13, 1992.
- [93] P. W. Barker e R. C. Ball, “Real-space renormalization of diffusion-limited aggregation”, *Phys. Rev. A*, vol. 42, pág. 6289, 1990.
- [94] C. Amitrano, A. Coniglio, P. Meakin, e M. Zannetti, “Multiscaling in diffusion-limited aggregation”, *Phys. Rev. B*, vol. 44, pág. 4974, 1991.
- [95] J. Kolega, “The movement of cell clusters *in vitro*: morphology and directionality”, *J. Cell Sci.*, vol. 49, pág. 15, 1981.